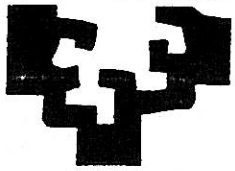
EUSKAL HERRIKO UNIBERTSITATEA

eman ta zabal zazu



TUNEL ESPEKTROSKOPIAZ ETA SOLIDOETAKO ELEKTROI- ETA FOTOI-EMISIOAZ

JOSE M. PITARKE DE LA TORRE-k

Zientzia Fisikoetan Doktore-gradua lortzeko aurkezturiko txostena

Leioa, 1990.eko Uztaila

Neure eskerrik beroenak eman nahi dizkiet, lan hau burutzen nola edo hala lagundu didaten guztiei. Bereziki,

Lan honen zuzendaria izan den *Pedro Miguel Etxenike Landiribar* irakasleari, bere zuzendaritza adituaren bidez ikerkuntzaren arlo honetan barneratu nauelako.

Estatu Batuetako Oak Ridge National Laboratory-ko *Rufus Haynes Ritchie* irakasleari eta Madrid-eko Unibertsitate Autonomoko *Fernando Flores* irakasleari, txosten honetan azaltzen diren emaitzetariko batzu berekin eztabaidatzeko aukera eman didatelako.

Cambridge-ko Cavendish Laborategiko *Chris Nex* doktoreari, lan honetan azaltzen diren emaitza numerikoetariko batzu beraren laguntzarik gabe lortzea ezinezkoa izango bait zatekeen.

Donostiako Kimika Fakultateko Materialen Fisikaren Saileko *Alberto Rivacoba* doktoreari eta Leioako Zientzi Fakultateko Fisika Teorikoaren eta Zientziaren Historiaren Saileko *Juan M. Agirregabiria* doktoreari, txosten honetan erakusten diren emaitza numerikoak lortzeko eman didaten aholku eta laguntzarengatik.

Leioako Zientzi Fakultateko Materia Kondentsatuaren Fisikaren Sailari, kalkulu numerikoak burutzeko beraien konputagailua erabili ahal izan dudalako.

Leioako Zientzi Fakultateko Fisika Teorikoaren eta Zientziaren Historiaren Saileko lankide guztiei, beraien artean lan eginez topatu dudan giro atseginagatik, eta bereziki, *Jose Ramon Etxebarria* doktoreari, idazkera orrazten eta ingelesezko jatorrizko hitzak euskaratzen laguntzeko prest egon bait da.

AURKIBIDEA

1. **Sarrerra** 1

2. **Tunel mikroskopioa: tunel espektroskopia** 5

2.1. Sarrera 7

2.2. Tunel-korrontea 12

WKB hurbilketa 14

Batezbesteko langaren hurbilketa 15

Tentsio txikiko heina 17

Tentsio handiko heina 18

2.3. Transmisio-erresonantziak 20

Irudi-potentziala 26

Tunel-ezaugarriak: s-V_a eta dI/dV_a-V_a 31

2.4. Hutseango potentzial-langa: eredu unidimentsionala 39

Bi gainazalen arteko potentzial-langa parametrizatua 40

Tunel-ezaugarriak: s-V_a eta dI/dV_a-V_a 45

2.5. Gainazal-geometria: hurbilketa tridimentsionala 49

Tunel-azalera eraginkorra 52

Tunel-ezaugarriak: s-V_a eta dI/dV_a-V_a 57

2.6. Itxurazko potentzial-langa 62

Ideia orokorrak 63

Separazio handiko heina: batezbesteko langaren hurbilketa 67

Separazio txikiko heina: kalkulu zehatza 73

Bibliografia 81

3. **Ioi-bikote azkarren eta solidoetako elektroien arteko elkarrekintza: kolisio-elektroien emisioa** 89

3.1. Sarrera 91

3.2. Elektroi-dentsitatearen fluktuazioak 93

3.3. Ioi-bikote azkarren eraginpeko elektroien sakabanaketa:

metodo perturbatiboa 98

Born-en bigarren ordenako hurbilketa 101

Balentzi elektroien momentu banaketaren ekarpena 108

3.4. Ioi-bikote azkarren eraginpeko elektroien sakabanaketa: metodo ez-perturbatiboa 114

Eranskina: Z kargadun partikula batek sorterazitako (3.54) potentzialari dagokion bigarren ordenako sakabanaketa-anplitudea 119

Bibliografia 120

4. Kanalizaturiko ioien erradiazio-emisioaren bidezko elektroi-harrapaketa 125

4.1. Sarrera 127

4.2. REC probabilitateak 129

4.3. Solidoaren elektroi lotu baten harrapaketa 133

4.4. Dentsitate lokaleko hurbilketa 138

Uhin launak 138

Uhin coulombiarrak 141

Batezbesteko estatistikoa 143

REC gailur-energiak: energiaren defizita 145

Erdi-zabalerak eta sekzio eraginkor diferentzialak 150

Eranskina: (4.60) eta (4.63) adierazpenen eratorpena 153

Bibliografia 156

5. Laburpen etaondorioak 159

1. SARRERA

Fisikaren helburuetariko bat materiaren egitura eta materia osotzen duten partikulen bakarkako jokabidea zein jokabide kolektiboa aztertzea izan da urteetan zehar. Materiaren propietateen berri izateko informazio-iturri garrantzitsuenetariko bat, materia era ezberdineko partikula kargaturekin interakziona eraztea izan da, eta era honetako experimentuak interpretatu ahal izatearen behar izanak, nahitaezko egin du materiaren eta berarekin interakzionatzen ari diren partikula kargatuen arteko elkarrekintzak aztertzea; izan ere, era honetako ikerkuntza teoriko zein experimentalek zeregin handia bete dute mende honetako Fisikaren garapenean, fisikaririk ospetsu eta argienetariko batzuren gidaritzapean.

Horrelatan, bada, α partikulak erabili zituen Rutherford-ek 1911. urtean, atomoaren egituraren berri jaso asmoz, eta Böhr-ek 1913. urtean lan aitzindaria plazaratu zuen, α partikulek materia zeharkatzean jasaten duten balaztatze-indarra kalkulatuz. Hurrengo hamarkadan, Mekanika Kuantikoa garatu bezain laster, materiaren eta partikula kargatuen arteko elkarrekintzaren azterketa mekaniko-kuantikoak hasiak ziren jadanik.

Garai hartako lan teorikoak burutu zirenetik hona, lan ugari eman da argitara, materiaren eta ioien arteko elkarrekintzen azterketa teoriko zein experimentalak burutuz. Halaber, elektroiak ere erabiltzen izan dira materiaren egituraren berri jasotzeko, Mekanika Kuantikoak aurresandako materiaren uhin-gorpuzkulu bikoiztasunean oinarrituriko mikroskopio elektronikoa, eremu-emisiozko mikroskopioa zein tunel mikroskopioa diseinatu direnetik hona, bereziki.

Lan honetan partikula kargatuen eta materia kondentsatua osotzen duten elektroien arteko elkarrekintzarekin zerikusirik duten zenbait arlo aztertzen da teorikoki, beti ere lorturiko emaitza teorikoak gertu dauden emaitza experimentalekin konparatuz. Honetarako, solidoaren gel eredua aukeratzen dugu, hau da, nukleoak sorterazitako potentzial periodikoaren ordez solidoaren elektroien batezbesteko karga negatiboa ezereztatu egiten duen karga positiboko hondo uniformea kontsideratzen dugu, eta solidoaren elektroien arteko elkarrekintzak baino ez ditugu kontutan hartuko, beraz. Bestalde, 0K-etako tenperaturak kontsideratzen ditugu, lan honetan lorturiko emaitzetan tenperaturaren eragina arbuiagarria suertatzen bait da.

Bigarren atalean tunel mikroskopioaz baliaturik lorturiko emaitza experimentaletaz baliatzen gara, gainazaletako elektroien arteko elkarrekintzak aztertzeko asmoz. Bereziki, bi

metalen arteko hutsean zeharko tunel-korrontea kalkulatu eta eremu-emisiozko eran ematen den erresonantzia fenomenoaren berri eman ondoren, hutseango potentzial-langaren azterketari ekiten diogu, eredu unidimentsionaletaz baliaturik lehenengo, eta azterketa tridimentsionala buruturik ondoren, geometriak betetzen duen zeregina agerian jarriz. Azkenik, tunel mikroskopioaren tunel elektroiek jasaten duten "itxurazko potentzial-langa"-ren azterketa teorikoa burutzen da.

Hirugarren eta laugarren ataletan materia kondentsatua zeharkatzen duten ioi azkarren eta materiaren arteko elkarrekintzetaz arduratzen gara. Ioi azkarrek materia kondentsatua zeharkatzean sorterazten duten potentzialaren nahiz elektroi-desplazamenduaren berri jasotzeko experimentu ugari burutu da azken urteotan; bereziki, oraintsu buruturiko experimentu batetan ioi molekular diatomiko azkarrak jaurtiki dira, materia kondentsatua zeharka eraziz, eta honen ondorioz igorriak diren elektroi-banaketak neurtu dira, jaurtikiriko agregatuen orientazioaren funtzioan. Hirugarren atalean experimentu honetan lorturiko emaitzen interpretazioa ematen da; honetarako, bigarren ordenako perturbazioen teoriaz baliatzen gara lehenengo, eta sakabanaketaren teoria mekaniko- kuantikoa energia txikiko elektroi-difrakzioaren teorian garaturiko metodoekin konbinatzen dugu ondoren.

Langarren atalean erradiazioaren teoria kuantikoaz baliatzen gara, solidoetan zehar ioi azkarrak kanalizatzean sorterazitako erradiazio-emisioaren bidezko elektroi-harrapaketaren prozesuak aztertzeko, eta berriki buruturiko experimentuen interpretazioa ematen dugu, dentsitate lokaleko hurbilketa erabiliz.

Bostgarren atalean ondorioak laburbiltzen dira.

Azkenik, diogun, lan honetan zehar unitate atomikoak erabiltzen ditugula, aurkakorik esaten ez den bitartean. Unitate-sistema honetan $\hbar = m_e = e^2 = 1$ dugu, non $\hbar$, m_e eta e, Planck-en konstante laburtua ($\hbar = h/2\pi$), elektroiaren pausaguneko masa eta elektroiaren karga diren, hurrenez hurren ; bestalde, luzera unitatea Böhr-en erradioa da, $a_0 = \hbar^2/m_e^2 =$ 0.529Å, energi unitatea, Hartree delakoa, 1 Hartree $= e^2/a_0 = 27.2$eV, eta abiadura-unitatea, Böhr-en abiadura, $v_0 = \alpha c = 2.19\text{x}10^8$ cm s^{-1}, α eta c, egitura meheko konstantea eta argiaren abiadura izanik, hurrenez hurren.

2. TUNEL MIKROSKOPIOA: TUNEL ESPEKTROSKOPIA

2.1. Sarrera

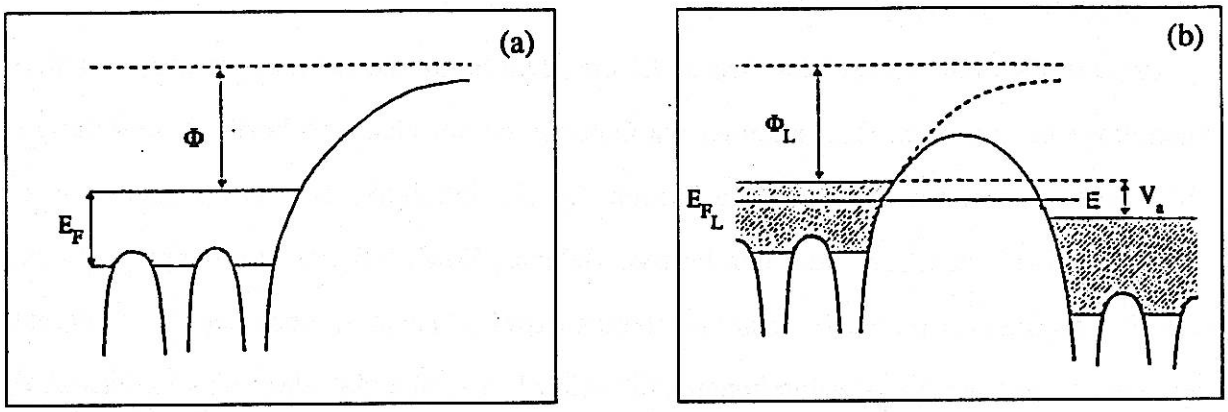
Ezaguna da objektu kuantikoak partikula klasikoek ezin zeharka dezaketen potentzial-langetan zehar higi daitezkeela. Era honetara, oinarrizko partikulek indar nuklear eta atomikoek sorturiko potentzial-langak zeharkatzeko probabilitate ez-nulua dute, experientziak behin eta berriro erakutsi duen bezala.

Izan ere, Schrödinger-ek Uhin-Mekanika plazaratu bezain laster[1] tunel efektu mekaniko kuantikoaz baliatu ziren Oppenheimer eta Gamow, eremu elektriko bortitzen eraginpeko hidrogeno-atomoaren egoera kitzikatuen autoionizazioa[2] eta nukleo pisutsuen α desintegrazioa[3] azaltzeko, hurrenez hurren. Halaber, Fowler-ek eta Nordheim-ek eremu elektriko bortitzen eraginpeko metal hotzetako elektroi-emisioaren fenomenoaren azterketa xehatua burutu zuten[4]; fenomeno honetan oinarriturik, eremu emisiozko[5] eta ioi emisiozko[6] mikroskopioak diseinatu ziren.

Lan aitzindari haiek burutu zirenetik hona, asko izan dira objektu kuantikoek potentzial-langak zeharkatzeko duten ahalmenari esker diseinaturiko aparailuak. Urte asko itxaron behar izan da, aldiz, hutsean zeharreko tunel-korrontearen berri experimentala jaso arte[7-10]; azkenik, 1981. urtean Binnig-ek eta Rohrer-ek, bi metalen arteko hutsean zeharreko tunel-korrontea kontrolatuz, tunel mikroskopioa diseinatu zuten[11-14], gainazaletako atomoen posizioak bereizmen handiz ikustea lortu zutelarik.

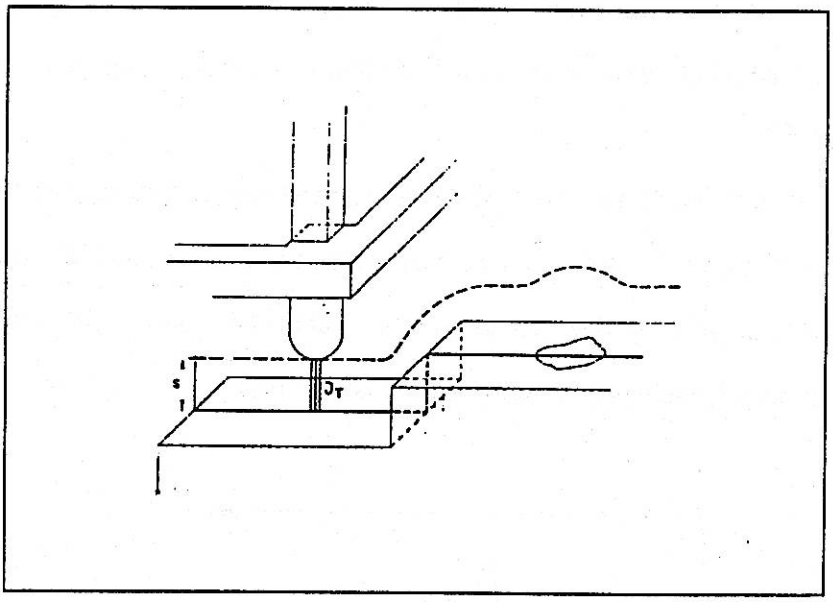
Metaletako nukleoek sorterazitako potentzial-langek ezabatu egiten dute elkar, 2.1a irudian adierazten den bezala, eta korronte elektrikoa sorterazten duten elektroiak, elektroi eroaleak alegia, libreki higi daitezke eroankortasun-bandetan; gainazalean, ordea, elektroiak metalaren barrualdean gordetzen dituen potentzial-langa dugu, hots, hutseango potentzial-langa; potentzial-langa hau finitua denez, ostera, metaleko elektroi eroaleen uhin-funtzioa metaletik kanpora hedatzen da; elektroiek hutsean aurkituak izateko probabilitate ez-nulua dute alegia, probabilitate hau gainazalareriko distantziarekin oso azkar txikiogotzen delarik ere. Hortaz, bada, gainazalarekiko oso distantzia txikira beste metal bat jarri eta bi gainazalen artean potentzial-diferentzia ez-nulua sorteraziz gero, elektrodo negatiboko elektroiek hutseango potentzial-langa zeharka dezakete, 2.1b irudian adierazten den bezala, tunel-korrontea

sorteraziz. Behin bi elektrodoen arteko oreka lortuz gero, bien Fermi-ren mailak berdindu egingo dira[15], eta beharrezkoa da, beraz, bien arteko tentsio ez-nulua sorteraztea, elektrodo negatiboko elektroiek elektrodo positiboan beterik gabeko egoera elektronikoak bete ahal izan ditzaten, tenperatura 0K-etakoa denean behinik behin.

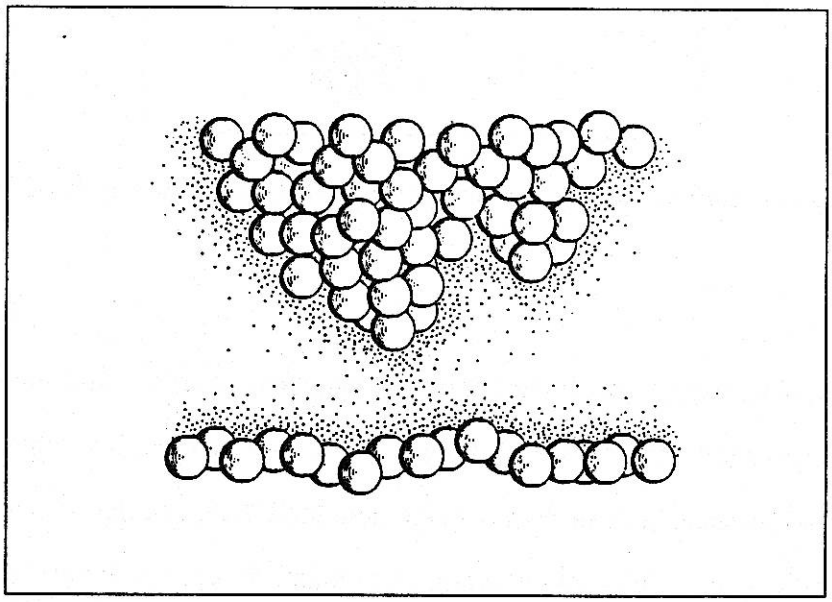


2.1 irudia. a) Metalezko gainazal batetako elektroien energia potentziala; E_F eta Φ direlakoek Fermi-ren maila eta lan-funtzioa adierazten dute, hurrenez hurren. b) Metalezko bi gainazalen arteko potentzial-langa; V_a, bi elektrodoen artean sorterazitako potentzial diferentzia da, eta E, hutseango potentzial-langa zeharka dezakeen elektroi baten energia.

Ezaguna da, bestalde, era honetara sorterazitako tunel-korrontea exponentzialki txikiagotzen dela bi gainazalen arteko distantzia areagotzean; izan ere, tunel-korrontea 10 aldiz txikiagotzen da, gutxi gorabehera, tunel-distantziak 1Å-etako gehikuntza jasaten duen bakoitzean. Ondorioz, aztertu nahi den laginaren gainazalean barrena metalezko punta bat lagina ukitu gabe higi eraziz, puntak jasango dituen desplazamendu bertikalek maila atomikoko bereizmenaz emango digute gainazalaren irudi erreala, tunel-korrontea konstante iraun eraziz gero, 2.2 irudian adierazten den bezala[16]. Izan ere, bi gainazalen artean eremu elektriko bortitzak sorteraziz experimentua behin eta berriro burutuz gero, 2.3 irudian adierazten den itxura hartzen du puntak; hortaz, tunel-korrontearen azalera eraginkorra oso txikia bilakatuko da, aldetako bereizmen handia lortuz.



2.2 irudia. Tunel mikroskopioa (13. erreferentziatik hartua).

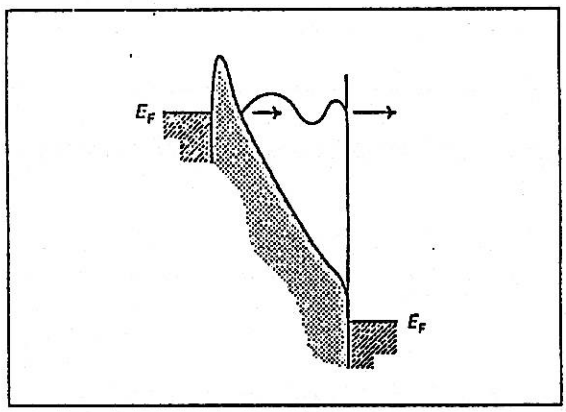


2.3 irudia. Puntaren eta laginaren atomoak (14. erreferentziatik hartua).

Alabaina, tunel mikroskopioaren berehalako aplikazioa gainazalen irudi topografikoak lortzea[17-19] izanik ere, gainazaletako elektroiek topatzen duten hutseango potentzial-langa neurtu eta tunel-elektroien eta gainazalen arteko elkarrekintza mekaniko-kuantikoen berri jasotzeko ere baliagarria suertatzen dela frogatu da, punta delakoa laginaren gainazalarekiko norabide perpendikularrean higi eraziz, tentsioa edo tunel-korrontea konstante iraun

eraginik[20-24]. Izan ere, tunel-korrontearen bi elektrodoen arteko distantziarekiko menpekatasunaren neurketa experimentalak hutseango potentzial-langaren altueraren berri eman diezaguke[21-22].

Bestalde, bi elektrodoen artean sorterazitako potentzial-diferentzia elektrodo positiboaren lan-funtzioa baino handiagoa denean, 2.4 irudian adierazten den bezala, elektrodo negatiboko elektroiek energia zinetiko positiboko espazioaldea aurkituko dute elektrodo positibora iritsi aurretik, hutseango potentzial-langa zeharkatu bezain laster.



2.4 irudia. Eremu-emisioa (J. Gimzewski, Physics World 225 (1989) delako erreferentziatik hartua).

Eremu-emisioa dugu, kasu honetan, elektrodo negatiboaren gainazalean, eta hutsean partzialki konfinaturik dauden uhin-elektroniko geldikorrak neur daitezke hutseango energia zinetiko positiboko espazioaldean. Espazioalde honetan bilakatzen den potentzial-putzuaren hormak infinituak balira, elektroiaren energia kuantizaturik egonen litzateke, eta elektroien egoera geldikor hauek zabaldu egingo dira, transmisio-erresonantziak bilakatuz, hormak finituak direnean. Hortaz, tentsioa handiagotuz gero, tunel-elektroiek transmisio-erresonantzia berri bat jasango dute Fermi-ren mailen arteko separazioak behar den balioa lortzen duen bakoitzean, eta transmisio-erresonantzion berri experimentala jaso daiteke[24-27]. Transmisio-erresonatzia hauek, bestalde, hutseango potentzial-langaren eta, bereziki, elektrodo positiboaren gainazal-potentzialaren eitearekiko menpekotasun handia dutelarik[28-30], beraien neurketa experimentalak tunel-elektroiek jasaten duten potentzial-langaren berri eman

diezagukete.

2.2 atalean metalezko bi gainazal laun eta paraleloren arteko tunel-korrontea kalkulatzen da eta berau kalkulatzeko orduan erabili ohi diren WKB hurbilketen baliagarritasu-maila aztertzen da, xehetasunez; atal honetan ez da emaitza berririk lortzen, baina bertan erakutsitako korronte-dentsitatearen adierazpenak hurrengo ataletan erabiliak izango dira, alde batetik, eta bertan egiten dugun adierazpen hauen baliagarritasun-mailaren azterketa beharrezkoa dugu, bestetik, itxurazko potentzial-langak kalkulatzeko orduan zenbait ikerlarik lorturiko emaitzen arteko ez-adostasunaren jatorria ulertzeko, 2.6 atalean ikusiko den bezala. 2.3 atalean transmisio-erresonantzien jatorria aztertzen da, erresonantzia hauek experimentalki lorturiko separazioa-tentsioa, s-V_a, eta konduktantzia-tentsioa, dI/dV_a-V_a, direlako ezaugarriek erakutsitako oszilazioekin duten erlazioa agerian jarriz. 2.4 atalean tunel ezaugarrion azterketa xehatua egiten da[29-30], hutseango potentzial-langaren eitearen berri jasotzeko asmoz, eta trukatze zein koerlazio efektu lokal zein ez-lokalen berri ematen duen potentzial-eredu parametrizatua proposatu eta aztertu egiten da. 2.5 atalean s-V_a nahiz dI/dV_a -V_a direlako ezaugarriek puntaren geometriarekiko duten menpekotasunaren azterketa tridimentsionala egiten da, puntaren kurbadura-erradioaren balioa ikertuz[30]. Ondoren, 2.6. atalean, metalezko bi gainazalen arteko hutseango itxurazko potentzial-langaren azterketa egiten da[31], bi gainazalen arteko separazioaren funtzioan, 2.3 eta 2.4 ataletan azterturiko potentzial-ereduetarako, irudi-potentzialak duen eragina aztertuz eta eragin honen gainean azken urteotan piztu den eztabaida argituz. Azkenik, bibliografia ematen da.

2.2.Tunel-Korrontea

Tunel mikroskopioa osotzen duten elektrodoen arteko tunel-korrontea kalkulatzeko orduan hurbilketa ezberdinak erabiltzen izan dira. Alde batetik, bi elektrodoen arteko potentzial-diferentzia oso txikia deneko kasuan bereziki, Bardeen-ek[32] garaturiko hamiltondarraren transferentziaren formalismoa erabili da[33-37]; hurbilketa honetan, tunel-korrontea perturbazioaren teoriaz baliaturik lortzen da, behin elektrodo bakoitzari dagozkion uhin-funtzio eta egoera-dentsitateak kalkulatuz gero. Lang-ek, bestalde, antzeko metodoak erabili ditu[38-40], bi elektrodoei dagozkien uhin-funtzio autobateragarriak erabiliz. Beste aldetik, elektroi askeen hurbilketa eginez kalkula daitezke tunel-korronteak, behin bi elektrodoen arteko hutseango potentzial-langa zeharkatzen duten elektroien transmisio-probabilitateak kalkulatu ondoren[41,43]; izan ere, era honetara kalkulatzen dira, lan honetan, tunel-korronteak, helburuetariko bat gainazal-potentzialen eitearen berri jasotzea bait da.

Atal honetan, hutsak banaturiko metalezko bi elektrodo erdi-infinitu kontsideratzen ditugu, L eta R, beraien gainazalak laun eta paraleloak izanik. z ardatza, bestalde, bi gainazal hauekiko perpendikularra dela emango dugu, L elektrodoa $z < 0$ espazioaldean kokaturik dagoelarik.

Tunel-elektroien arteko elkarrekintzak arbuiatuz gero, bi elektrodoen arteko hutsean zeharreko tunel-korrontea metal-hutsa-metal delako sistemaren egoera elektroniko guztien ekarpenen arteko batura dugu; hortaz, elektroiaren momentuaren balio bakoitzari spin ezberdineko bi egoera elektroniko dagozkiola kontutan izanik, ondokoa dugu L eta R elektrodoen arteko korronte-dentsitatea:

$$J_{L\to R} = 2\sum_{k} J_z(k)\left[f(E) - f(E+V_a)\right] \quad , \tag{2.1}$$

R eta L elektrodoen arteko potentzial-diferentzia V_a denean. Adierazpen honetan, $J_z(k)$ delakoa k uhin-bektoredun elektroien korronte-dentsitatearen z ardatzarekiko osagaia da:

$$J_z(k) = \frac{1}{V} D(E_z)\, k_z \quad , \tag{2.2}$$

non V delakoa sistemaren normalizazio-bolumena den, eta $D(E_z)$, denborarekiko menpekotasunik ez duen Schrödinger-en ekuazio unidimentsionala askatuz aurki daitekeen E_z energiadun elektroiaren transmisio-probabilitatea[44], E_z, energiaren z osagaia izanik:

$$E_z = \frac{1}{2} k_z^2 + U_L \ , \tag{2.3}$$

$f(E)$, bestalde, Fermi-Dirac-en banaketa-funtzioa dugu:

$$f(E) = \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right) \right]^{-1} \ , \tag{2.4}$$

non E delakoa elektroiaren energia den, E_F, Fermi-ren energia, k_B, Boltzmann-en konstantea, eta T, sistemaren tenperatura.

Uhin-bektoreak har dezakeen balio bakoitzari $\boldsymbol{k}$ espazioan dagokion bolumena $\Delta \boldsymbol{k} = (2\pi)^3/V$ da; $\Delta \boldsymbol{k} \rightarrow 0$, hots, $V \rightarrow \infty$ deneko limitean, beraz, honela berridatz dezakegu (2.1) delako adierazpena:

$$J_{L \rightarrow R} = \int_{U_L}^{\infty} dE_z \, n(E_z) \, D(E_z) \ , \tag{2.5}$$

non $dE_z \, n(E_z)$ delakoa L elektrodoaren gainazala azalera eta denbora-unitateko zeharkatzen duen eta energiaren z osagaia $[E_z, E_z + dE_z]$ tartean duen elektroi-kopurua den, n ondokoa izanik:

$$n(E_z) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} dE_{\parallel} \left[f(E) - f(E + V_a) \right] \ , \tag{2.6}$$

eta $E_{\parallel}$, elektroiaren energiak z ardatzaren plano perpendikularrean duen osagaia, hots,

$$E_{\parallel} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{k} - k_z \boldsymbol{z} \right)^2 , \tag{2.7}$$

$\boldsymbol{z}$ delakoa z erdiardatz positiboaren norabide eta norantza dituen bektore unitarioa izanik.

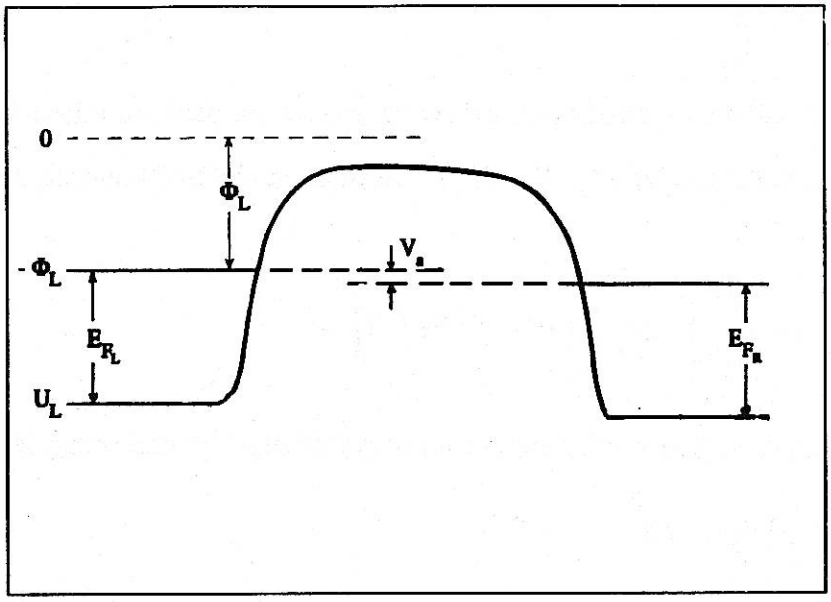
Sistemaren tenperatura 0°K-etakoa deneko kasuan, hauxe dugu (ikus 2.5 irudia):

$$n(E_z)=\begin{cases}\dfrac{1}{2\pi^2}V_a & ,U_L \le E_z \le -\Phi_L - V_a \\ \dfrac{1}{2\pi^2}(-\Phi_L - E_z) & ,-\Phi_L - V_a \le E_z \le -\Phi_L \\ 0 & ,-\Phi_L \le E_z \ ,\end{cases} \tag{2.8}$$

eta, ondorioz[45,46]:

$$J=\frac{1}{2\pi^2}\left[V_a\int_{U_L}^{-\Phi_L - V_a} dE_z\, D(E_z) + \int_{-\Phi_L - V_a}^{-\Phi_L} dE_z\,(-\Phi_L - E_z)\, D(E_z)\right], \tag{2.9}$$

energiak L elektrodoaren hutsaren mailarekiko adieraziz, U_L eta Φ_L direlakoak L elektrodoaren barne-potentziala eta lan-funtzioa izanik, hurrenez hurren. Diogun, bestalde, hutsean zeharreko tunel experimentuetako ohizko potentzial-langetarako tenperaturaren eragina arbuiagarria dela[10].



2.5 irudia. Hutsak banaturiko metalezko bi elektrodo erdi-infinituen energi diagrama.

WKB hurbilketa

Transmisio-probabilitateak kalkulatzeko Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) hurbilketa erabil badezagu, zera lor dezakegu[47]:

$$D(E_z) = \exp\left\{ -2\sqrt{2} \int_{s_1(E_z)}^{s_2(E_z)} dz \left[-\Phi_L + \varphi(z) - E_z \right]^{1/2} \right\} , \qquad (2.10)$$

non $\varphi(z)$ delakoa hutseango potentzial-langak elektrodo negatiboaren Fermi-ren mailarekiko duen balioa den, eta $s_1(E_z)$ eta $s_2(E_z)$ direlakoak, E_z energiadun elektroiak energia zinetiko nulua dueneko posizioen z koordenatuen balioak.

(2.10) ekuazioa integraturik, zera lortzen da[45]:

$$D(E_z) = \exp\left[-\alpha(E_z) \left(-\Phi_L + \bar{\Phi}(E_z) - E_z \right)^{1/2} \right] . \qquad (2.11)$$

Adierazpen honetan,

$$\alpha(E_z) = 2\sqrt{2}\, \beta(E_z)\, \Delta s(E_z) , \qquad (2.12)$$

non

$$\beta(E_z) = 1 - \frac{1}{\Delta s(E_z)} \int_{s_1(E_z)}^{s_2(E_z)} dz \, \frac{1}{8} \left(\frac{\varphi(z) - \bar{\Phi}(E_z)}{-\Phi_L + \bar{\Phi}(E_z) - E_z} \right)^2 \qquad (2.13)$$

den, 3. ordenako eta ordena altuagoko gaiak arbuiatuz gero, $\Delta s(E_z)$ delakoa, honako hau,

$$\Delta s(E_z) = s_2(E_z) - s_1(E_z) \qquad (2.14)$$

eta

$$\bar{\Phi}(E_z) = \frac{1}{\Delta s(E_z)} \int_{s_1(E_z)}^{s_2(E_z)} dz \, \varphi(z) . \qquad (2.15)$$

Batezbesteko langaren hurbilketa

Sarritan, (2.12) eta (2.15) adierazpenek definituriko magnitudeek E_z-rekiko duten

menpekotasuna txikia delako hipotesia eginez, *batezbesteko langaren hurbilketa*, MBA, erabili ohi da transmisio-probabilitateak kalkulatzeko[45,48]:

$$D(E_z) = \exp\left[-\alpha\,(-\Phi_L + \bar{\Phi} - E_z)^{1/2}\right], \tag{2.16}$$

non

$$\alpha = \alpha(-\Phi_L) = 2\sqrt{2}\;\beta(-\Phi_L)\,\Delta s(-\Phi_L) \tag{2.17}$$

eta

$$\bar{\Phi} = \bar{\Phi}(-\Phi_L) = \frac{1}{\Delta s(-\Phi_L)} \int_{s_1(-\Phi_L)}^{s_2(-\Phi_L)} dz\;\varphi(z) \tag{2.18}$$

diren. $\bar{\Phi}$ delakoari batezbesteko potentzial-langa deritzo.

Gaur egun tunel mikroskopioaz baliaturik lortzen diren elektrodoen arteko separazio txikietarako, ordea, $\alpha(E_z)$ zein $\bar{\Phi}(E_z)$ direlakoek E_z-rekiko duten menpekotasuna ez da arbuiagarria, hutseango potentzial-langa trapezoidala ez bada behinik behin, eta batezbesteko langaren hurbilketa ez da, beraz, baliagarria izango. Izan ere, separazio txikitarako ($s \lesssim 10\text{Å}$) korronte-dentsitate handiegiak aurresaten ditu hurbilketa honek[49].

(2.16) ekuazioak emaniko transmisio-probabilitatea (2.9) adierazpeneko integraletara eramanik eta integral hauek eginez, honako hau aurkitzen da:

$$J = \frac{2}{\pi^2 \alpha^2}\left\{ \bar{\Phi}\left[1 + 3\,\alpha^{-1}\bar{\Phi}^{-1/2} + 3\,\alpha^{-2}\bar{\Phi}^{-1}\right] e^{-\alpha\bar{\Phi}^{1/2}} \right.$$

$$-(\bar{\Phi}+V_a)\left[1 + 3\,\alpha^{-1}(\bar{\Phi}+V_a)^{-1/2} + 3\,\alpha^{-2}(\bar{\Phi}+V_a)^{-1}\right] e^{-\alpha(\bar{\Phi}+V_a)^{1/2}}$$

$$\left. -\frac{1}{2}V_a\left[1 + \alpha(\bar{\Phi}+E_F)^{1/2}\right] e^{-\alpha(\bar{\Phi}+E_F)^{1/2}} \right\}, \tag{2.19}$$

non E_F delakoa elektrodo negatiboaren Fermi-ren energia den. Adierazpen honetako giltzen arteko azken gaia arbuiagarria da, ohizko Fermi-ren energia eta lan-funtzioetarako, $s \gtrsim 5\text{Å}$ denean, beste gaiekin konparaturik, eta zera idatz dezakegu, beraz:

$$\frac{J}{M}=\frac{2}{\pi^2\alpha^2}\left\{\bar{\Phi}\left[1+3\alpha^{-1}\bar{\Phi}^{-1/2}+3\alpha^{-2}\bar{\Phi}^{-1}\right]e^{-\alpha\bar{\Phi}^{1/2}}\right.$$

$$\left.-(\bar{\Phi}+V_a)\left[1+3\alpha^{-1}(\bar{\Phi}+V_a)^{-1/2}+3\alpha^{-2}(\bar{\Phi}+V_a)^{-1}\right]e^{-\alpha(\bar{\Phi}+V_a)^{1/2}}\right\}. \quad (2.20)$$

Simmons-ek, berriro, $\alpha\bar{\Phi}^{1/2} >> 1$ eta $\alpha(\bar{\Phi}+V_a)^{1/2} >> 1$ direlako hipotesia eginez, korronte-dentsitatearen ondoko adierazpen hurbildua lortu zuen[45]:

$$J_S=\frac{2}{\pi^2\alpha^2}\left\{\bar{\Phi}e^{-\alpha\bar{\Phi}^{1/2}}-(\bar{\Phi}+V_a)e^{-\alpha(\bar{\Phi}+V_a)^{1/2}}\right\}; \quad (2.21)$$

hau, *Simmons-en batezbesteko langaren hurbilketa*, SMBA, delako izenaz bataiatzen dugu. Ohizko lan-funtzioetarako, aldiz, goiko ezberdintasunek huts egiten dute, $s < 20$Å denean, eta hurbilketa honek korronte-dentsitate txikiegiak aurresaten ditu[49].

Azpimarra dezagun, beraz, gaur egun sarritan abiapuntutzat hartu ohi den Simmons-en batezbezteko langaren hurbilketa erabiltzeak tunel mikroskopioaz baliaturik lorturiko emaitza experimentalen interpretazio okerretara eraman gaitzakeela, 2.6 atalean azalduko dugun bezala. Oso txikiak ez diren elektrodoen arteko separazioetarako ($s \gtrsim 10$Å) (2.20) delako adierazpena erabili ahal izango genuke korronte-dentsitateak kalkulatzeko, eta separazio txikiagotarako beharrezkoa izango litzateke (2.10) ekuazioa (2.9) delakora eraman eta numerikoki integratzea.

Tentsio txikiko heina

Bi elektrodoen arteko potentzial-diferentzia oso txikia deneko kasu berezian, (2.20) ekuazioa honela idatz daiteke:

$$\frac{J}{M}=\frac{2}{\pi^2\alpha^2}\left\{\bar{\Phi}\left[1+3\alpha^{-1}\bar{\Phi}^{-1/2}+3\alpha^{-2}\bar{\Phi}^{-1}\right]\right.$$

$$\left.-(\bar{\Phi}+V_a)\left[1+3\alpha^{-1}(\bar{\Phi}+V_a)^{-1/2}+3\alpha^{-2}(\bar{\Phi}+V_a)^{-1}\right]e^{-1/2\,\alpha V_a\bar{\Phi}^{-1/2}}\right\}e^{-\alpha\bar{\Phi}^{1/2}}, \quad (2.22)$$

eta adierazpen honetako $\exp(-1/2\,\alpha V_a\,\bar{\Phi}^{-1/2})$ delako exponentziala hedatuz, hauxe lortzen dugu V_a-ren bigarren ordenako eta ordena altuagoko gaiak arbuiaturik:

$$J_{\bar{M}} = \frac{1}{\pi^2 \alpha} \bar{\Phi}^{1/2} V_a \left[1 + (\alpha \bar{\Phi}^{1/2})^{-1} \right] e^{-\alpha \bar{\Phi}^{1/2}} . \tag{2.23}$$

(2.21) ekuazioa, aldiz, honela idatziko litzateke V_a osoa txikia deneko limitean:

$$J_S = \frac{1}{\pi^2 \alpha} \bar{\Phi}^{1/2} V_a \left[1 - 2 (\alpha \bar{\Phi}^{1/2})^{-1} \right] e^{-\alpha \bar{\Phi}^{1/2}} , \tag{2.24}$$

edo, berriro, $\alpha \bar{\Phi}^{1/2} >> 1$ delako hipotesia eginez:

$$J_S = \frac{1}{\pi^2 \alpha} \bar{\Phi} V_a e^{-\alpha \bar{\Phi}^{1/2}} . \tag{2.25}$$

Bestalde, potentzial-langa eraginkorra honela definituz:

$$\Phi_e^{1/2} = \frac{1}{\Delta s} \int_{s_1}^{s_2} dz \, \varphi^{1/2}(z) , \tag{2.26}$$

non

$$s_1 = s_1 (-\Phi_L) , \tag{2.27}$$

$$s_2 = s_2 (-\Phi_L) , \tag{2.28}$$

eta

$$\Delta s = s_2 - s_1 \tag{2.29}$$

diren, honelaxe berridatz dezakegu (2.23):

$$J = \frac{1}{\pi^2 \alpha_0 \beta^2} \Phi_e^{1/2} \left[1 + (\alpha_0 \Phi_e^{1/2})^{-1} \right] e^{-\alpha_0 \Phi_e^{1/2}} , \tag{2.30}$$

non

$$\beta = \beta(-\Phi_L) \tag{2.31}$$

eta

$$\alpha_0 = 2\sqrt{2} \, \Delta s \tag{2.32}$$

diren, ondoko berdintza betetzen bait da:

$$\int_{s_1}^{s_2} dz \, \varphi^{1/2}(z) = \beta \bar{\Phi}^{1/2} \Delta s . \tag{2.33}$$

Tentsio handiko heina

Bi elektrodoen arteko potentzial-diferentzia handia denean ($V_a > \Phi_R$), (2.20) ekuazioa honela idatz daiteke:

$$J = \frac{2}{\pi^2 \alpha^2} \bar{\Phi} \left[1 + 3 (\alpha \bar{\Phi}^{1/2})^{-1} + 3 (\alpha \bar{\Phi}^{1/2})^{-2} \right] e^{-\alpha \bar{\Phi}^{1/2}} , \qquad (2.34)$$

edo, (2.26) adierazpenaren bidez definituriko potentzial-langa eraginkorra erabiliz:

$$J = \frac{2}{\pi^2 \alpha_0^2 \beta^4} \Phi_e \left[1 + 3 (\alpha_0 \Phi_e^{1/2})^{-1} + 3 (\alpha_0 \Phi_e^{1/2})^{-2} \right] e^{-\alpha_0 \Phi_e^{1/2}} . \qquad (2.35)$$

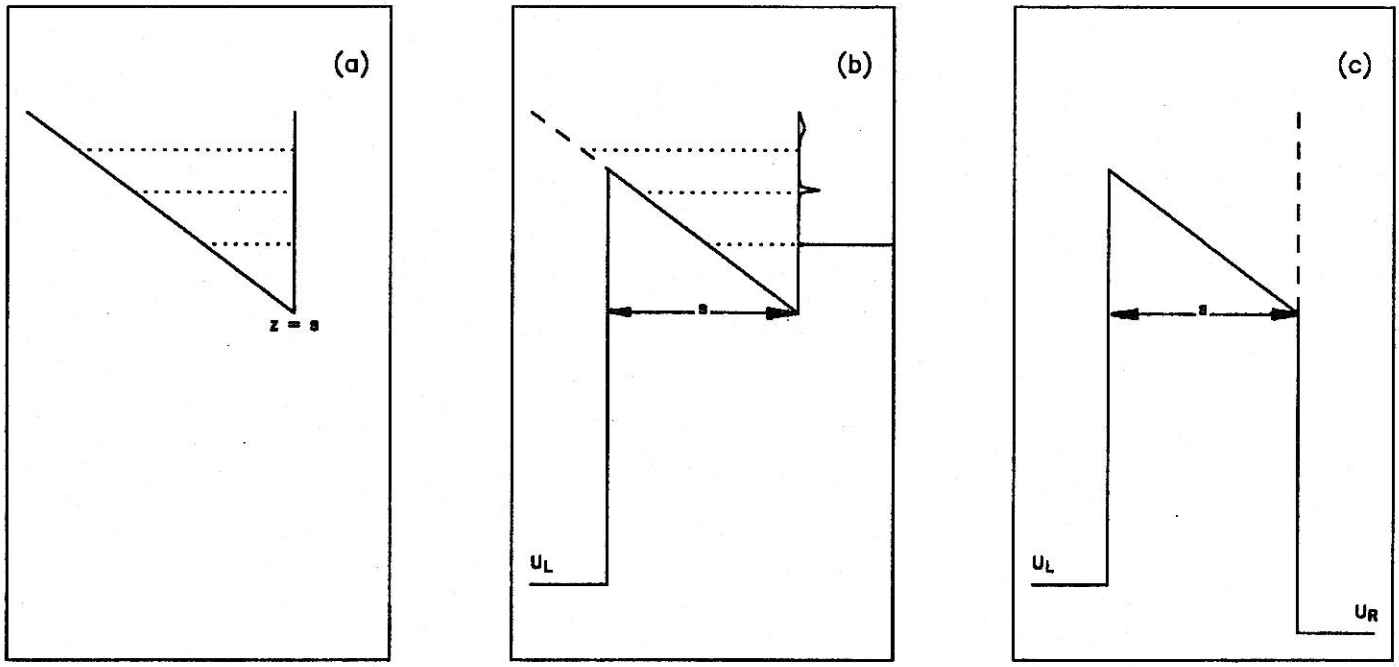
2.3. Transmisio-erresonantziak

Atal honetan zein hurrengoan, hutsak banaturiko metalezko bi elektrodo paralelo kontsideratuko ditugu, aurreko atalean bezala, eta elektrodoen arteko potentzial-diferentzia zenbait voltatakoa deneko kasura mugatuko gara. Bereziki, tentsioa elektrodo positiboaren lan-funtzioa baino handiagoa denean, eremu-emisiozko egoera dugu, hots, elektrodo negatiboko elektroiek energia zinetiko positiboko espazioaldea aurkituko dute elektrodo positibora iritsi aurretik, sarrerako 2.4 irudian adierazi den bezala, transmisio-erresonantziak sorteraziko direlarik.

Transmisio erresonantzien fenomenoaren jatorria agerian jartzeko asmoz, kontsidera dezagun, lehenengo eta behin, horma infinituak dituen 2.6a irudiko potentzial-putzua:

$$V(z) = \begin{cases} Fz & , z \le s \\ \infty & , s < z \end{cases} , \tag{2.36}$$

non F delakoak horma inklinatuaren malda adierazten duen.



2.6 irudia. Potentzial-langak: a) Langa infinitua, b) langa erdi-infinitua, eta c) langa trapezoidala. 2.6a eta 2.6b irudietan (2.42) energi mailak adierazten dira, puntukako lerro horizontalen bidez, eta 2.6b irudian (2.45) adierazpeneko anplitudearen karratua ere adierazten da.

Potentzial-putzu honetan dagoen elektroiaren denborarekiko menpekotasunik ez duen Schrödinger-en ekuazioa, beraz, ondokoa dugu, $z \le s$ denean:

$$\psi''(z) + 2\left[E - F z\right]\psi(z) = 0 \ , \tag{2.37}$$

non E delakoa elektroiaren energia den. Ondoko aldagai-aldaketa eginez:

$$u = (2F^{-2})^{1/3}(F z - E) \ , \tag{2.38}$$

(2.37) ekuazioa era honetara berridatz daiteke:

$$\psi''(u) - u\,\psi(u) = 0 \ . \tag{2.39}$$

Ekuazio diferentzial honen bi soluzio independente Airy-ren $Ai(u)$ eta $Bi(u)$ funtzioak ditugu[50]; hortaz, hauxe idatz dezakegu:

$$\psi(z) = A\ Ai\left[(2F^{-2})^{1/3}(F z - E)\right] + B\,Bi\left[(2F^{-2})^{1/3}(F z - E)\right] \ , \tag{2.40}$$

non A eta B direlakoak hautazko konstanteak diren. Behin muga-baldintzak aplikatuz gero, elektroiaren energia kuantizaturik dagoela aurkitzen da, energi mailak ondokoak izanik:

$$E_n = -(2F^{-2})^{-1/3} a_n \ , \tag{2.41}$$

potentzial-putzuaren hondoarekiko adierazirik. a_n, Airy-ren Ai funtzioaren zeroak ditugu:

$$a_n = -f\left[\frac{3\pi}{2}\left(n - \frac{1}{4}\right)\right], \tag{2.42}$$

non $f(x)$ funtzioaren hedapen asintotikoa ondokoa dugun:

$$f(x) = x^{2/3}\left(1 + \frac{5}{48}x^{-2} - \frac{5}{36}x^{-4} + \frac{77125}{82944}x^{-6} + O(x^{-8})\right) . \tag{2.43}$$

(2.41) adierazpenak adierazitako lehen energi mailak 2.6a irudiko puntukako lerro horizontalen bidez adierazten dira.

Potentzial-putzuaren hormetariko bat finitua denean, aldiz, 2.6b irudian adierazten den bezala, uhin elektronikoak ez daude potentzial-putzuan guztiz mugaturik eta energiak edozein balio izan dezake. Izan ere, Schrödinger-en ekuazioa askatu eta muga-baldintzak aplikaturik, 2.6b irudiko potentzial-langa inklinatua deneko espazioaldean elektroiaren uhin-funtzioa ondokoa dela aurkitzen da:

$$\psi(z) = A\,g\left[-(2F^{-2})^{1/3}(F z - E)\right] \quad (0 \le z \le s) \ , \tag{2.44}$$

non

$$A^2 = \frac{(2k_L)^2 \left[Ai^2(u_s) + Bi^2(u_s) \right]}{u'^2 \left[Ai'(u_0)\, Bi(u_s) - Ai(u_s)\, Bi'(u_0) \right]^2 + k_L^2 \left[Ai(u_0)\, Bi(u_s) - Ai(u_s)\, Bi(u_0) \right]^2} \quad (2.45)$$

eta

$$g(x) = \sqrt{Ai^2(-x) + Bi^2(-x)}\ \sin\left[\tan^{-1}\frac{Bi(-x)}{Ai(-x)} + \tan^{-1}\frac{-Bi(u_s)}{Ai(u_s)} \right] \quad (2.46)$$

diren. Adierazpen hauetan,

$$u_0 = -\,(2F^{-2})^{1/3} E \quad , \quad (2.47)$$

$$u_s = (2F^{-2})^{1/3} (F s - E) \quad , \quad (2.48)$$

$$u' = (2F^{-2})^{1/3} F \quad (2.49)$$

eta

$$k_L = \sqrt{2(E - U_L)} \quad , \quad (2.50)$$

s eta U_L direlakoak 2.6b irudian adierazitakoak izanik.

Metalezko bi elektrodo paraleloren arteko hutseango potentzial-langaren hurbilketarik arruntena 6c irudian adierazten den potentzial-langa trapezoidala dugu; potentzial-langa hau ondoko erara adieraz daiteke, bi elektrodoen arteko potentzial-diferentzia V_a denean:

$$V(z) = \begin{cases} U_L & , z \le 0 \\ -(V_a + \Delta\Phi)\dfrac{z}{s} & , 0 \le z \le s \\ U_R & , s \le z \ , \end{cases} \quad (2.51)$$

$z \le 0$ delako espazioaldea betetzen duen L elektrodoaren hutsaren mailarekiko, U_L eta U_R, elektrodoen barne-potentzialak izanik, eta $\Delta\Phi$, lan-funtzioen arteko diferentzia:

$$\Delta\Phi = \Phi_L - \Phi_R \quad . \quad (2.52)$$

2.6b eta 2.6c irudietako potentzial-langaren eraginpeko elektroien energia, 7a irudiko langaren eraginpeko elektroiena ez bezala, edozein izan daiteke; alabaina, (2.41) energietarako uhin elektronikoen anplitudeak handiagoak dira beste energia guztietarako baino, energia zinetiko positiboko espazioaldean sorterazten den uhin elektroniko erasotzaileen eta isladatuen arteko interferentziaren ondorioz, potentzial-putzu infinituaren energi mailak zabaldu egiten

dira, eta (2.51) potentzial-langa trapezoidalean zeharreko transmisio-erresonantziak sortzen dira.

Potentzial-langetan zeharreko transmisio-koefizienteak kalkulatzeko egin ohi den WKB hurbilketa erabiltzekotan, aldiz, lorturiko emaitzek ez dute erresonantziaren fenomenoaren berri ematen[51], $z = s$ posizioan dagoen horma isladatzailearen eragina arbuiatu egiten bait da. Fenomeno hau azaltzeko, beraz, beharrezkoa dugu Schrödinger-en ekuazioa askatzea, (2.41) eta (2.44) lortzeko egin dugun bezalaxe. Izan ere, (2.51) potentzial-langa trapezoidalaren eraginpeko elektroiaren Schrödinger-en ekuazioaren soluzioak diren Airy-ren funtzioak zein beraien deribatuak $z = 0$ eta $z = s$ balioetarako loteraziz, transmisio-koefizientearen adierazpen analitikoa honelaxe lortzen dugu[52]:

$$D = \frac{k_R}{k_L} \frac{4/\pi^2}{\alpha^2+\beta^2}, \tag{2.53}$$

non k_L eta k_R direlakoak L eta R elektrodoetako elektroien momentuen moduluak diren:

$$k_L = \sqrt{2\,(E - U_L)} \tag{2.54}$$

eta

$$k_R = \sqrt{2\,(E - U_R)}\ , \tag{2.55}$$

eta α eta β direlakoak ondokoak ditugun:

$$\alpha = k_R \left[Ai(u_0)\, Bi(u_s) - Ai(u_s)\, Bi(u_0) \right] / u' + k_L^{-1} \left[Ai'(u_0)\, Bi(u_s) - Ai'(u_s)\, Bi'(u_0) \right] u' \tag{2.56}$$

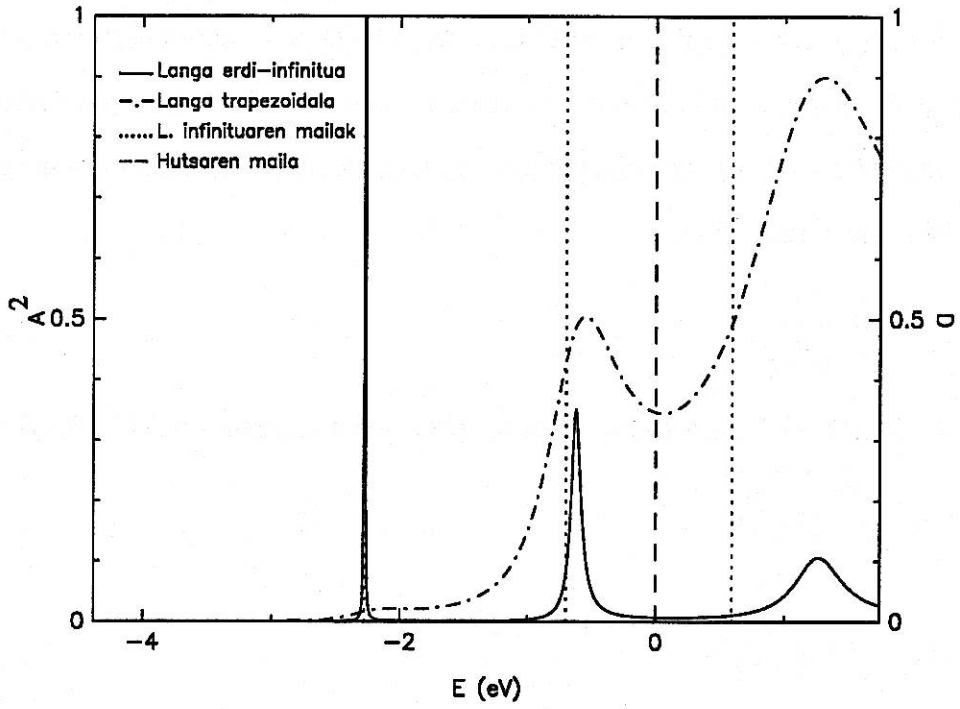
eta

$$\beta = \frac{k_R}{k_L} \left[Ai(u_s)\, Bi'(u_0) - Ai'(u_0)\, Bi(u_s) \right] + \left[Ai(u_0)\, Bi'(u_s) - Ai'(u_s)\, Bi(u_0) \right], \tag{2.57}$$

u_0, u_s eta u'direlakoak (2.47), (2.48) eta (2.49) adierazpenetakoak izanik, hurrenez hurren, eta F, bi elektrodoen arteko eremu elektrikoaren intentsitatea:

$$F = -\frac{V_a + \Delta\Phi}{s}\ . \tag{2.58}$$

2.7 irudian (2.45) adierazten da, hots, (2.44) uhin-funtzioaren anplitudearen karratua, energiaren funtzioan, bai eta (2.53) adierazpenaren bidez kalkulaturiko transmisio-probabilitatea ere, U_L = -12.68eV, U_R = -9.8eV, V_a = 4V, s = 10Å eta F = -0.438eV/Å izanik, F maldadun potentzial-langa infinituaren (2.41) energi mailen balioekin batera.

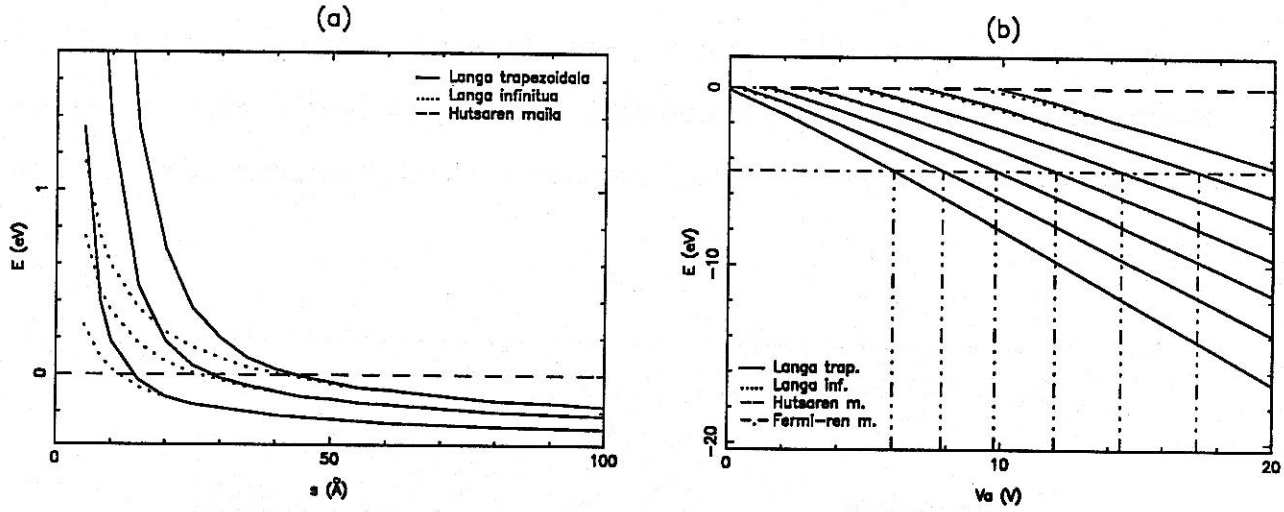


2.7 irudia. Potentzial-langa erdi-infinituaren eraginpeko uhin-elektronikoaren anplitudearen karratua (berau 6b irudian adierazitakoa da) eta potentzial-langa trapezoidalaren eraginpeko elektroien transmisio-probabilitatea, energiaren funtzioan. Langa infinituaren energi mailak eta elektrodo negatiboaren hutsaren maila ere adierazten dira, lerro bertikalen bidez. U_L = -12.68eV, U_R = -9.8eV, V_a = 4V, s = 10Å eta F = -0.438eV/Å.

Agerian dago 2.6b irudiko potentzial-langa erdi-infinituaren eraginpeko elektroiaren uhin-funtzioaren anplitudearen maximoak 2.6c irudiko potentzial-langa zeharkatzen duten elektroien transmisio-erresonantziekin bat datozela; berauek ez datoz bat, aldiz, potentzial-putzu infinituaren lehen energi mailarekin baino, berau bait da elektrodo negatiboaren hutsaren maila baino nahiko beherago dagoen energi maila bakarra.

2.8 irudietan 2.6c irudiko potentzial-langa trapezoidala zeharkatzen duten elektroien transmisio-erresonantzien posizioen eboluzioa adierazten da, s distantziaren funtzioan, V_a = 0 izanik (2.8a irudia), eta V_a tentsioaren funtzioan, s = 20Å izanik (2.8b irudia), potentzial-putzu

infinituaren energi mailen eboluzioarekin batera.



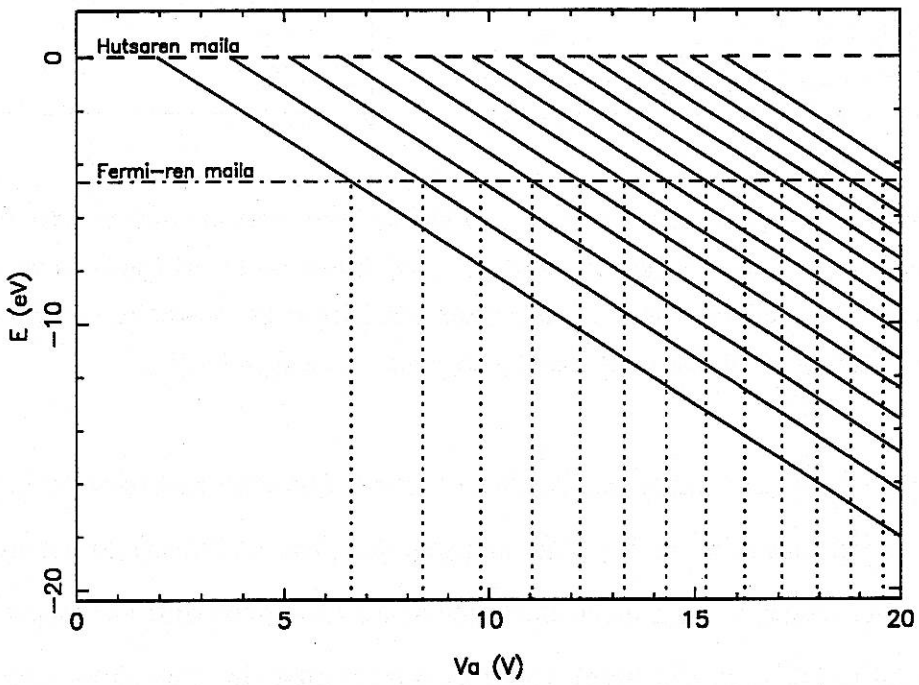
2.8 irudia. Potentzial-langa trapezoidalaren eraginpeko elektroien transmisio-erresonantziak eta langa infinituaren energi mailak, a) separazioaren funtzioan, $V_a = 0$ denean, eta b) tentsioaren funtzioan, $s = 20$Å denean. 2.8b irudiko lerro bertikalek, elektrodo negatiboko elektroiek transmisio-erresonantziak jasan ditzaten tentsioak hartu behar dituen balioak adierazten dituzte. $\Phi_L = 4.68$eV eta $\Phi_R = 4.3$eV.

Irudi hauek hutsaren mailaren azpian dauden transmisio-erresonantziak potentzial-putzu infinituaren energi mailekin bat datozela erakusten dute, bai eta hutseango potentzial-langa zeharkatzen duten elektrodo negatiboko elektroien transmisio-erresonantziak ere, beraz.

Elektrodo negatiboko elektroiek transmisio-erresonantziei dagozkien energiak izan ditzaten, ordea, tentsioa elektrodo positiboaren lan-funtzioa baino handiagoa izatea beharrezkoa da, tenperatura 0K-etakoa denean behinik behin; tentsioa handiagotzean, bestalde, elektroien transmisio-probabilitatea areagotu egingo da, (2.41) ekuazioko energi maila berri bat elektrodo negatiboaren Fermi-ren mailarekin bat datorren bakoitzean; hau 2.8b irudian erakusten da. Irudi honetan, (2.41) energi mailak elektrodo negatiboaren Fermi-ren mailarekin pareka daitezen tentsioak hartu behar dituzten balioak lerro bertikalen bidez adierazten dira.

Tunel elektroiek jasaten dituzten elkarren ondoko transmisio-erresonantzien arteko energi aldakuntza $F^{2/3}$ biderkagaiarekiko proportzionala da eta tentsioaren handipenarekin handiagotu egiten da, beraz, separazioak aldatzeke irauten duen heinean; elektroiek transmisio-erresonantzia berri bat pairatzeko tentsioak jasan behar duen gehikuntza, hortaz,

gero eta handiagoa izango da, 2.8b irudiak erakusten duen erara. Gehikuntza hau ez litzateke gero eta handiagoa izanen, ordea, tentsioa handiagotu ahala separazioa ere handiagotu egingo balitz, F eremu elektrikoak konstante iraunik; are gehiago, kasu honetan elektroiek transmisio-erresonantzia berri bat paira lezaten tentsioak hartu beharreko balioak gero eta hurbilagoak izango lirateke, 2.9 irudian ikus daitekeen bezala, elkarren ondoko transmisio-erresonantzien arteko energi gehikuntza n-rekin, hots, ordenarekin txikiagotu egiten bait da.



2.9 irudia. (2.41) energi mailen eboluzioa, tentsioaren funtzioan, maldaren F = -0.438eV/Å balio konstanterako. Potentzial-langa trapezoidalaren eraginpeko elektroien transmisio-erresonantziak ez dira adierazten, elektroiek izan ditzaketen energietarako (2.41) energi mailekin bat bait datoz. Puntukako lerro bertikalek elektrodo negatiboko elektroiek transmisio-erresonantziak jasan ditzaten tentsioak hartu behar dituen balioak adierazten dituzte, 2.8b irudian bezalaxe.

Ondoren, metalezko bi elektrodoren arteko potentzial-langaren (2.51) hurbilketa hobatu egingo dugu, hutseango elektroiaren gainean elektroiak berak polarizaturiko elektrodoek eragiten duten irudi-indarra kontsideratuz, eta irudi-indarrak transmisio-erresonantzien egituraren gainean duen eragina aztertuko dugu.

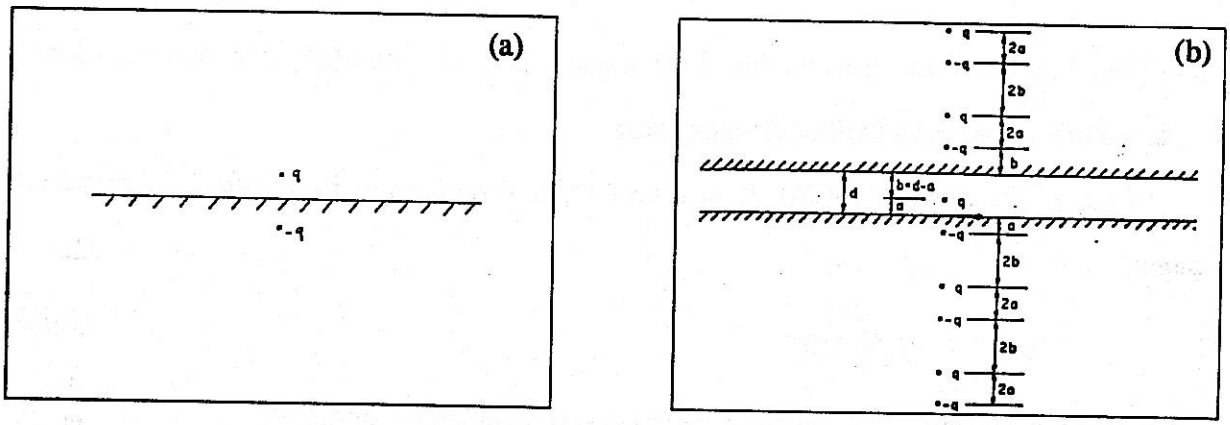
Irudi-potentziala

Bira 2.10a irudian adierazten diren metalezko gainazal launa eta q kargadun partikula, bien arteko distantzia z izanik. Partikula honen gainean partikulak berak polarizaturiko elektrodoak eragiten duen indar elektrikoa, elektrodoaren beste aldean $2z$ distantziara jarritako $-q$ irudi-kargak eragingo lukeen indarraren berdina da[53]:

$$F_{\text{im}}(z) = -\frac{q^2}{(2z)^2} z \ , \tag{2.59}$$

z delakoa z erdiardatz positiboaren norabide eta norantza dituen bektore unitarioa delarik, eta, ondorioz, q kargaren energia potentziala ondokoa dugu:

$$V_{\text{im}}(z) = -\frac{q^2}{4z} \ . \tag{2.60}$$



2.10 irudia. a) Metalezko gainazal laun baten eta q kargadun partikularen arteko elkarrekintza. q kargak jasaten duen indarra $-q$ irudi-kargak eragingo lukeenaren berdina da. b) Metalezko bi gainazal launen eta bien artean kokaturik dagoen q kargadun partikularen arteko elkarrekintza. q kargak jasaten duen indarra infinitu irudi-kargek eragingo luketenaren berdina da.

Metalezko bi gainazal laun eta paraleloren artean kokaturik dagoen q kargadun partikularen kasuan, berak ez ezik bi elektrodoetako irudi-kargek ere polarizatzen dute beste aldeko elektrodoa, hasierakoa berriro polarizatuko duen irudi-karga sortuz. Bi elektrodoen arteko q kargadun partikularen gainean partikulak berak polarizaturiko elektrodoek sorterazten duten irudi-potentziala, beraz, 2.10b irudian erakusten diren infinitu irudi-kargek

sorterazitakoaren berdina da, eta bi elektrodoen arteko elektroi baten irudi-potentziala hauxe dugu[54]:

$$V_{im}(z) = -\frac{1}{2}\left\{ \frac{1}{2z} + \sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{ns}{(ns)^2 - z^2} - \frac{1}{ns}\right]\right\} , \qquad (2.61)$$

edo, zenbait eragiketa eginez gero,

$$V_{im}(z) = -\frac{1}{4}\left(\frac{1}{z} + \frac{1}{s-z}\right) + \frac{1}{4s}\left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z/s}{n(n+z/s)} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z/s}{n(n-z/s)} + \frac{1}{1-z/s}\right], \qquad (2.62)$$

eta, ondorioz:

$$V_{im}(z) = -\frac{1}{4}\left(\frac{1}{z} + \frac{1}{s-z}\right) + \frac{1}{4s}\left[2\gamma + \psi\left(1+\frac{z}{s}\right) + \psi\left(2-\frac{z}{s}\right)\right], \qquad (2.63)$$

edo

$$V_{im}(z) = -\frac{s}{4z(s-z)} + \frac{1}{4s}\left\{ 2\gamma + s\frac{d}{dz}\left[\ln\frac{\Gamma(1+z/s)}{\Gamma(2-z/s)}\right]\right\} , \qquad (2.64)$$

non γ delakoa Euler-en zenbakia den, $\Gamma(x)$, gamma funtzioa, eta $\psi(x)$, digamma funtzioa[55], hots, gamma funtzioaren deribatu logaritmikoa.

Bereziki, bi elektrodoetako lehen irudi-kargek sorterazitako irudi-potentziala ondokoa dugu:

$$V_{im}(z) = -\frac{s}{4z(s-z)} , \qquad (2.65)$$

eta literaturan sarritan erabili ohin den Simmons-en hurbilketa[54], ondokoa:

$$V_{im}(z) = -\frac{1.15\ \ln 2s}{4z(s-z)} . \qquad (2.66)$$

Elektroiak jasaten duen irudi-potentziala ere kontsideraturik, beraz, ondokoa dugu bi elektrodoen arteko hutseango potentzial-langa:

$$V(z) = \begin{cases} U_L & , z \le z_1 \\ -(V_a + \Delta\Phi)\frac{z}{s} + V_{im}(z) & , z_1 \le z \le z_2 \\ U_R & , z_2 \le z \end{cases} , \qquad (2.67)$$

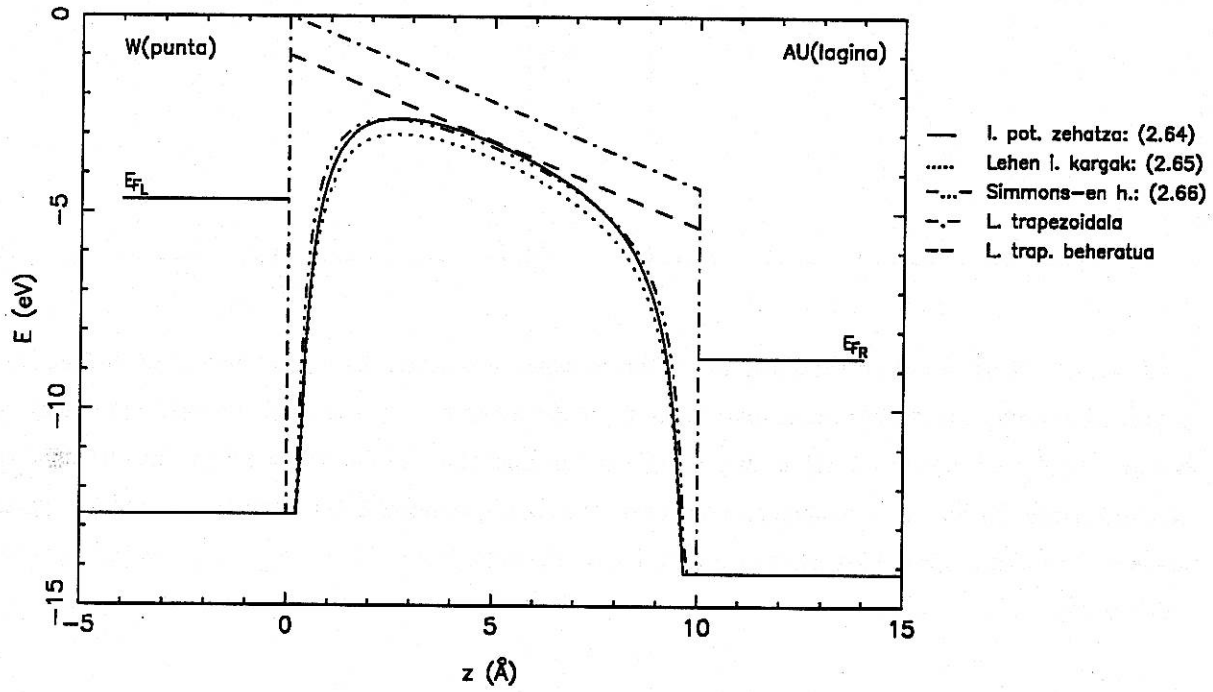
non z_1 eta z_2 direlakoek hutseango potentzialak elektrodoen barne-potentzialak berdintzen

ditueneko posizioak adierazten dituzten.

2.11 irudian (2.67) adierazpeneko potentzial-langa adierazten da, (2.64), (2.65) eta (2.66) ekuazioetaz adierazitako irudi-potentzialak kontsideraturik, (2.51) adierazpeneko potentzial-langa trapezoidalarekin batera. Irudi honetan, (2.64) irudi-potentzialak beheratutako (2.67) potentzial-langarekiko ukitzailea den potentzial-langa trapezoidal beheratua ere erakusten da; izan ere, potentzial-langa trapezoidala elektrodoen arteko separazioarekiko alderantziz proportzionala den kopuru batetaz beheratzen du irudi-potentzialak, ondoko berdintza betetzen bait da:

$$V_{\mathrm{im}}(s/2) = -\frac{k}{s} \ , \tag{2.68}$$

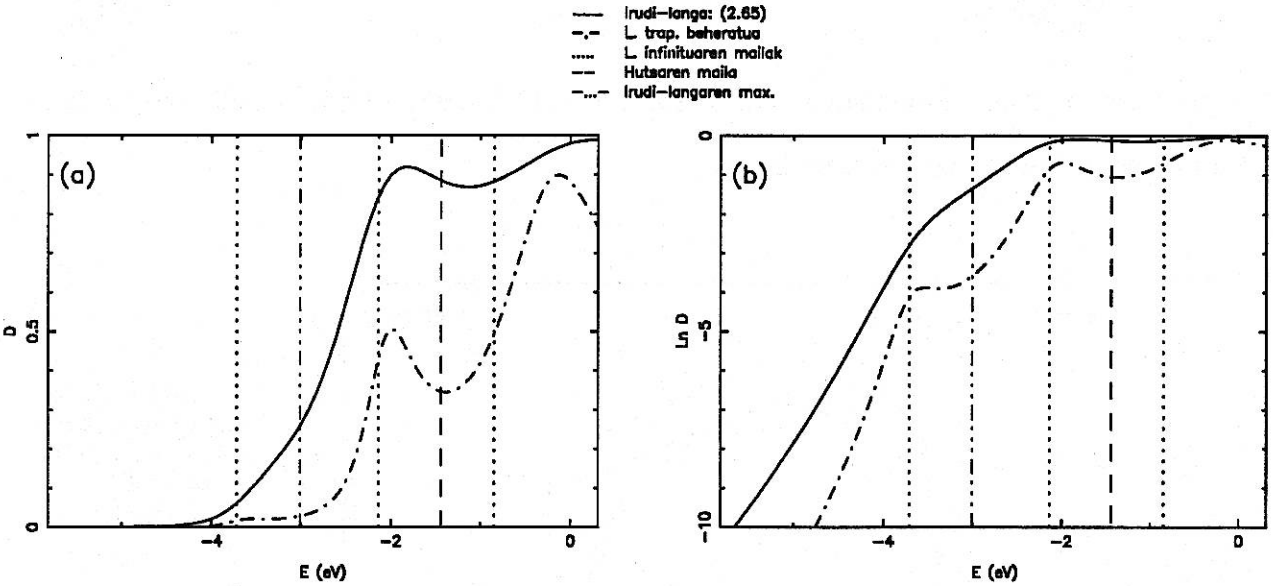
k proportzionaltasun-konstantea ln2, 1 eta 1.15 ln2 izanik, (2.64), (2.65) eta (2.66) irudi-potentzialen kasuan, hurrenez hurren.



2.11 irudia. Potentzial-langa trapezoidala eta irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langa, (2.64) adierazpeneko irudi-potentzialа zein beronen (2.65) eta (2.66) hurbilketak kontsideraturik. (2.64) irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langarekiko ukitzailea den potentzial-langa trapezoidal beheratua ere adierazten da.

Irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langa zeharkatzen duen elektroiaren

transmisio-probabilitateak aurkitzeko, numerikoki askatzen dugu Schrödinger-en ekuazioa, soluzioa Chebyshev-en serieen bidez garatu ondoren[56]. 2.12 irudietan era honetara kalkulaturiko transmisio-probabilitateak erakusten dira, energiaren funtzioan, U_L = -12.68eV, U_R = -9.8eV, V_a = 4V, s = 10Å eta F = -0.438eV/Å izanik eta irudi-potentzialaren (2.65) hurbilketa kontsideraturik, potentzial-langa trapezoidal beheratua zeharkatzen duten elektroien transmisio-probabilitateekin eta potentzial-langa honi dagokion pontzial-putzu infinituaren energi mailen balioekin batera.



2.12 irudia. (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langa nahiz beronekiko ukitzailea den potentzial-langa trapezoidal beheratua zeharkatzen duten elektroien transmisio-probabilitatea (2.12a irudia) eta beronen logaritmo nepertarra (2.12b irudia), energiaren funtzioan. Langa infinituaren energi maila beheratuak, elektrodo negatiboaren hutsaren maila beheratua eta (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langaren maximoa lerro bertikalen bidez adierazten dira. U_L = -12.68eV, U_R = -9.8eV, V_a = 4V, s = 10Å eta F = -0.438eV/Å.

Irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langa zeharkatzen duten elektroien transmisio-erresonantzien posizioak, bada, potentzial trapezoidal beheratuari dagozkion transmisio-erresonantzienekin bat datoz, gutxi gorabehera, berauek bezain bortitzak ez direla ere, (2.67) potentzial-langa leunduagoa bait da. Transmisio-erresonantzia hauek, bestalde, langa infinituaren energi maila beheratuekin bat datoz, hutsaren galgaren azpiko energietarako,

eta elektrodoen arteko separazioarekiko alderantziz proportzionala den beherapena jasaten dute, energi maila ez-beheratuekiko.

Bestalde, (2.67) potentzial-langari dagokion lehen transmisio-erresonantzia potentzial trapezoidal beheratuari dagokiona baino txikixeagoa bilakatzen da, tentsio txikitarako bereziki; izan ere, lehen transmisio-erresonantzia honek gainazal laun baten irudi-potentzialak eremu-emisiorik gabe sorterazten duen lehen erresonantzia intrintsekora[57] jotzen du, elektrodoen arteko separazio handitarako[58].

Tunel-ezaugarriak: s-V_a eta dI/dV_a-V_a

Tunel mikroskopioaz baliaturik, tentsioa handiagotzeaz batera punta bertikalki eta lekuz aldatzeke higi eraziz, tunel-korronteak konstante irautea lor daiteke experimentalki[23-24]. Era honetara, beraz, behin tentsioa elektrodo positiboaren lan-funtzioa baino handiagoa izanez gero, eremu-emisioa dugu elektrodo negatiboaren gainazalean, eta bi elektrodoen arteko eremu elektrikoak ere konstante iraungo du, gutxi gorabehera, tentsioa handiagotu ahala, tunel-korronteak konstante irauten duen bitartean, tunel-azalera aldatzen ez dela emanik.

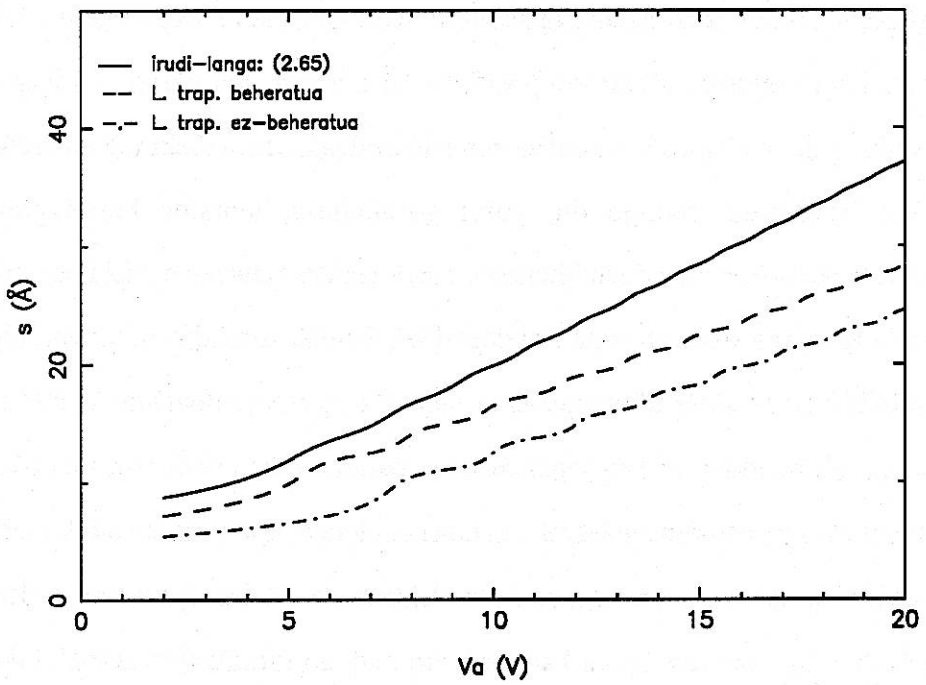
Tunel mikroskopioa osotzen duten elektrodoak launak direlako hipotesia eginez eta transmisio-probabilitateak (2.9) adierazpenera eramanez, korronte-dentsitatea aurki daiteke, behin tentsioa eta elektrodoen arteko separazioaren balioak eman ondoren; tunel-korrontea, honela kalkulaturiko korronte-dentsitatearen eta tunel-azalera eraginkorraren arteko biderkadura izango da. Tunel-korrontea konstante egiten duen elektrodoen arteko separazioa, ordea, ezin da era zuzenean kalkulatu; izan ere, berau kalkulatzeko ondoko funtzioaren zeroak bilatu behar ditugu:

$$f(s) = I(s) - I_0 \ , \tag{2.69}$$

non $I(s)$ delakoa s distantziara dauden elektrodoen arteko tunel-korrontea den, eta I_0, aurkitu nahi dugun distantziara dauden elektrodoen arteko tunel-korrontearen balio konstantea. Diogun, (2.69) funtzioaren balioa bilatzen dugun bakoitzean Schrödinger-en ekuazioa askaturik lorturiko transmisio-probabilitateak hasierako egoera guztietarako integratu egin

behar ditugula, (2.9) adierazpenak erakusten duen erara; beraz, tunel-korrontea konstante egiten duen separazioa bilatzea kalkulu korapilatsu eta gogaikarria da, energiaren eta separazioaren balio bakoitzeko Schrödinger-en ekuazioa numerikoki askatu behar dugunean bereziki. Behin tentsioaren balio bakoitzeko, bada, tunel-korrontea konstante egiten duen separazioa kalkulaturik, tunel-korronte konstantedun separazioa-tentsioa, s-V_a ezaugarriak kalkula daitezke.

2.13 irudian modu honetara kalkulaturiko ezaugarriak erakusten dira, U_L = -12.68eV, U_R = -9.8eV, Φ_L = 4.68eV, Φ_R = 4.3eV eta J = 0.1nA/Å^2 izanik eta tunel-azalera konstantea dela emanik, elektroiek (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langa zeharkatzen dutenean, bai eta dagokion potentzial-langa trapezoidal beheratua eta (2.51) potentzial-langa trapezoidala zeharkatzen dutenean ere.



2.13 irudia. J = 0.1nA/Å^2-takoa egiten duten s-V_a ezaugarriak, potentzial-eredu ezberdinetarako. U_L =-12.68eV, U_R = -9.8eV, Φ_L = 4.68eV eta Φ_R = 4.3eV.

Beheratu gabeko potentzial-langa trapezoidala kontsideratuz gero lorturiko s-V_a ezaugarriek, tentsio handitarako eremu elektrikoak konstante irauten duela erakusten dute, goian aurreratu dugun bezala. Potentzial-langa trapezoidal beheratuaren kasuan, aldiz, langaren beherapena separazioa

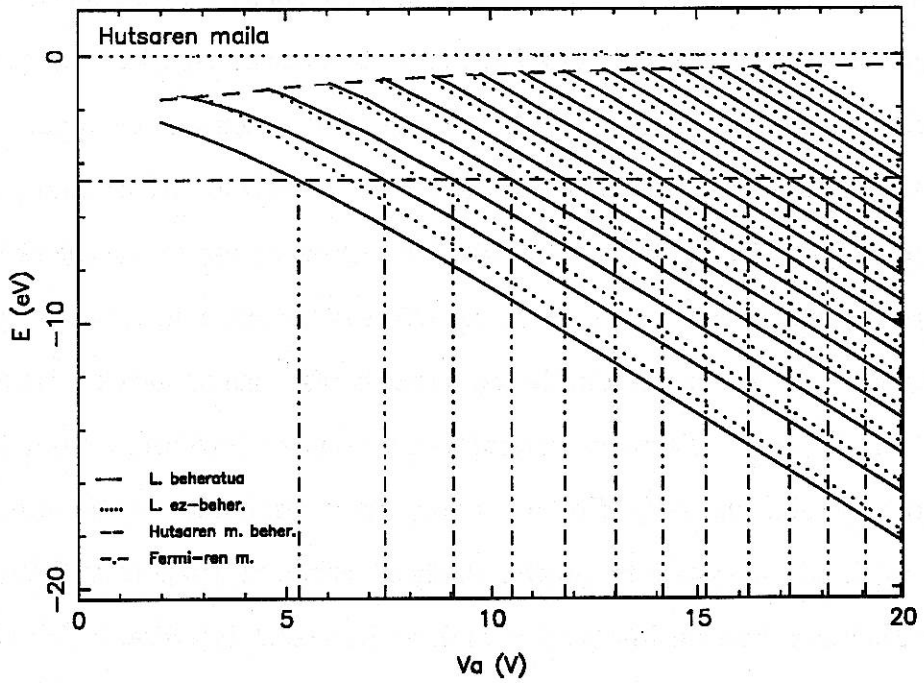
handiagotzearekin batera txikiagotu egiten denez gero, eremu elektrikoa ez da konstantea, hala izanik elektroiek zeharkatu behar izango luketen langa gero eta handiagoa izango bait litzateke; (2.67) potentzial-langaren kasuan, bestalde, langaren beherapena ere gero eta txikiagoa da, baina hau elektroiek tentsio handitarako langa zeharkatu behar duteneko espazioaldean nabaria ez izanik, eremu elektrikoa ia konstantea izanen da, (2.51) potentzial-langaren kasuan bezala.

2.13 irudian adierazten diren s-V_a ezaugarriek, bestalde, transmisio-probabilitateak kalkulatzeko WKB hurbilketa erabilirik lorturikoek ez bezala, korronte-dentsitateak konstante iraun dezan tentsioaren zenbait baliotarako eremu elektrikoa txikiagotu egin beharra dagoela erakusten dute, tentsioaren balio hauek gainditu bezain laster berriro handiagotzeko. Hala gertatzen da, tentsioaren balio hauetarako elektroiek transmisio-erresonantzia berri bat pairatzen dutelako, goian azaldu dugun bezala, eta s-V_a direlako ezaugarrien oszilazio hauek leunduagoak dira irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langa kontsideratzean potentzial-langa trapezoidala kontsideratzean baino, transmisio-erresonantziak ere leunagoak bait dira, 2.12 irudietan agertzen den erara.

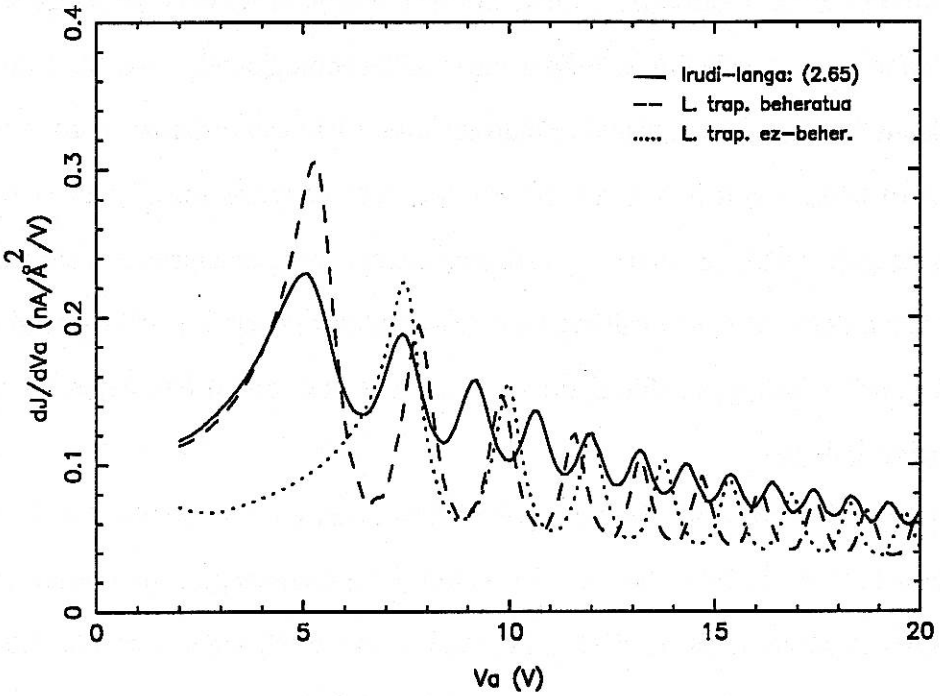
2.14 irudian (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langaren energi mailen eboluzioa adierazten da, tentsioaren funtzioan, V_a bakoitzeko (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langa zeharkatzen duen korronte-dentsitatea 0.1nA/Å^2-takoa egiten duen separazioa kontsideratuz, beheratu gabeko energi mailen eboluzioarekin batera. Irudi honetan, 2.8 eta 2.9 irudietan bezala, lerro bertikalek, elektroiek transmisio-erresonantzia berri bat paira dezaten tentsioak hartu behar duen balioa adierazten dute, eta hauexek dira, hain zuzen ere, eremu elektrikoa txikiagotu egin behar deneko tentsioaren balioak, s-V_a ezaugarrien oszilazioak sorteraziz. Diogun, bestalde, oszilazio hauen gailurren arteko distantziak beheratu gabeko energi mailen arteko distantzia baino handixeagoak direla, energi mailek jasaten duten beherapena separazioarekin txikiagotu egiten bait da.

Tunel experimentuetan, bestalde, tunel-korrontearen tentsioarekiko deribatua, hots, konduktantzia kalkula daiteke, bai eta hutseango potentzial-langak duen eitearen berri eman dezaketen konduktantzia-tentsioa, dI/dV_a-V_a, ezaugarriak ere[21], tunel-korrontea konstante egiten duen $s(V_a)$ lerroan barrena. Korronte-dentsitatea 0.1nA/Å^2-takoa egiten duen $s(V_a)$ lerroan barrena numerikoki kalkulatu ditugun dI/dV_a-V_a direlako ezaugarriak 2.15 irudian adierazten dira,

irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langaren kasuan eta dagokion potentzial-langa trapezoidal beheratuaren nahiz (2.51) potentzial-langaren kasuetan, 2.13 irudian bezala.



2.14 irudia. (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langaren energi mailen nahiz beheratu gabeko energi mailen eboluzioa, tentsioaren funtzioan, tentsioaren balio bakoitzeko 2.13 irudiko lerro jarraiari dagokion s separazioa kontsideraturik. Lerro bertikalek, tunel-elektroiek transmisio-erresonantzia berri bat jasan dezaten tentsioak hartu behar dituzten balioak adierazten dituzte, 2.8b eta 2.9 irudietan bezala.



2.15 irudia. J = 0.1nA/Å^2-takoa egiten duen 2.13 irudiko s-V_a kurbetan barrena kalkulaturiko dJ/dV_a ezaugarriak, potentzial-eredu ezberdinetarako. U_L = -12.68eV, U_R = -9.8eV, Φ_L = 4.68eV eta Φ_R = 4.3eV.

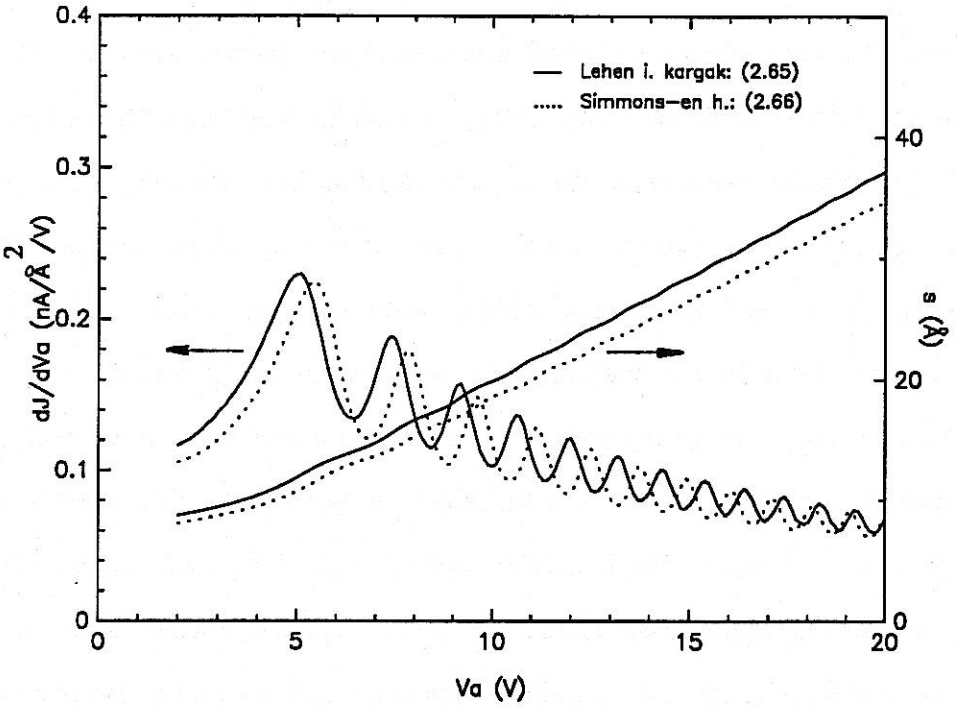
dI/dV_a-V_a direlako ezaugarrien oszilazioak, s-V_a ezaugarrienak bezala, tentsioa handiagotu ahala elektroiek transmisio-erresonantzia berri bat pairatzen duten bakoitzean azaltzen dira, eta 2.14 irudian lerro bertikalen bidez adierazitako tentsioetarako ematen dira, hain zuzen ere. Izan ere, behin $s(V_a)$ kurba finkatuz gero, (2.67) potentzial-langaren kasuan nahiz beroni dagokion potentzial-langa trapezoidalaren kasuan lorturiko dI/dV_a-V_a ezaugarrien oszilazioen gailurrak berdinak ditugu; alabaina, tunel-korrontea konstante egiten duten $s(V_a)$ ezaugarriak ezberdinak dira bi kasu hauetan, bai eta dI/dV_a-V_a ezaugarrien oszilazioen gailurrak ere, beraz, 2.15 irudiak erakusten duen bezala. Bestalde, irudi-potentzialaren eraginez oszilazioak leunduagoak direla aurkitzen da, transmisio-erresonantziak ere leunduagoak bait dira, goian azaldu den bezala.

dI/dV_a-V_a ezaugarrien oszilazioen posizioak, beraz, hutseango potentzial-langaren eitearen arauerakoak dira, bai eta lan-funtzioen arauerakoak nahiz tunel-azaleraren arauerakoak ere, tunel-korrontea konstante egiten duten s-V_a ezaugarriak eta eremu elektrikoa, parametro hauen arauerakoak bait dira. Oszilazio horien arteko distantzia, bestalde, irudi-potentzialerako eginiko hurbilketaren arauerakoa da, transmisio-erresonantziek beheratu gabeko energi mailekiko jasaten duten beherapenak elektrodoen arteko separazioarekiko duen menpekotasuna honen arauerakoa bait da. Beste aldetik, dI/dV_a-V_a ezaugarrien oszilazioen eitea, hutseango potentzial-langak elektrodo positiboaren ingurunean duen eitearen arauerakoa dugu.

2.16 irudian irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langa zeharkatzen duen korronte-dentsitatea 0.1nA/Å^2-takoa egiten duten s-V_a zein dI/dV_a-V_a ezaugarriak erakusten dira, irudi-potentziala (2.65) nahiz (2.66) adierazpenaren bidez kalkulatzen denean. Oszilazioak tentsio handiagotarako gertatzen dira (2.66) irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langa kontsideratuz gero, kasu honetan potentzial-langa altuagoa izanik, korronte dentsitatea konstante egiten duen eremua handiagoa delako, alde batetik, eta behin eremu elektrikoa finkaturik azaltzen diren transmisio-erresonantzien energiak handixeagoak direlako, bestetik.

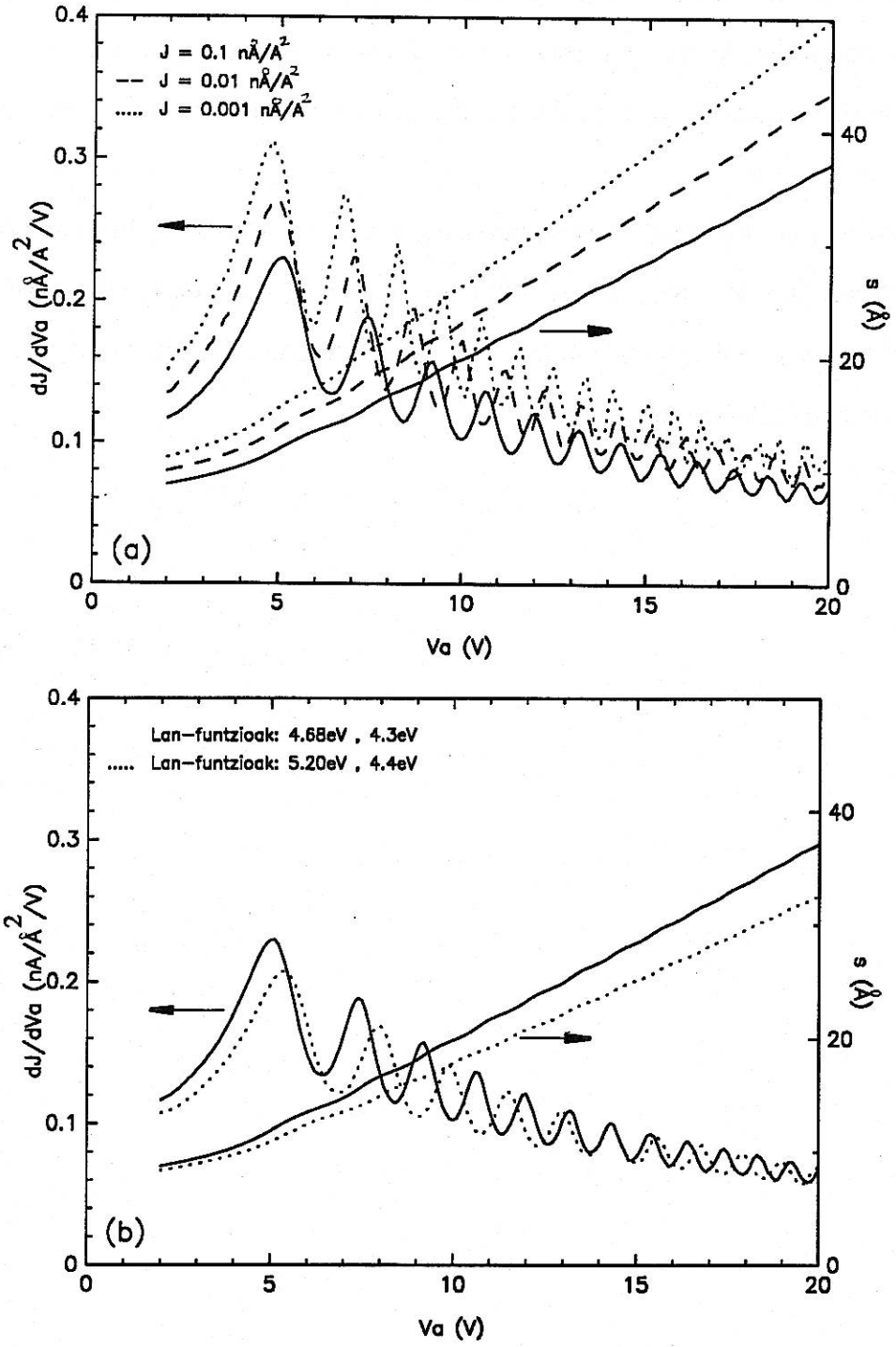
2.17 irudian (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langa zeharkatzen duen tunel-korrontea 1nA-etakoa egiten duten ezaugarriak erakusten dira, tunel-azaleraren

zein lan-funtzioen balio ezberdinetarako. Agerian dago, oszilazioen posizioek tunel-azalerarekiko nahiz lan-funtzioekiko menpekotasun nabaria erakusten dutela, s-V_a ezaugarriak parametro hauen araueraakoak bait dira.



2.16 irudia. J = 0.1nA/Å^2-takoa egiten duten s-V_a eta dI/dV_a ezaugarriak, elektroiek (2.65) zein (2.66) irudi-potentzialak beherauriko potentzial-langa zeharkatzen dutenean. U_L = -12.68eV, U_R = -9.8eV, Φ_L = 4.68eV eta Φ_R = 4.3eV.

Bereziki, elektroiek (2.66) irudi-potentzialak beherauriko (2.67) potentzial-langa zeharkatzen dutela emanik, dI/dV_a-V_a direlako ezaugarri teorikoek emaitza experimentalak egokitzea lor daiteke[59], elektrodo negatiboa punta deneko kasuan, lan-funtzioak eta tunel-azalera eraginkorra era egokian aukeraturik. Alabaina, parametro berberetarako aurkituriko dI/dV_a-V_a oszilazioek ez dituzte tentsioaren aurkako polarizazioarekin lorturiko emaitza experimentalak egokitzen. Izan ere, dI/dV_a-V_a direlako ezaugarrien egiturak menpekotasun handia dute hutseango potentzial-langaren eitearekiko zein elektrodoen geometriarekiko, eta beharrezkoa dugu, beraz, hauek zehaztasunez kontsideratzea; are gehiago, gure ereduetan oinarriturik kalkulaturiko ezaugarriak emaitza experimentalak egoki erazteak gainazal-potentzialaren eitearen nahiz geometriaren berri izatera eraman gaitzake.



2.17 irudia. (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langari dagozkion s-V_a eta dI/dV_a ezaugarriak, korronte-dentsitatearen zenbait baliotarako (2.17a irudia), $\Phi_L = 4.68$eV eta $\Phi_R = 4.3$eV izanik, eta lan-funtzioen zenbait baliotarako (2.17b irudia), $J = 0.1$nA/Å^2 izanik.

2.4 eta 2.5 ataletan tungstenozko punta eta urrezko lagina kontsideratzen ditugu, s-V_a eta dI/dV_a-V_a ezaugarriak kalkulatu eta 24 erreferentziako emaitzekin konparatzeko. 2.4 atalean

trukatze-koerlazio efektu lokal zein ez-lokalak barneratzen dituen bi elektrodo launen arteko hutseango potentzial-langa parametrizatua kontsideratzen dugu, eta 2.5 atalean, tunel-ezaugarriak kalkulatzeko hurbilketa tridimentsionala garatzen dugu, punta esferikoa delako hipotesia eginez.

Elektrodoen lan-funtzioak zehaztasunez ezagutzen ez ditugunez, hurrengo ataletako kalkuluak lan-funtzioen balio ezberdinetarako burutu ditugu, literaturan ematen diren balioetatik[60] $\Phi_L = 5.2eV$ eta $\Phi_R = 4.4eV$ direlakoak aukeraturik emaitza experimentalen egokipena lor daitekeela aurkituz.

2.4. Hutseango potentzial langa: eredu unidimentsionala

Hohenberg-ek, Kohn-ek eta Sham-ek formulaturiko elektroi-gas ez-homogenoen dentsitate-funtzionalaren teorian[61-62] oinarrituriko Lang eta Kohn-en lan aitzindariak[63-65] plazaratu zirenetik hona, dentsitate lokaleko hurbilketa (LDA) oso erabilia izan da solidoen gainazalen gel ereduaren azterketa egiteko orduan. Izan ere, hurbilketa hau arrakasta handiz izan da erabilia metalezko gainazalen egitura elektronikoen kalkuluak burutzeko, bai eta gainazaletako elektroiek jasaten dituzten irispen txikiko elkarrekintza mekaniko-kuantikoen azterketa egiteko ere, berau gainazaletako fisikaren funtsezko problemetariko bat izanik.

Dentsitate lokaleko hurbilketak, ordea, potentzialak hutsean duen jokabide asintotikoaren berri emateko huts egiten du, hurbilketa honetan trukatze-koerlazio potentziala hutsaren mailari exponentzialki hurbiltzen bait zaio, gainazalaren kanpoaldetik, irudi-potentzial klasikoaren jokabidea erakusten ez duelarik; gainazal-potentzialaren hutseango jokabide asintotikoa, bestalde, garrantzi handikoa bihurtu da, aurreko hamarkadan aurresandako[57] eta azken urteotan behaturiko[66-69] irudi-egoera egonkorren berri emateko, bai eta tunel mikroskopioaz eginiko experimentuak interpretatzeko ere.

Horrelatan, bada, ingurune polarizagarri infinitu baten eta kanpo-karga baten arteko irudi-potentzial erakarlea kalkulatzeko zenbait teoria semiklasiko zein kuantiko garatu da[70-73]. Teoria hauek arbuiatu egiten dituzten efektu lokalak, aldiz, kontutan hartu beharrekoak dira tunel-experimentuak interpretatzeko; alegia, tunel mikroskopioaren elektrodoen arteko ohizko separazioetarako beharrezkoa da trukatze-koerlazio efektu lokal zein ez-lokalak aldiberean kontsideratzea[74,75]. Efektu ez-lokalen eraginez irispen handiko irudi-potentziala sorterazten da, alde batetik, eta dentsitate lokaleko hurbilketan azaltzen diren efektu lokalen eraginez hutseango potentzial-langa eraginkorrak irudi-potentzial klasikoak baino leunkiago jotzen du solidoaren barne-potentzialak duen baliora, bestetik.

Elektrodoen arteko separazio handitarako hutseango potentzial-langa eraginkorrak hutsunearen erdialdean irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langara jo beharko lukeela ere, zenbait angstrom-etako separazioetarako, bi elektrodoen dentsitate elektronikoek elkar estali egiten dute, potentzial-langa beheratuz, oraintsu erakutsi den bezala[74]. Beste aldetik, bi

elektrodoen arteko irudi-potentziala txikiagotu egiten da balio absolutuz, efektu dinamikoen eraginez[76,77], potentzial-langaren altuera handiagotuz, zeharkako tunel-denboraren eta bi elektrodoen erantzute-denboraren arteko erlazioaren arauera; bereziki, zeharkako tunel-denbora txikitarako irudi-potentziala desagertu egingo litzateke, eta zenbait angstrom-etako separazioetarako irudi-potentzialak beraren balio klasikoaren 30% inguruko laburketa jasaten duela erakusten dute berriki buruturiko kalkulu teorikoek[77].

Oraintsu, bestalde, ondoko gainazal-potentzial parametrizatua proposatu da, metalezko gainazala launa dela kontsideratuz[78]:

$$V(z) = \begin{cases} \dfrac{U_0}{A\, e^{-B\,(z - z_0)} + 1} & , z \le z_0 \\ \dfrac{1 - e^{-\lambda\,(z - z_0)}}{4\,(z - z_0)} & , z_0 \le z \end{cases} \qquad (2.70)$$

berau hutsaren mailarekiko adierazirik, non U_0 delakoa metalaren barne-potentziala den, λ, hutseango potentzialaren eta barne-potentzialaren arteko transizioaren berri ematen duen parametroa, eta z_0, irudi-planoaren posizioa adierazten duen z koordenatuaren balioa; irudi-planoaren posizioa, gainazalean sorterazitako karga-banaketa induzituaren masa-zentruarena dugu[65,79,80]. A eta B direlako konstanteen balioak potentziala zein beraren deribatua $z = z_0$ posizioan loteraziz lortzen dira:

$$A = -\frac{2\,U_0}{\lambda} - 1 \qquad (2.71)$$

eta

$$B = -\frac{U_0}{A} \,. \qquad (2.72)$$

Bi gainazalen arteko hutseango potentzial-langa parametrizatua

Metalezko bi gainazal launen arteko elektroiek jasaten dituzten irispen txikiko zein irispen handiko elkarrekintzak aldiberean kontsideratu behar izateak, (2.71) gainazal-potentziala

orokortzen duen hutseango ondoko potentzial-langa parametrizatua proposatzera eraman gaitu[29,30]:

$$V(z)=\begin{cases}\dfrac{U_L}{A_L e^{B_L(z-z_L)}+1} & , z\le z_L \\ -\dfrac{1}{4}\left[\dfrac{1-e^{-\lambda_L(z-z_L)}}{z-z_L}+\dfrac{1-e^{-\lambda_R(s-z_R-z)}}{s-z_R-z}-\dfrac{\mu}{d}f(z)\right]+V_e(z) & , z_L\le z\le s-z_L \\ \dfrac{U_R}{A_R e^{B_R(s-z_R-z)}+1} & , s-z_R\le z\end{cases} \quad (2.73)$$

L elektrodoaren hutsaren mailarekiko, non

$$f(z)=2\,\gamma+\Psi\left(1+\frac{z-z_L}{d}\right)+\Psi\left(2-\frac{z-z_L}{d}\right) \quad (2.74)$$

den,

$$V_e(z)=-(V_a+\Phi_L-\Phi_R)\frac{z}{s}$$

eta

$$\Delta\Phi=\Phi_L-\Phi_R \quad , \quad (2.75)$$

Φ_L eta Φ_R direlakoak elektrodoen lan-funtzioak izanik. U_L eta U_R elektrodoen barne-potentzialak dira, z_L eta z_R, irudi-planoek elektrodoen gel-muturrarekiko dituzten posizioak, eta d, irudi-planoen arteko distantzia; A_L, B_L , A_R eta B_R direlako konstanteen balioak, potentziala zein beraren deribatua irudi planoetan loteraziz lortzen dira:

$$A_{L,R}=\frac{-4\,U_{L,R}}{\lambda_{L,R}+\left[1-\mu-\exp(-\lambda_{R,L}\,d)\right]/d+4\,(V_a+\Delta\Phi)\,z'_{L,R}/s}-1 \quad (2.76)$$

eta

$$B_{L,R}=\frac{(A_{L,R}+1)^2}{A_{L,R}}\,\frac{\lambda_{L,R}^2/2-\left[1-\mu-(1+\lambda_{R,L}\,d)\exp(-\lambda_{R,L}\,d)\right]/d^2\pm 4\,(V_a+\Delta\Phi)/s}{-4\,U_{L,R}} \quad , \quad (2.77)$$

non

$$z'_L = z_L \tag{2.78}$$

eta

$$z'_R = s - z_R \tag{2.79}$$

diren, eta "±" delakoak B_R lortzeko "+" adierazten duen, eta B_L lortzeko, "-".

λ_L eta λ_R direlakoak (2.70) gainazal-potentzialaren λ parametroaren antzera, hutseango potentzialaren eta barne-potentzialen arteko transizioaren berri ematen duten parametroak dira. Izan ere, $d > 5$Å denean parametro hauek potentzialak irudi-planoetan duen balioa adierazten dute, hots,

$$V(z_L) \approx -\left(\frac{\lambda_L}{4} + \frac{1-\mu}{4d}\right) - (V_a + \Delta\Phi)\frac{z_L}{s} \tag{2.80}$$

eta

$$V(s - z_R) \approx -\left(\frac{\lambda_R}{4} + \frac{1-\mu}{4d}\right) - (V_a + \Delta\Phi)\frac{s - z_R}{s} \ . \tag{2.81}$$

Elektroiak jasaten duen potentzialak irudi-planoetan barne-potentzialaren eta Fermi-ren mailaren arteko balioren bat duela emanik[65], λ_L eta λ_R parametroek ondoko balioetariko bat izanen dute:

$$4\Phi_{L,R} - \frac{1-\mu}{d} \le \lambda_{L,R} \le 4(\Phi_{L,R} + E_{F_{L,R}}) - \frac{1-\mu}{d} \ . \tag{2.82}$$

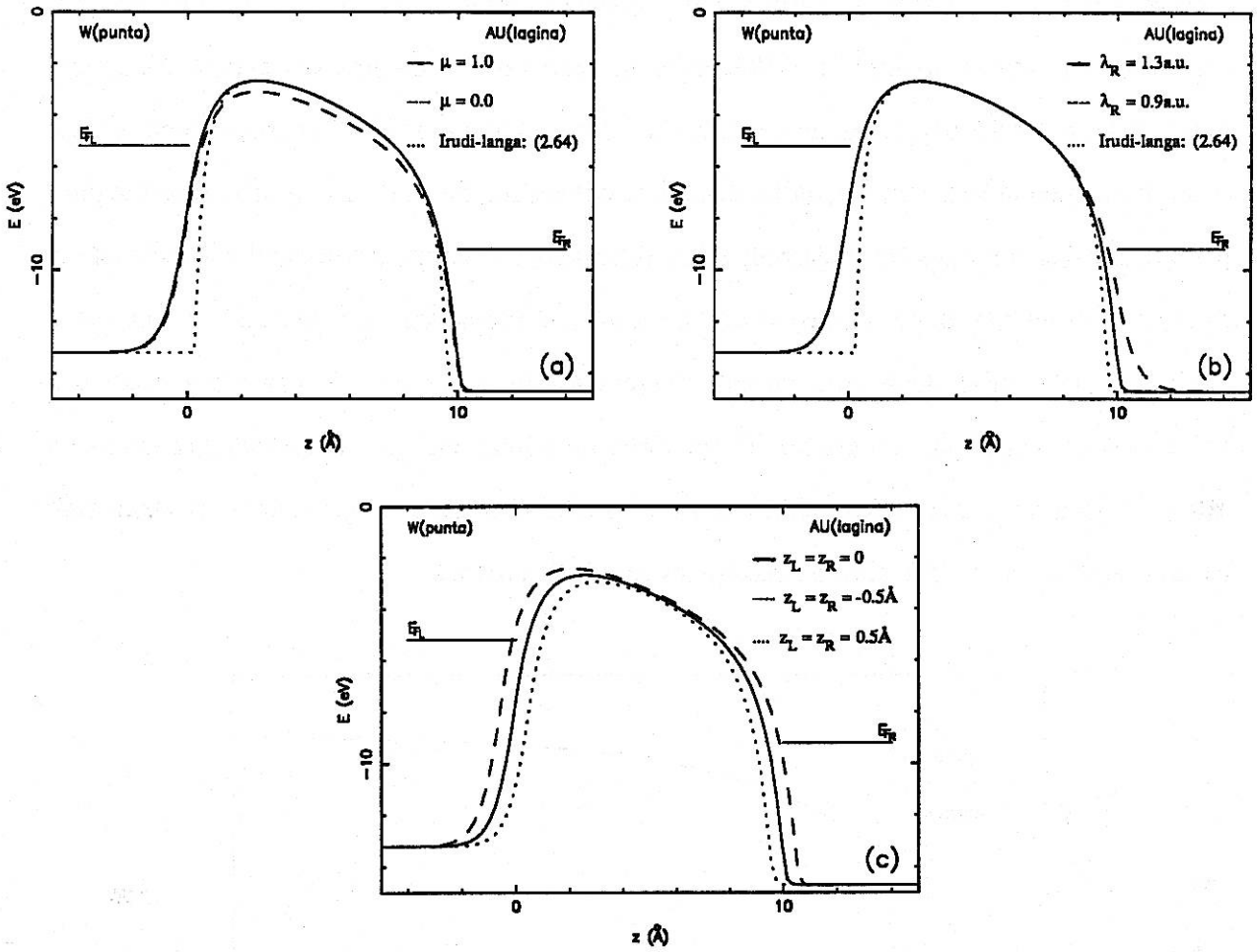
μ parametroak, bestalde, potentzial-langaren altuerak irudi-planoen arteko distantziarekiko duen menpekotasunaren berri ematen digu. $d \gtrsim 5$Å denean, potentzialak husgunearen erdian duen balioa ondokoa dugu:

$$V\left(z_L + \frac{d}{2}\right) \approx -\frac{1-\mu(1-\ln 2)}{d} - \frac{1}{2}(V_a + \Delta\Phi)\left(1 + \frac{z_L - z_R}{s}\right) \ . \tag{2.83}$$

(2.73) potentzial-langa parametrizatua, beraz, (2.64) irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langarekin bat dator husgunearen erdialdean, $\mu = 1$ denean, eta (2.65) edo (2.66) irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langarekin bat, $\mu = 0$ eta $\mu \approx 0.66$ denean, hurrenez hurren.

2.18 irudietan (2.73) potentzial-langa parametrizatua adierazten da, $\lambda_L = 1.0a_0^{-1}$, $\Phi_L = 5.2$eV, $\Phi_R = 4.4$eV, $U_L = -13.2$eV , $U_R = -9.9$eV , $V_a = 4.0$V eta $s = 10$Å izanik, λ_R eta μ parametroen balio ezberdinetarako (2.18a eta 2.18b irudiak), bai eta irudi-planoen posizio

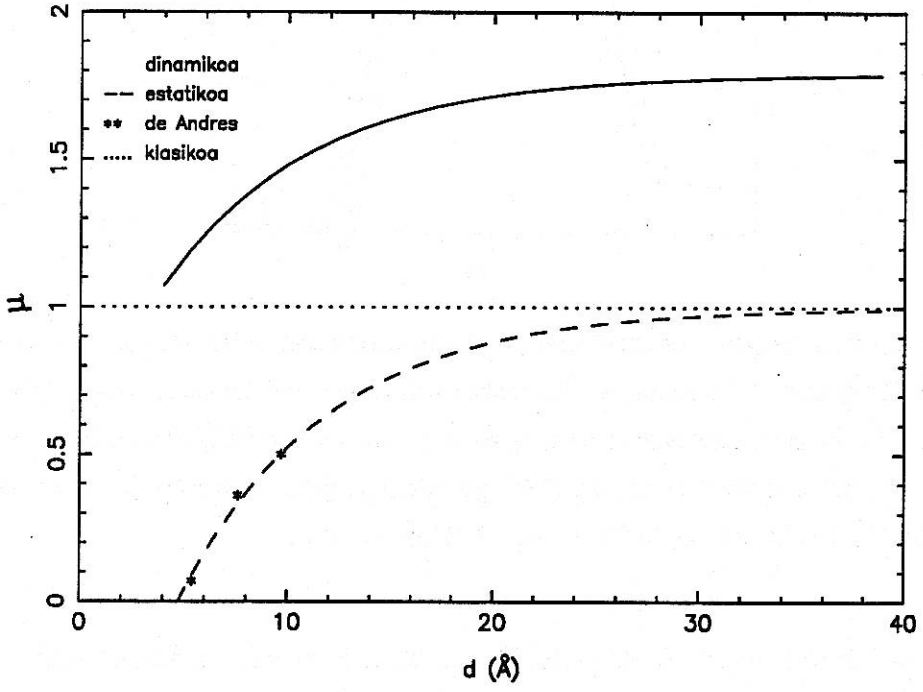
ezberdinetarako ere agertzen da (2.18c irudia), irudi-potentzial zehatzak beherauriko (2.67) potentzial-langarekin batera.



2.18 irudia. (2.73) potentzial-langa parametrizatua, μ parametroaren zenbait baliotarako, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$ eta $z_L = z_R = 0$ izanik (2.18a irudia), λ_R parametroaren zenbait baliotarako, $\mu = 1.0$ eta $z_L = z_R = 0$ izanik (2.18b irudia), eta irudi-planoen posizio ezberdinetarako, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$ eta $\mu = 1$ izanik (2.18c irudia). 2.18a eta 2.18b irudietan 2.65 irudi-potentzialak beherauriko (2.67) potentzial-langa ere erakusten da. $\lambda_L = 1.0a_0^{-1}$, $\Phi_L = 5.2$eV, $\Phi_R = 4.4$eV, $U_L = 13.2$eV , $U_R = 9.9$eV , $V_a = 4.0$V eta $s = 10$Å .

(2.73) potentzial-langa de Andres-ek efektu lokal zein ez-lokalak barnehartuz buruturiko kalkulu mekaniko kuantikoekin[74] bateragarria da, λ_L, λ_R eta μ direlako parametroak era egokian aukeratuz gero. Bereziki, (2.73) potentzial parametrizatua de Andres-en potentzialarekin bat dator, $\mu = 0.5$ eginez gero, irudi-planoen arteko distantzia 9Å-etakoa denean, bai eta distantzia txikiagotarako ere, μ parametroaren balio txikiagoak kontsideraturik.

Emaitza honek irudi-planoen arteko distantzia txikitarako potentzial-langa eraginkorraren altuera irudi-potentzial klasikoarena baino txikiagoa dela erakusten du, eta hau efektu lokalen eraginaren ondorioa da, goian aurreratu dugun bezala; distantzia handitarako efektu hauek arbuiagarriak izanik, gero eta eragin handiagoa dute hutseango potentzial-langaren gainean, irudi-planoen arteko distantzia txikiagotzean. Izan ere, irudi-planoen arteko distantzia handitarako μ parametroak unitatera jo beharko luke, efektu dinamikoak arbuiatuz gero. Efektu dinamikoak kontsideratzekotan, aldiz, distantzia txikitarako de Andres-en potentziala eta gure potentzial parametrizatua bateragarriak egiten dituen eta distantzia handitarako unitatera jotzen duen μ parametroa, μ parametro estatikoa alegia, handiagotu egin beharko genuke era egokian. 2.19 irudian de Andres-en potentziala egokitu egiten duen μ parametro estatikoa adierazten da, irudi-planoen arteko distantziaren funtzioan, efektu dinamikoak barnehartzen dituen μ parametro dinamikoarekin batera, efektu dinamikoen eraginez irudi-potentzialak beraren balio osoaren 65%-eko murrizketa jasaten duela emanez.



2.19 irudia. Separazio txikitarako 74 erreferentziako potentzial-langa doierazten duen eta distantzia handitarako irudi-potentzial klasikoa doierazten duen μ parametroa, parametro estatikoa alegia, eta efektu dinamikoen berri ematen duena, parametro dinamikoa alegia, irudi-planoen arteko distantziaren funtzioan. (2.73) potentzial-langa eta 74 erreferentzian lortzen dena irudi-planoen arteko 5.4, 7.6 eta 9.7Å-etako distantzietarako doierazten dituen μ parametroaren balioak ere erakusten dira, izartxo batez.

Bestalde, hutseango elektroiek jasaten duten potentzial-langa eraginkorra (2.73) potentzial-ereduaren bidez adieraziz kalkulaturiko itxurazko potentzial-langa[30], Lang-ek efektu ez-lokalak arbuiatuz oraintsu lorturiko emaitza teorikoekin[81] bat dator, irudi-planoen arteko distantzia txikitarako (d < 6Å); (2.73) potentzial-eredurako kalkulaturiko itxurazko potentzial-langa, bestalde, experientziak erakusten duen bezalakoa dugu, irudi-planoen arteko distantzia handitarako, irispen handiko irudi-potentzialaren eraginaren berri ematen duelarik, Lang-ek lorturikoak ez bezala, 2.6 atalean azalduko den legez.

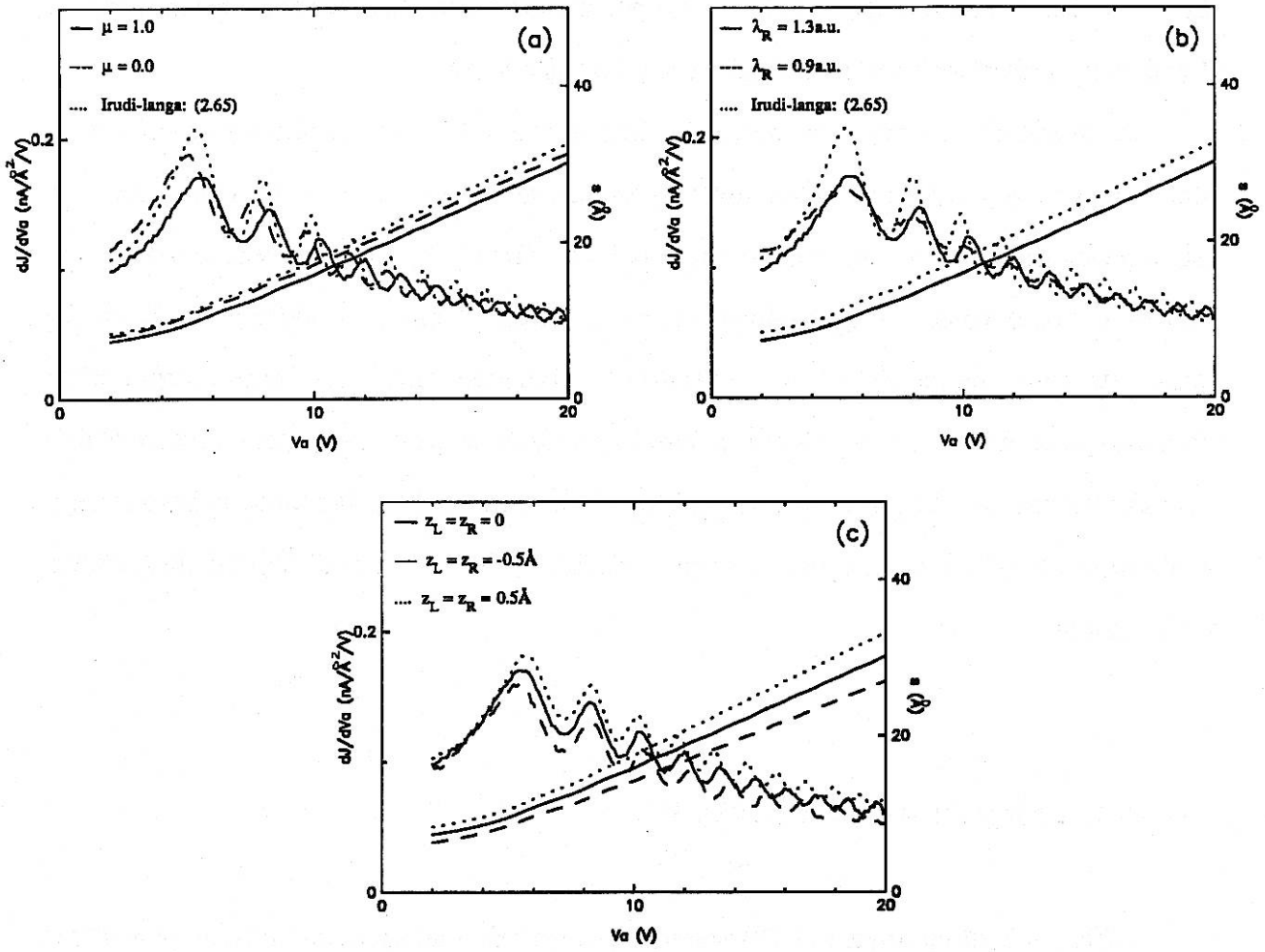
Behin elektroiek zeharkatzen duten potentzial-langa (2.73) langa parametrizatuaren erakoa dela emanez gero, korronte-dentsitatea konstante egiten duten s-V_a ezaugarriak μ parametroaren arauerakoak izango dira, bai eta dI/dV_a-V_a direlako ezaugarriak ere. Tunel-korrontea konstante egiten duen separazioa, bestalde, oso gutxi aldatzen da λ_L eta λ_R parametroekin, baina $dI/dV_a(V_a)$ kurbaren oszilazioen eiteak λ_R parametroarekiko menpekotasun handia du, R delakoa elektrodo positiboa denean, transmisio-erresonantziak langak elektrodo positiboaren ingurunean duen eitearen arauerakoak bait dira, aurreko atalean erakutsi den bezala. Hortaz, bada, λ_L parametroa finkaturik, λ_R eta μ direlakoak doigarritzat hartu ditugu.

Tunel-ezaugarriak: s-V_a eta dI/dV_a-V_a

2.20a eta 2.20b irudietan (2.73) potentzial-langa zeharkatzen duen korronte-dentsitatea 0.1nA/Å^2-takoa egiten duten s-V_a eta dI/dV_a-V_a ezaugarriak erakusten dira, $\lambda_L = 1.0a_0^{-1}$ eta $z_L = z_R = 0$ izanik, 2.18 irudian erabilitako lan-funtzioen eta barne-potentzialen balio berberetarako eta λ_R zein μ parametroen zenbait baliotarako, (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langari dagozkion tunel-ezaugarriekin batera. 2.20c irudian ere, (2.73) potentzial-langa zeharkatzen duen korronte-dentsitatea 0.1nA/Å^2-takoa egiten duten ezaugarriak erakusten dira, $\lambda_L = 1.0a_0^{-1}$, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$ eta $\mu = 1.0$ parametroetarako eta irudi-planoen posizio ezberdinetarako.

(2.73) potentzial-langa erabiliz lorturiko $dI/dV_a(V_a)$ kurbaren oszilazioen posizioak,

(2.65) irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langarekin lorturikoarenekin bat datoz, $\mu = 0$ denean, 2.20a irudiak erakusten duen bezala; halaxe gertatzen da, μ parametroaren balio honetarako bi langen altuerak bat datozelarik, korronte-dentsitatea konstante egiten duten s-V_a ezaugarriak berdintsuak bait dira.



2.20 irudia. J = 0.1nA/Å^2-takoa egiten duten s-V_a eta dI/dV_a-V_a ezaugarriak, elektroiek (2.73) potentzial-langa zeharkatzen dutela emanez, μ parametroaren zenbait baliotarako, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$ eta $z_L = z_R = 0$ izanik (2.20a irudia), λ_R parametroaren zenbait baliotarako, $\mu = 1.0$ eta $z_L = z_R = 0$ izanik (2.20b irudia), eta irudi-planoen posizio ezberdinetarako, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$ eta $\mu = 1.0$ izanik (2.20c irudia). 2.20a eta 2.20b irudietan, (2.65) irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langari dagozkion ezaugarriak ere erakusten dira. $\lambda_L = 1.0a_0^{-1}$, $\Phi_L = 5.2$eV, $\Phi_R = 4.4$eV, $U_L = -13.2$eV eta $U_R = -9.9$eV.

Alabaina, (2.73) potentzial-langa gainazalen inguruneetan irudi-potentzial klasikoak beheraturiko langa baino leunduagoa denez gero, oszilazioen eitea erabat ezberdina da bilakatzen da bi langa hauen kasuetan, transmisio-erresonantziak ere leunduagoak bilakatzen

bait dira, aurreko atalean ikusi den bezala. Halaber, (2.73) potentzial-ereduari dagozkion oszilazioen eiteak λ_R parametroarekiko menpekotasun nabaria erakusten du; izan ere, parametro hau txikiagotzean potentzial-langa leundu egiten da laginaren gainazalaren ingurunean eta oszilazioak ere leundu egiten dira, beraz, 2.20b irudiak erakusten duen legez.

Beste aldetik, irudi-planoak bi elektrodoen arteko husgunean kokaturik egonez gero, elektroiek potentzial-langa txikiagoa topatzen dute eta korronte-dentsitatea konstante egiten duen elektrodoen arteko separazioa handiagoa bilakatzen da, bai eta elkarren ondoko oszilazioen arteko distantzia ere, 2.20c irudiak erakusten duen erara.

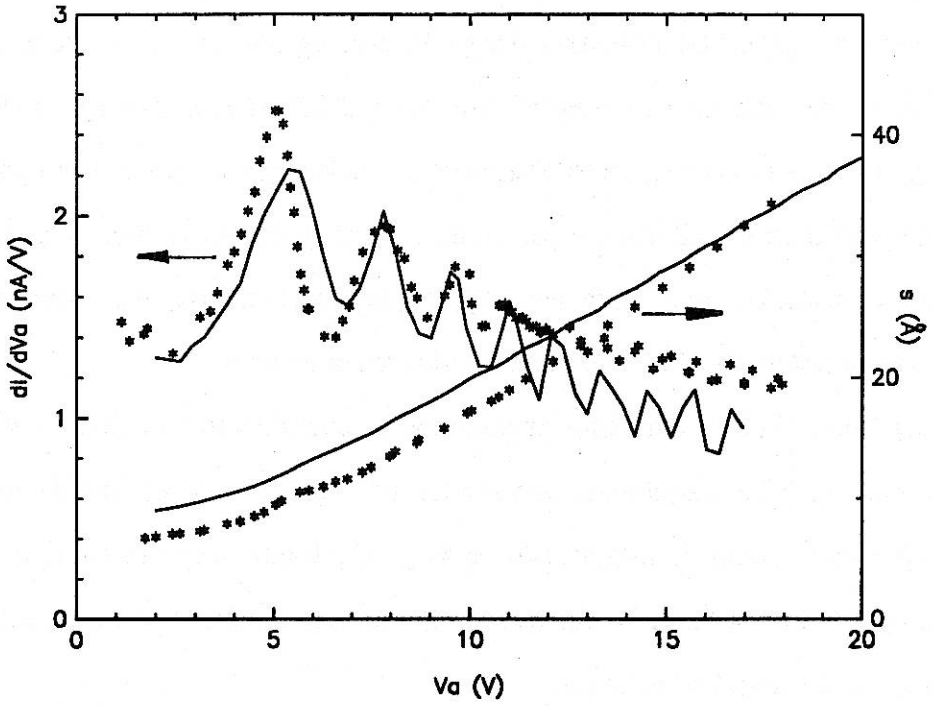
Tunel-ezaugarriak, korronte-dentsitatearen balio ezberdinetarako kalkulatu dira, (2.73) potentzial-eredua erabiliz eta parametroen zenbait baliotarako, 24 erreferentzian lorturiko emaitza experimentalekin konparatzeko asmoz. Oszilazio experimentalen eitea λ_R parametroaren balio handitarako doitzen da onen, potentziala elektrodo positiboaren gainazalean azkar aldatzen denean alegia.

Kalkulaturiko oszilazioen posizioek, bestalde, ongi doitzen dituzte oszilazio experimentalenak, behin $z_L = z_R = 0$ eta 2.19 irudiko μ parametro dinamikoa aukeratuz gero, tunel-azalera $500Å^2$-takoa dela ematen denean, 2.21 irudian erakusten den bezala, non $\lambda_R=1.3a_0^{-1}$ kontsideratu den.

Alabaina, bi dira emaitza experimentalen eta (2.73) potentzial-eredu unidimentsionalaz baliaturik lorturiko emaitza teorikoen artean aurkitu ditugun ezberdintasun sistematikoak. Lehenengo eta behin, lehen oszilazio experimentala zorrotzagoa da aurkituriko lehen oszilazio teorikoa baino; tentsio handitarako, bestalde, korronte konstanteko $dI/dV_a(V_a)$ kurba teorikoa altuagoa da kurba experimentala baino, eta elkarren ondoko oszilazioen arteko distantziak handiagoak dira, tunel-korrontea konstante egiten duten elektrodoen arteko separazioak separazio experimentalak baino handiagoak direla erakutsiz, $s(V_a)$ kurbak konparatuz ere ondoriozta daitekeen legez.

Lehen ez-adostasuna elektrodoen gainazalak ideial eta ez-lasaituak direla suposatzearen ondorioa izan daiteke. Izan ere, gainazalak solidoaren barnealderantz lasaiturik egonez gero, barne-potentziala sakonagoa izanen litzateke gainazalaren ingurunean, hutseango potentziala ingurune honetan maldatsuagoa bilakatuz; orduan, zorrotzagoak izango lirateke

transmisio-erresonantziak, bai eta $dI/dV_a(V_a)$ kurbaren oszilazioak ere.



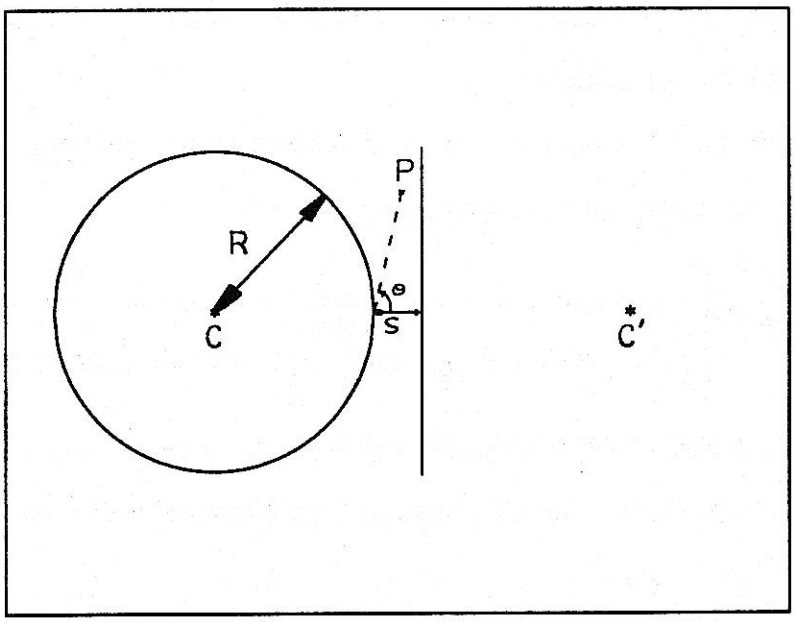
2.21 irudia. I = 1nA-etakoa egiten duten tunel-ezaugarriak, elektroiek (2.73) potentzial-langa zeharkatzen dutela eta tunel-azalera 500Å^2-takoa dela emanez, irudi-planoen arteko distantziarekin aldatzen den 2.19 irudiko μ parametro dinamikoa, $\lambda_L = 1.0a_0^{-1}$, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$ eta $z_L = z_R = 0$ kontsideraturik. 24 erreferentziako emaitza experimentalak ere erakusten dira, izartxoen bidez.

Tentsio handitarako azaltzen den ez-adostasuna, ordea, eredu unidimentsionala erabiltzearen ondorioa da, eta puntaren kurbadurarekin dago erlazionaturik, hain zuzen ere. Hurrengo atalean tunel-korrontea konstante egiten duten s-V_a eta dI/dV_a-V_a ezaugarrien kalkulu tridimentsionala burutzen dugu, eta lorturiko emaitzek puntaren geometriarekiko duten menpekotasuna aztertzen dugu, bai eta eta gure emaitza teorikoak emaitza experimentalekin konparatu ere; kalkulu hauetan, berriz, ez dugu metalezko gainazalen inongo lasaipenik kontsideratuko, beronen eragina tentsio txikiko konduktantzia-tentsioa ezaugarrietara murrizten bait da, goian azaldu dugun bezala.

2.5. Gainazal-geometria: hurbilketa tridimentsionala

Atal honetan, tunel mikroskopioa osotzen duten elektrodoak punta esferikoa eta lagin launa direla suposatuko dugu. Punta esferikoaren eredua beste zenbait lan teorikotan ere erabilia izan den puntaren eitearen lehen hurbilketa dugu[33,35,36], eta etorkizunean punta hiperboloidea deneko kasua ere kontsideratzekotan gaude.

Bira $R+s$ distantziara dauden 2.22 irudiko R erradiodun punta esferikoa eta lagin launa, beraien gainazaletako potentzial elektrikoak 0 eta $V_a+\Delta\Phi$ izanik, hurrenez hurren; V_a, bi elektrodoen artean sorterazitako potentzal-diferentzia da, eta $\Delta\Phi$, bi elektrodoen lan-funtzioen arteko diferentzia.



2.22 irudia. R erradiodun punta esferikoa eta lagin launa, s delakoa puntaren erpinaren eta laginaren arteko distantzia izanik. C' puntua problema elektrostatikoa ebaztean erabiltzen dugun erreferentzi puntua da.

Problema elektrostatiko honen soluzioa, metalezko bi gainazal hauek ekipotentzialak egiten dituen infinitu irudi-kargaz osoturiko ondoko multzoa kontsideraturik lor daiteke[82]:

$$q_1 = (V_a + \Delta\Phi)R \quad , \quad q_i = \frac{R}{2R + 2s - d_{i-1}} q_{i-1} \tag{2.84}$$

eta

$$q'_1 = -(V_a + \Delta\Phi)R \quad , \quad q'_i = \frac{R}{2R + 2s - d'_{i-1}} q_{i-1} \quad , \tag{2.85}$$

non

$$d_1 = 0 \quad , \quad d_i = \frac{R^2}{2R + 2s - d_{i-1}} \tag{2.86}$$

eta

$$d'_1 = 0 \quad , \quad d'_i = \frac{R^2}{2R + 2s - d'_{i-1}} \tag{2.87}$$

diren, d_i delakoa q_i kargaren eta punta esferikoaren C zentruaren arteko distantzia izanik, eta d'_i delakoa q'_i kargaren eta laginarekiko C-ren simetrikoa den C puntuaren arteko distantzia. $d_i = d'_i$ direlako distantzia guztiak R baino txikiagoak dira, alde batetik, eta $|q_i| = |q'_i|$ direlakoak gero eta txikiagoak dira, bestetik, elkarren ondoko irudi-kargek sorterazitako potentzial elektrikoa gero eta txikiagoa bilakatuz.

Horrelatan, bada, konbergitu egiten duen ondoko seriearen bidez adieraz daiteke, koordenatu polarretan, potentzial elektrostatikoa:

$$V_e(r,\theta) = \sum_{i=1}^{\infty} q_i \left[\frac{1}{\left[(R - d_i)^2 + r^2 + 2(R - d_i) r\cos\theta \right]^{1/2}} - \frac{1}{\left[(R + 2s - d_i)^2 + r^2 - 2(R + 2s - d_i) r\cos\theta \right]^{1/2}} \right] \tag{2.88}$$

non q_i eta d_i direlakoak, (2.84) eta (2.86) adierazpenetan definiturikoak diren, hurrenez hurren. $\theta = 0$ lerroko puntuetan, bereziki, ondokoa dugu potentzial elektrostatikoa:

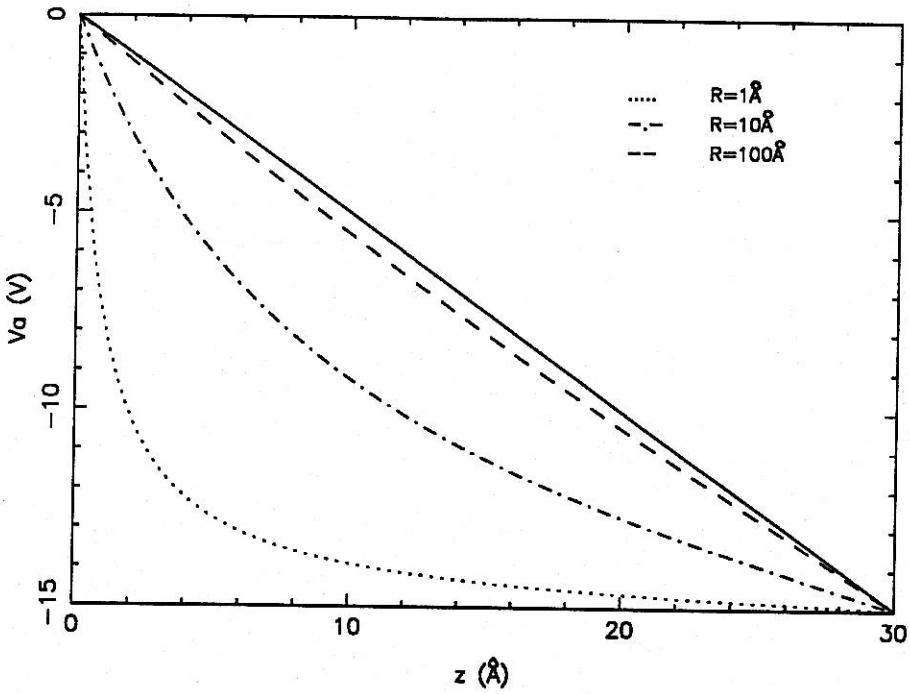
$$V(z) = \sum_{i=1}^{\infty} q_i \left\{ \frac{1}{R + z - d_i} - \frac{1}{R + 2s - z - d_i} \right\} \tag{2.89}$$

eta ondokoa, beraz, eremu elektrikoa:

$$E(z) = \sum_{i=1}^{\infty} q_i \left[\frac{1}{(R + z - d_i)^2} + \frac{1}{(R + 2s - z - d_i)^2} \right] z \quad , \tag{2.90}$$

$z = r\cos\theta$ izanik, eta z, z erdiardatz positiboaren norabide eta norantza dituen bektore unitarioa.

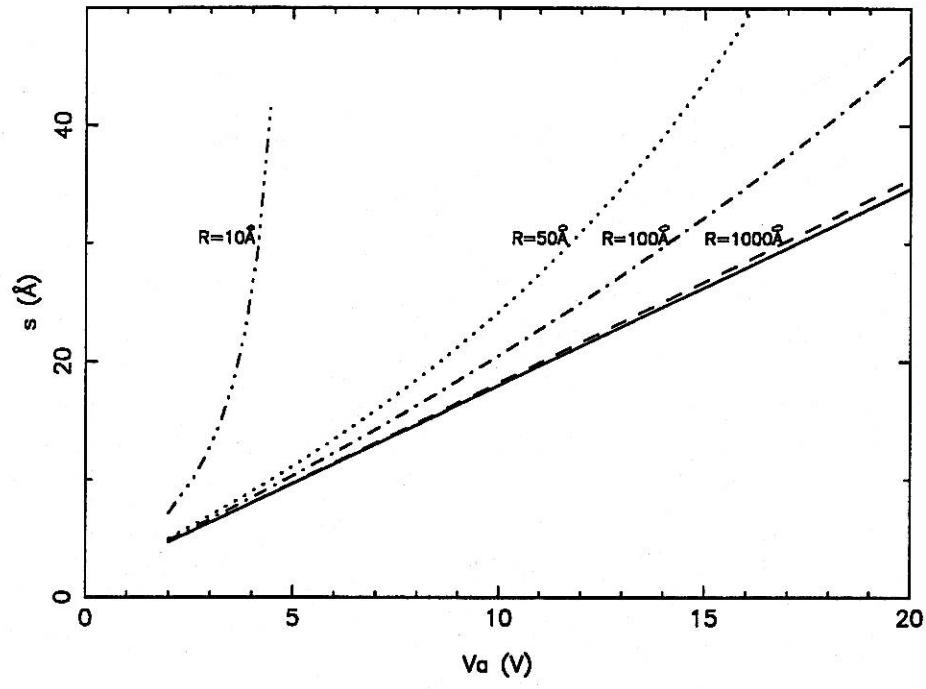
2.23 irudian (2.89) adierazpeneko potentzial elektrostatikoa adierazten da, z-ren funtzioan, puntaren erradioaren balio ezberdinetarako, $V_a = 15$V eta $s = 30$Å direnean.



2.23 irudia. 2.22 irudiko puntaren eta laginaren arteko $\theta = 0$ deneko puntuetako potentzial elektrostatikoa, z koordenatuaren funtzioan, puntaren erradioaren zenbait baliotarako. Lerro jarraiak bi planoren arteko potentzial elektrostatikoa adierazten du.

Puntaren erpinetik hurbil dauden puntuetako eremu elektrikoa bi gainazal launen artekoa baino bortitzagoa da, eta are bortitzagoa da bi gainazalen arteko potentzial-diferentzia handiagotu egiten denean. Tentsio handitarako, beraz, puntaren erpineko eremu elektrikoa konstante egiten duen elektrodoen arteko separazioa, punta kurbatuaren kasuan handiagoa izango punta launaren kasuan baino; ondorioz, tentsio handitarako tunel-elektroiek zeharkatzen duten langa elektrodo negatiboaren ingurune hurbilean kokaturik dagoenez gero, korronte-dentsitatea konstante egiten duen separazioa ere handiagoa izango da, elektroiak puntatik laginerantz abiatzen direnean, bi planoren arteko korronte-dentsitatea konstante egiten duen separazioa baino, eta $s(V_a)$ delako lerroa gorantz desbideratuko da. Punta kurbatua elektrodo positiboa balitz, ordea, korronte-dentsitatea konstante egiten duen separazioa txikiagoa izango litzateke punta kurbatuaren kasuan punta launaren kasuan baino, nahiz eta kurbaduraren eragina txikiagoa izango litzatekeen.

2.24 irudian puntaren erpineko eremu elektrikoa 0.6eV/Å-etakoa egiten duen $s(V_a)$ kurba adierazten da, puntaren erradioaren balio ezberdinetarako, punta elektrodo negatiboa deneko kasuan.



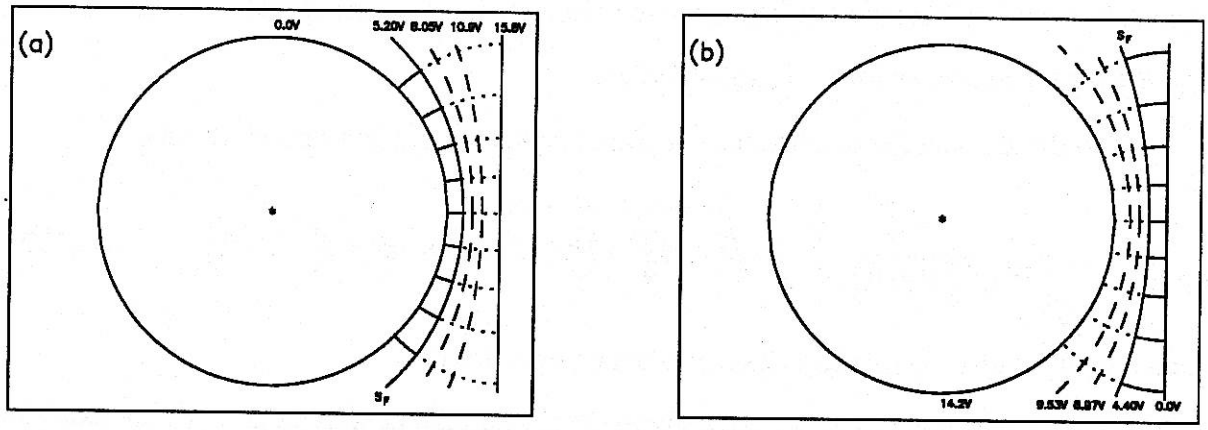
2.24 irudia. Puntaren erpineko eremu elektrikoa 0.6V/Å-etakoa egiten duten s-V_a ezaugarriak, puntaren erradioaren zenbait baliotarako. Lerro jarraiak bi gainazal launen arteko eremu elektrikoa 0.6eV/Å-etakoa egiten duen $s(V_a)$ kurba adierazten du.

Emaitza hauek, era honetara lorturiko s-V_a ezaugarriek puntaren erradiorekiko menpekotasun handia dutela erakusten dute; 100Å-etako erradiodun puntaren kasuan lorturiko $s(V_a)$ delako kurba, bestalde, tunel-korrontea 1nA-etakoa egiten duen kurba experimentalarekin bat dator, tentsio handitarako. Hau puntaren erradioaren berri jasotzeko oso hurbilketa arrunta da, tunel-korrontea konstante egiten duen korronte-dentsitatea konstantea ez bait da, ez eta tentsio handiko eremu elektrikoa ere, beraz, tunel-azalera konstantea ez den bitartean; alabaina, tunel-korronte konstantedun s-V_a ezaugarrietan geometriak duen eragina nolakoa den ulertzeko baliagarria suerta dakiguke.

Tunel-azalera eraginkorra

(2.88) delako adierazpenaz baliaturik, puntaren eta laginaren arteko espazioaldeko gainazal ekipotentzialak kalkula daitezke, aldagai bakarreko funtzio baten zeroak bilatuz, bai eta eremu-lerroak aurkitu ere, (2.88) deribatuz eta lehen ordenako ekuazio diferentzialak askatuz.

2.25 irudietan era honetara numerikoki kalkulaturiko gainazal ekipotentzialak eta eremu-lerroak adierazten dira, $V_a = 15V$, $s = 30Å$ eta $R = 100Å$ direnean, punta elektrodo negatiboa deneko kasuan (2.25a irudia), nahiz alderantzizko polarizazioaren kasuan (2.25b irudia).



2.25 irudia. Puntaren eta laginaren arteko espazioaldeko eremu elektrostatikoaren eremu-lerroak eta gainazal ekipotentzialak, punta elektrodo negatiboa denean (2.25a irudia) eta elektrodo positiboa denean (2.25b irudia). Potentzial elektrostatikoak elektrodo negatiboaren Fermi-ren maila berdintzen dueneko gainazal ekipotentziala, S_F, lerro jarraien bidez adierazten da, bai eta tunel-espazioaldeko eremu-lerroak ere; tunel-espazioaldea, Fermi-ren elektroiek energia negatiboa duteneko espazioaldeari deritzo. $V_a = 15V$, $s = 30Å$ eta $R = 100Å$.

Tunel-espazioaldea, hots, elektrodo negatiboaren eta S_F gainazal ekipotentzialaren arteko espazioaldea, beraz, puntaren erpinaren ingurune hurbilean dago, punta elektrodo negatiboa denean; aldiz, puntaren erpinetik urrun dago, alderantzizko polarizazioaren kasuan, goian aurreratu dugun bezala. Bestalde, tentsioa handiagotuz gero, S_F gainazal ekipotentziala gero eta kurbatuagoa bilakatzen da, punta negatiboaren kasuan, eta gero eta launagoa, punta positiboaren kasuan, tunel-korronteak konstante irauten duen bitartean; hortaz, $\theta = 0$ deneko lerroan barrena sorterazitako korronte elektrikoaz gaineko korronteek ere izango dute eragin nabaria neurturiko tunel-korronte osoan, tentsioa handia denean, tunel-azalera eraginkorra areagotuz.

Bi elektrodoen arteko hutseango potentzial-langa zeharkatzen duten elektroiak eremu-lerroetan barrena higitzen direneko hipotesi semi-klasikoan, tunel-azalera eraginkorra kalkula daiteke, eremu-lerroetan barrenako korronte-dentsitateak kalkulatzeko eredu unidimentsionalaz baliatuz gero. Izan ere, tunel-azalera eraginkorra ondoko era honetara defini

dezakegu:

$$A_{\text{eff}} = \frac{1}{J_0} \int_{S_F} dS\, J(r) \quad , \tag{2.91}$$

S_F gainazal ekipotentzialean zehar integraturik, bertan $J(r)$ delakoa gainazal ekipotentzial honetako r posizio bektoreko puntura heltzen diren elektroien korronte-dentsitatea izanik, eta J_0, $\theta = 0$ deneko lerroan barrena kalkulaturikoa.

Koordenatu polarrak erabiliz, tunel-azalera eraginkorra era honetara lor daiteke:

$$A_{\text{eff}} = \frac{2\pi}{J\left[r(0),0\right]} \int_0^{\pi} d\theta \sqrt{\left[r(\theta)\right]^2 + \left[dr/d\theta\right]^2}\; r(\theta) \sin\theta\; J\left[r(\theta),\theta\right] \quad , \tag{2.92}$$

non $r=r(\theta)$ delakoa S_F gainazal ekipotentzialaren ekuazioa den.

Transmisio-probabilitateak kalkulatzeko WKB hurbilketa erabiliz gero, (2.20) ekuazioa erabil dezakegu korronte-dentsitatea kalkulatzeko, esku artean ditugun separazioetarako. S_F gainazal ekipotentzialaren (r,θ) puntura heltzen diren elektroiek topatzen duten potentzial-langaren batezbesteko balioa eta zabalera eraginkorra hauexek dira:

$$\bar{\Phi}\left[r(\theta),\theta\right] = \frac{1}{\Delta s\left[r(\theta),\theta\right]} \int_{r_0(\theta)}^{r(\theta)} dr' \sqrt{1 + r'^2 \left[d\theta'/dr'\right]^2}\; \varphi\left[r',\, \theta'(r')\right] \tag{2.93}$$

eta

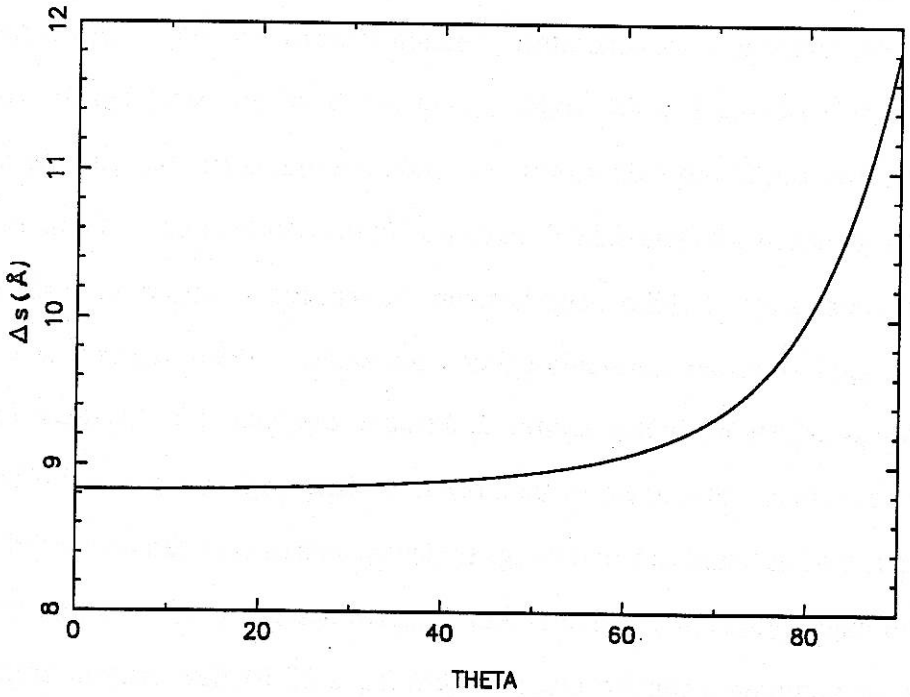
$$\Delta s\left[r(\theta),\theta\right] = \int_{r_0(\theta)}^{r(\theta)} dr' \sqrt{1 + r'^2 \left[d\theta'/dr'\right]^2} \quad , \tag{2.94}$$

hurrenez hurren, non

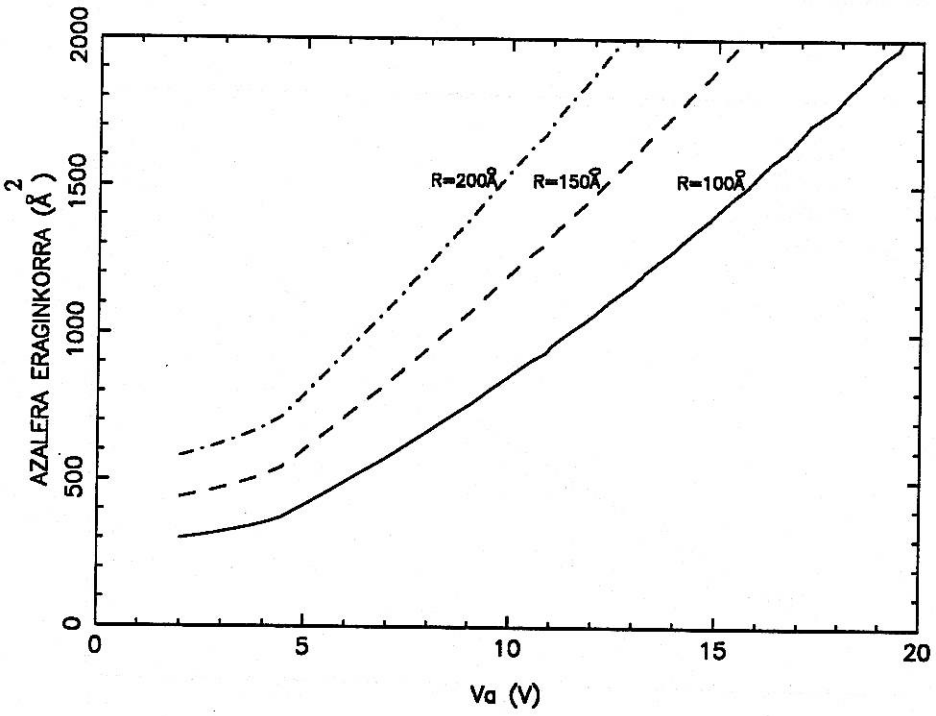
$$\varphi(r,\theta) = V_e(r,\theta) - \Phi_L \tag{2.95}$$

den, irudi-indarren eragina arbuiatuz gero, $V_e(r,\theta)$ delakoa (2.88) adierazpeneko potentzial elektrostatikoa izanik. $r_0(\theta)$, S_F gainazal ekipotentzialeko θ koordenatu polarreko puntura heltzen den $\theta' = \theta'(r')$ eremu-lerroaren eta elektrodo negatiboaren gainazalaren arteko ebakidura-puntuaren r koordenatu polarra da, eta $r = r(\theta)$, eremu-lerro honen eta S_F gainazal ekipotentzialaren arteko ebakidura-puntuarena. Hutseango potentzial-langaren batezbesteko balioa oso gutxi aldatzen da θ angeluarekin. Ordea, tunel-distantziak θ-rekin jasaten duen

aldakuntza nabarmena da, tentsio txikitarako bereziki; hau 2.26 irudian erakusten da, V_a= 15V-takoa deneko kasuan.



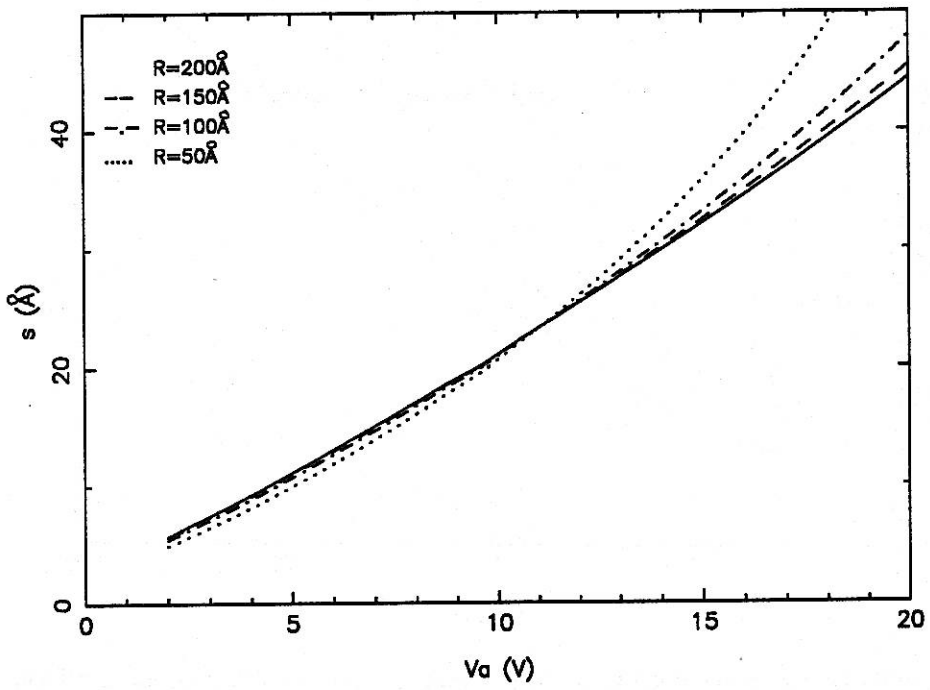
2.26 irudia. (2.94) adierazpenaren bidez definituriko tunel-distantzia, θ angeluaren funtzioan. V_a = 15V, s = 30Å eta R = 100Å.



2.27 irudia. (2.92) adierazpenaren bidez kalkulaturiko azalera eraginkorra, tentsioaren funtzioan, tentsioaren balio bakoitzeko korronte-dentsitatea konstante egiten duen separazioa kontsideratuz. Puntaren erradioaren 100, 150 eta 200Å-etako balioak kontsideratu dira.

2.27 irudian era honetara kalkulaturiko tunel-azalera eraginkorra adierazten da, tentsioaren funtzioan, tentsioaren balio bakoitzeko korronte-dentsitatea konstante egiten duen elektrodoen arteko separazioa kontsideratuz, puntaren erradioaren balio ezberdinetarako eta punta negatiboa dela emanik.Tentsio txikitarako, elektrodo positiboaren lan-funtzioa baino txikiagoak diren tentsioetarako hain zuzen ere, azalera eraginkorra oso gutxi aldatzen da tentsioarekin, S_F gainazal ekipotentziala aldatzen ez bait da; eremu-emisioa dugunean, ostera, azalera eraginkorraren tentsioarekiko menpekotasuna oso nabaria da, espero genezakeen legez.

Ondorioz, tunel-korrontea konstante egiten duen korronte-dentsitatea ez da konstantea izango, ez eta puntaren erpineko eremu elektrikoa ere, eta 2.24 irudiko kalkuluak birkontsideratu egin behar ditugu. Horrelatan, bada, azalera eraginkorraren balio bakoitzeko tentsio handiko tunel-korrontea 1nA-etakoa egiten duen puntaren erpineko eremu elektrikoaren balioa estimatu dugu, puntaren erradioaren balio ezberdinetarako, eta, ondoren, tentsioaren balio bakoitzeko puntaren erpineko eremu elektrikoa 2.27 irudiko azalera eraginkorrari dagokiona izan dadin elektrodoen arteko separazioak izan behar duen balioa kalkulatu da, 2.28 irudiko emaitzak aurkituz.



2.28 irudia. Puntaren erpineko eremu elektrikoa 2.27 irudiko azalera eraginkorraren aldakuntzaren arauera alda erazten duten s-V_a ezaugarriak, tentsioaren funtzioan, puntaren erradioaren zenbait baliotarako.

Irudi honetako $s(V_a)$ direlako kurbak eta tunel-korrontea 1nA-etakoa egiten duen kurba experimentala konparatuz gero, puntaren erradioa 150Å-etakoa denean tentsio handitarako eboluzio berdintsuak erakusten dutela aurkitzen da. Alabaina, 2.27 irudiko azalera eraginkorra kalkulatzeko, tunel-korrontea konstante egiten duen separazioa kontsideratu behar izan dugu, tentsioaren balio bakoitzeko; tunel-korrontea konstante egiten duen separazioa, berriz, azalera eraginkorraren arauerakoa da, eta beharrezkoa dugu, beraz, azalera eraginkorra nahiz tunel-korrontea konstante egiten duen separazioa, biak, aldi berean eta bateratasunez kalkulatzea.

Tunel-ezaugarriak: s-V_a eta dI/dV_a-V_a

Behin puntaren erradioa, tentsioa eta elektrodoen arteko separazioa emanez gero, $\theta = 0$ deneko lerroan barrena kalkulatzen dugu korronte-dentsitatea, elektroiek zeharkatzen duten hutseango potentzial-langa ondokoa dela emanik:

$$V(z) = \begin{cases} \dfrac{U_L}{A_L e^{B_L(z-z_L)}+1} & , z \le z_L \\ -\dfrac{1}{4}\left[\dfrac{1-e^{-\lambda_L(z-z_L)}}{z-z_L} + \dfrac{1-e^{-\lambda_R(s-z_R-z)}}{s-z_R-z} - \dfrac{\mu}{d} f(z)\right] + V_e(z) & , z_L \le z \le s-z \\ \dfrac{U_R}{A_R e^{B_R(s-z_R-z)}+1} & , s-z_R \le z \end{cases}$$

non $V_e(z)$ delakoa (2.89) adierazpeneko potentzial elektrostatikoa den, $f(z)$, (2.74) adierazpeneko funtzioa, eta A_L, B_L, A_R eta B_R direlakoak, potentziala zein beraren deribatua irudi-planoetan loteraziz lorturiko konstanteak:

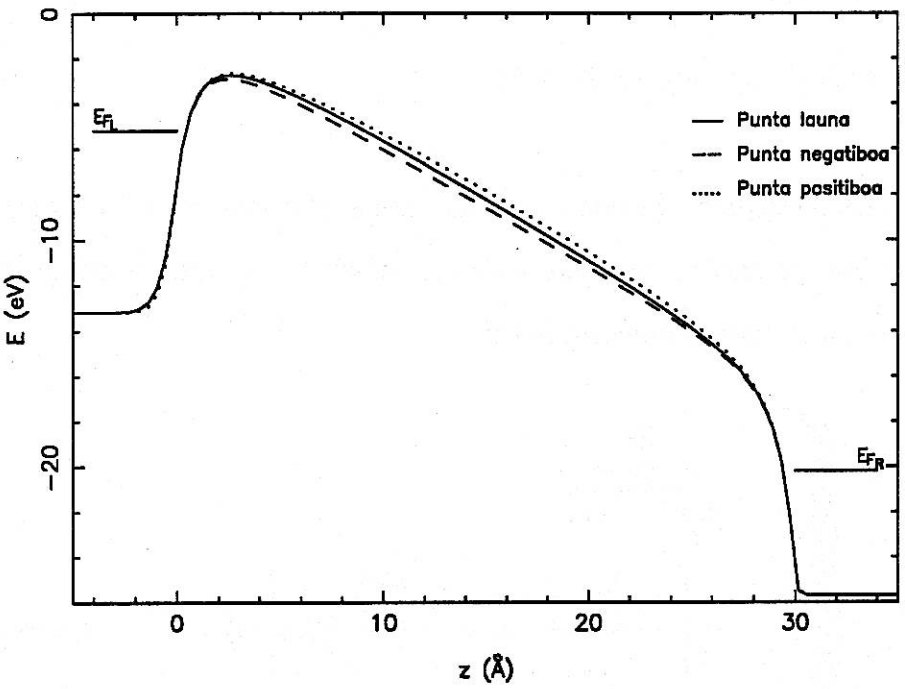
$$A_{L,R} = \frac{-4\,U_{L,R}}{\lambda_{L,R} + \left[1 - \mu - \exp(-\lambda_{R,L}\,d)\right]/d - 4\,V_e(z'_{L,R})} - 1 \qquad (2.97)$$

eta

$$B_{L,R} = \frac{(A_{L,R}+1)^2}{A_{L,R}} \frac{\lambda_{L,R}^2/2 - \left[1-\mu-(1+\lambda_{R,L}\,d)\exp(-\lambda_{R,L}\,d)\right]/d^2 \pm 4\,V_e'(z'_{L,R})}{-4\,U_{L,R}}, \quad (2.98)$$

non "±" delakoak B_L lortzeko "+" adierazten duen, eta B_R lortzeko, "-", eta $z'_{L,R}$ direlakoak (2.78) eta (2.79) adierazpenetakoak diren.

2.29 irudian (2.95) potentzial-langa adierazten da, $\lambda_L = 1.0a_0^{-1}$, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$, $\mu = 1.0$, $z_L = z_R = 0$, $\Phi_L = 5.2$eV, $\Phi_R = 4.4$eV, $U_L = -13.2$eV, $U_R = -9.9$eV, $V_a = 15$V, $s = 30$Å eta R=150Å izanik, punta negatiboa zein positiboa denean, bi gainazal launen arteko (2.73) potentzial-langarekin batera.



2.29 irudia. (2.96) adierazpeneko potentzial-langa, punta elektrodo negatiboa deneko kasuan zein elektrodo positiboa denekoan, erradioa 150Å-etakoa izanik. Lerro jarraiak bi gainazal launen arteko (2.73) potentzial-langa adierazten du. $V_a = 15$V eta $s = 30$Å.

Tentsio handitarako tunel-espazioaldea elektrodo positibotik urrundu egiten denez gero, puntaren kurbaduraren korronte-dentsitatearen gaineko eragina, punta negatiboa denean handiagoa izango da punta positiboa denean baino.

Ondoren, bi elektrodoen arteko gainazal ekipotentzialak eta eremu-lerroak kalkulaturik, tunel-azalera eraginkorra lor dezakegu, (2.92) adierazpenaren bidez. Tunel-korrontea, orduan, $\theta = 0$ lerroan barrena kalkulaturiko korronte-dentsitatearen eta azalera eraginkorraren arteko

biderkaduraz lor daiteke, eta berau elektrodoen arteko separazio ezberdinetarako kalkulatuz, tunel-korrontea konstante egiten duen separazioa aurki daiteke, bai eta s-V_a ezaugarriak ere. Azkenik, konduktantzia-tentsioa direlako ezaugarriak ere aurki daitezke, tunel-korrontea konstante egiten duen $s(V_a)$ lerroan barrena, tentsioaren balio bakoitzeko korronte-dentsitatea eta azalera eraginkorra, biak, goian azaldu den erara kalkulatuz.

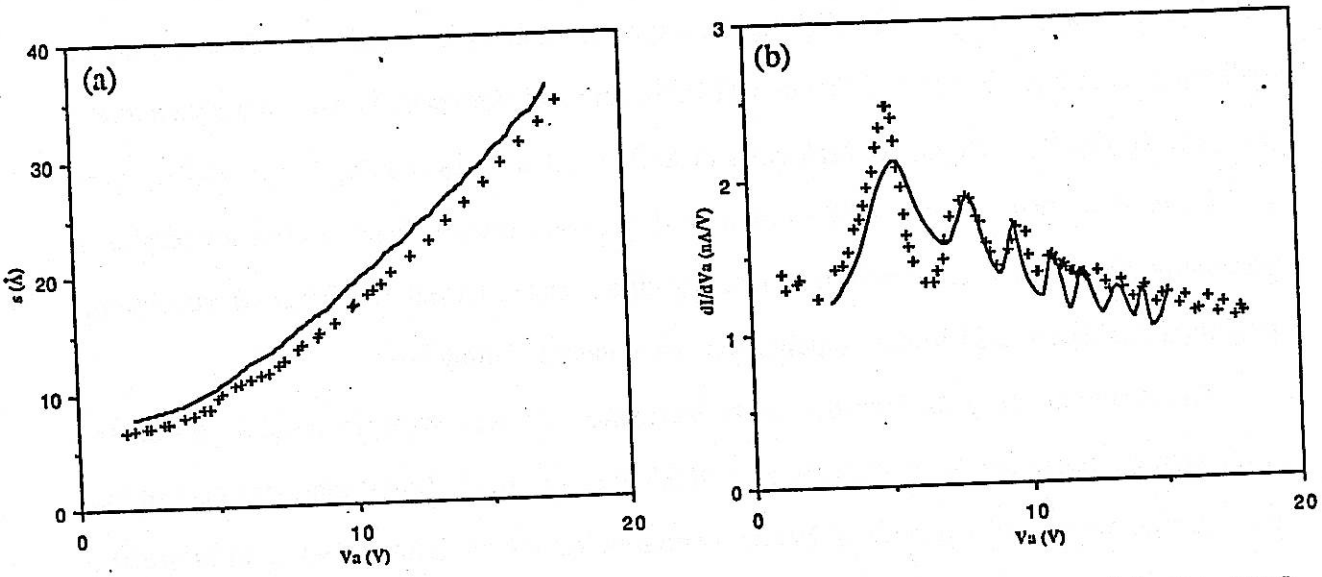
Tunel-korrontea 1nA-etakoa egiten duten tunel-ezaugarriak puntaren erradioaren balio ezberdinetarako kalkulatu ditugu, eta 150Å-etako erradioaren kasuan lortu dugun kurba teorikoa oso ongi doitzen da $s(V_a)$ kurba experimentalarekin, eredu unidimentsionalaz baliaturik lorturikoa ez bezala. 2.30 eta 2.31 irudietan tunel-korrontea 1nA-etakoa egiten duten s-V_a eta dI/dV_a-V_a ezaugarriak erakusten dira, $\lambda_L = 1.0a_0^{-1}$, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$, $z_L = -0.8$Å, $z_R = -0.2$Å eta $R = 150$Å izanik, 2.19 irudiko irudi-planoen arteko distantziaren arauerako μ parametro dinamikoa kontsideraturik, punta negatiboa deneko kasuan (2.30 irudia) nahiz punta positiboa denekoan (2.31 irudia), emaitza experimentalekin batera[24,83].

Elektrodoen bi polarizazioetarako lorturiko emaitza experimentalak doitzeak, irudi-planoen posizioen koordenatuak $z_L = -0.8$Å eta $z_R = -0.2$Å direla onartzera garamatza. Hau, tungstenoak zein urreak d banda izatearen ondorioa izan daiteke, induzituriko elektroi-dentsitatearen masa-zentrua solidoan barrurago egongo bait da, d bandaren eraginez, gel ereduarena baino.

2.30a irudiko kurba teorikoaren eta experimentalaren arteko desplazamendu konstanteak ez gaitu kezkatu behar, elektrodoen arteko hasierako separazioa zehaztasunez ezin neur bait daiteke. Emaitza hauek, bestalde, $s(V_a)$ kurba experimentalaren eboluzioa interpretatzeko atal honetan azterturiko efektu tridimentsionalak kontsideratzea beharrezkoa dela erakusten dute, hala eginez gero puntaren kurbadura-erradioaren berri jaso dezakegularik.

dI/dV_a-V_a ezaugarriak ere bat datoz emaitza experimentalekin, puntaren kurbadura-erradioa 150Å-etakoa dela kontsideratuz gero, punta negatiboa denean bereziki, lehen oszilazio experimentala zorrotzagoa bada ere. Gure emaitzen eta emaitza experimentalen arteko ezberdintasun hau, gure eredu teorikoan kontsideratu ez dugun elektrodoen barrualderanzko lasaipenaren ondorioa izan daiteke, aurreko atalean azaldu dugun bezala. Tentsio handitarako, bestalde, punta negatiboaren kasuan oszilazio teorikoen posizioak

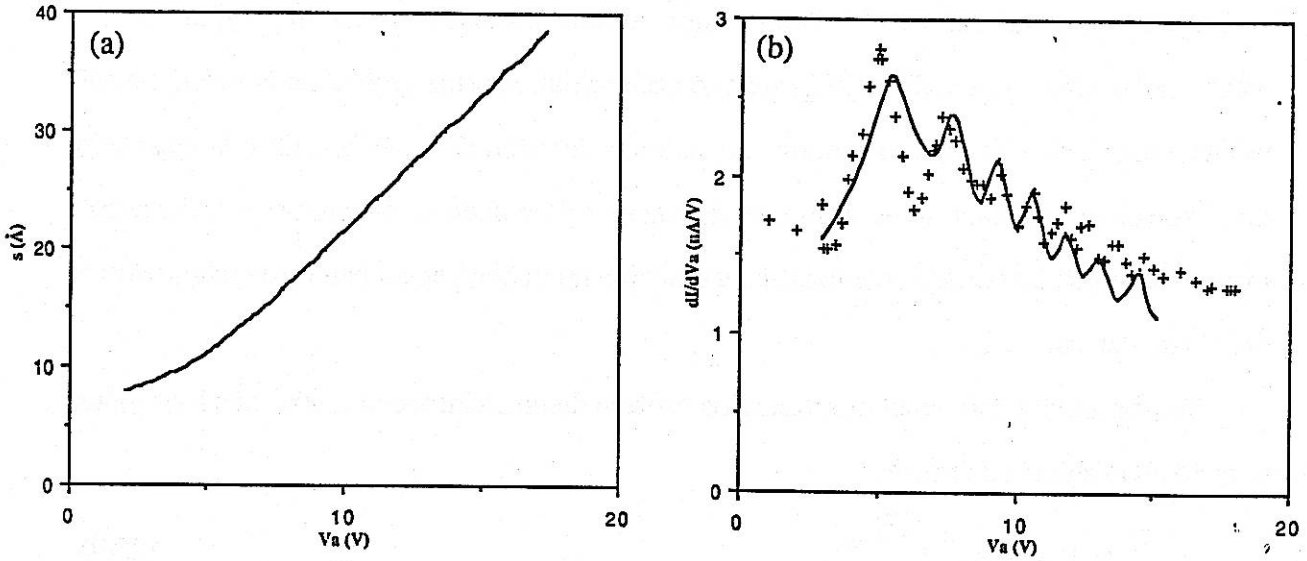
oszilazio experimentalenekin bat datoz, eredu unidimentsionalaz baliaturik lorturikoenak ez bezala, eta $dI/dV_a(V_a)$ kurba teorikoa ez da baxuagoa kurba experimentala baino, efektu tridimentsionalak berriro agerian jartzen direlarik. Oszilazio experimentalak, ordea, ez dira, tentsio handitarako, oszilazio teorikoak bezain zorrotzak; hau puntaren laztasunaren ondorioa izan daiteke[28], tentsio handitarako puntaren uhin elektronikoen arteko interferentziak sorteraz bait daitezke.



2.30 irudia. Tunel-korrontea 1nA-takoa egiten duten tunel-ezaugarriak, *puntako* elektroiek (2.96) potentzial-langa zeharkatzen dutenean, irudi-planoen arteko distantziarekin aldatzen den 2.19 irudiko μ parametro dinamikoa kontsideraturik eta puntaren erradioa 150Å-etakoa dela emanik; $\lambda_L = 1.0a_0^{-1}$, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$, z_L = -0.8Å, z_R = -0.2Å. 24 erreferentzian lorturiko emaitza experimentalak ere erakusten dira, gurutzeren bidez.

Punta positiboa denean, aldiz, ezin gerta daitezke, tentsio handitarako, puntaren uhin elektronikoen arteko interferentziak, tunel-espazioaldea elektrodo positibotik urrun bait dago; izan ere, kasu honetan neurturiko tentsio handiko oszilazio experimentalak alderantzizko polarizazioarekin lorturikoak baino zorrotzagoak dira. Alabaina, punta positiboa denean, $dI/dV_a(V_a)$ kurba teorikoa kurba experimentala baino baxuagoa da, tentsio handitarako, eta elkarren ondoko oszilazioen arteko distantziak handixeagoak dira, tunel-korrontea konstante egiten duten elektrodoen arteko separazioak separazio experimentalak baino txikiagoak direla erakutsiz. Tentsio handitarako, polarizazio honekin lorturiko $dI/dV_a(V_a)$ kurba experimentala hobeto egokituko litzateke puntaren erradio handiagoa kontsideratuz gero, eta honek aztertzen

ari garen aurkako polarizazioko experimentuetan puntaren kurbadura ezberdina delako ondorioa ateratzera eraman gaitzake.



2.31 irudia. Tunel-korrontea 1nA-takoa egiten duten tunel-ezaugarriak, *lagineko* elektroiek (2.96) potentzial-langa zeharkatzen dutenean, irudi-planoen arteko distantziarekin aldatzen den 2.19 irudiko μ parametro dinamikoa kontsideraturik eta puntaren erradioa 150Å-etakoa dela emanik; $\lambda_L = 1.1a_0^{-1}$, $\lambda_R = 1.3a_0^{-1}$, $z_L = -0.8$Å, $z_R = -0.2$Å. Polarizazio honekin dI/dV_a-V_a ezaugarri experimentalak baino ez ditugu[83], eta berauek soilik erakusten ditugu, beraz.

Laburbilduz, beraz, (2.73) potentzial-eredu parametrizatua erabilirik metalezko bi elektrodoren arteko hutseango potentzial-langaren berri jaso daiteke, bai eta metalezko gainazal bakar baten potentzialarena ere, tunel mikroskopioaz baliaturik lorturiko tunel-korronte konstantedun s-V_a eta dI/dV_a-V_a ezaugarriak teorikoki kalkulaturikoekin konparatuz gero. Bestalde, efektu tridimentsionalak kontsideratzearen beharrizana agerian jarri da, puntaren erradioaren balioaren berri ere jaso daitekeelarik.

2.6. Itxurazko potentzial-langa

Aurreko bi ataletan, tunel mikroskopioa hutseango potentzial-langak neurtzeko erabilgarria suerta daitekeela ikusi dugu, tunel-korrontea konstante egiten duten eremu-emisiozko s-V_a eta dI/dV_a-V_a direlako ezaugarriak neurtuz gero. Atal honetan, tentsio txikitarako ($V_a << 1$V) eginiko experimentuak kontsideratzen ditugu[21,22], tentsio konstanteko tunel-korrontearen nahiz tunel-korrontea konstante egiten duen tentsioaren separazioarekiko menpekotasunak hutseango potentzial-langaren altueraren berri eman bait diezaguke, tentsioa oso txikia denean.

Tentsio txikitarako, tunel mikroskopioa osotzen duten elektrodoen arteko tunel-korrontea ondoko erara adieraz daiteke[42]:

$$I = V_a\, k(s)\, e^{-2\sqrt{2\bar{\Phi}}\, s} \quad , \tag{2.99}$$

non V_a delakoa bi elektrodoen artean sorterazitako potentzial-diferentzia den, tentsioa alegia, s, elektrodoen arteko separazioa, $\bar{\Phi}$, batezbesteko potentzial-langa, eta $k(s)$, s-ren funtzioa. Itxurazko potentzial-langa, bada, era honetara definitu ohi da, V_a txikia denean ($V_a << 1$V):

$$\Phi_{ap} = \frac{1}{8}\left[d(\ln I)/ds \right]^2_{V_a} \tag{2.100}$$

edo

$$\Phi_{ap} = \frac{1}{8}\left[d(\ln V_a)/ds \right]^2_{I} \quad , \tag{2.101}$$

berau batezbesteko potentzial-langarekin bat etorriko bait litzateke, (2.99) berdintzaren bigarren ataleko biderkagai pre-exponentzialaren nahiz batezbesteko langaren separazioarekiko menpekotasuna arbuiatuz gero.

Diogun, bestalde, (2.100) zein (2.101) adierazpenetako bigarren atalak berdinak direla[84], ondoko berdintza betetzen bait da:

$$\frac{\left[d(\ln I)/ds \right]_{V_a}}{\left[d(\ln V_a)/ds \right]_{I}} = -\frac{\left[dI/dV_a \right]_s}{I/V_a} \quad , \tag{2.102}$$

V_a oso txikia deneko limitean.

Ezaguna da, bestalde, aurreko ataletan ikusi dugun legez, irudi-potentzialak zein trukatze-koerlazio efektu lokalek hutseango potentzial-langa beheratu egiten dutela, elektrodoen arteko separazio txikitarako bereziki. Tunel mikroskopioaz neurturiko itxurazko potentzial-langa, ordea, elektrodoen batezbesteko lan-funtzioaren berdintsua da, eta gutxi aldatzen da separazioarekin oso txikiak ez diren separazioetarako[11,21] ($s > 6$Å), irudi-potentzialaren eraginik ez bait legoen.

Emaitza experimentalak interpretatu nahian, hutseango potentzial-langak irudi-potentzialaren eraginez jasaten duen k/s erako beherapenak itxurazko potentzial-langaren neurketan eragiten ez duela erakutsi dute Binnig-ek, García-k, Rohrer-ek, Soler-ek eta Flores-ek[21], bai eta Coombs-ek, Welland-ek eta Pethica-k ere[84], era honetako neurketetan irudi-potentzialaren eraginik ez dagoela ondorioztatuz. Lang[81], irudi-potentzialaren eraginik eza argudiatuz, dentsitate lokaleko hurbilketaz baliatu da itxurazko potentzial-langaren kalkulu teorikoa burutzeko; separazio handitarako lortzen duen itxurazko potentzial-langa, ordea, elektrodoen lan-funtzioa baino handiagoa da, experimentuek erakusten dutenaren aurka. Payne-k eta Inkson-ek[85], bestalde, tentsio konstanteko (2.100) itxurazko potentzial-langaren gaineko irudi-potentzialaren eraginik ez dagoela eta tunel-korronte konstanteko (2.101) itxurazko potentzial-langaren gainean, berriz, eragina badagoela ondorioztatzen dute, zenbait kalkulu teoriko burutu ondoren, (2.102) delako berdintza beteko ez bait litzen.

Atal honetan, irudi-potentzialak itxurazko potentzial-langaren gaineko eragina baduela erakusten da, eta itxurazko potentzial-langa kalkulatzen da, elektrodoen arteko separazioaren funtzioan, hutseango potentzial-langaren eredu ezberdinetarako. Honetarako, metalezko elektrodo laun eta paraleloak kontsideratzen ditugu, lan-funtzioen eta Fermi-ren energien ondoko balioetarako: $\Phi_L = \Phi_R = 4.8$eV, $E_{FL} = 8.0$eV eta $E_{FR} = 5.5$eV.

Ideia orokorrak

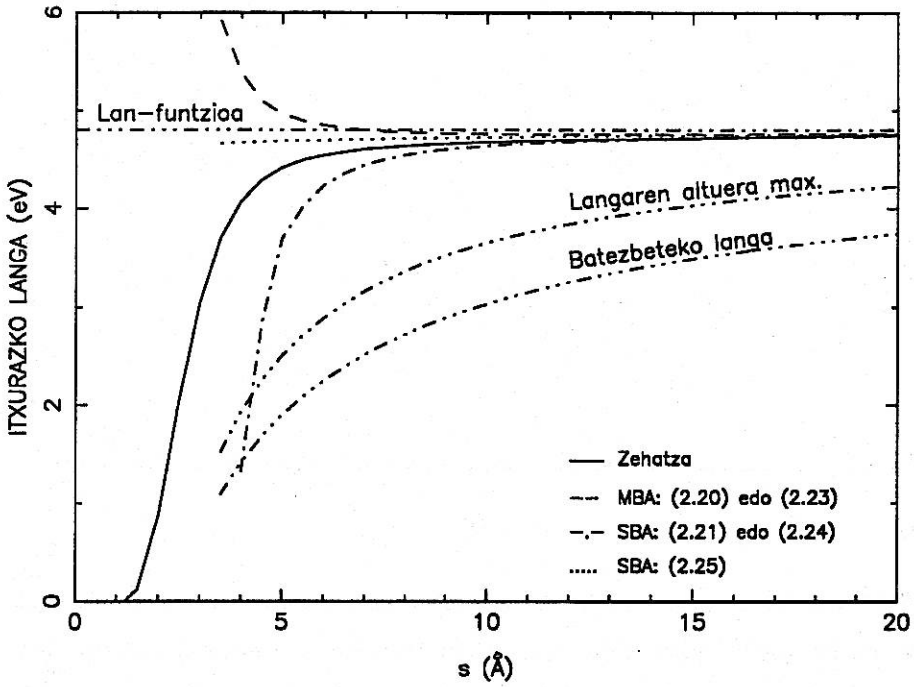
Itxurazko potentzial-langak kalkulatzeko orduan korronte-dentsitateak aurkitzeko erabili ohi diren hurbilketek duten baliagarritasun-maila argitzeko asmoz, (2.66) irudi-potentzialak

beheraturiko (2.67) hutseango potentzial-langa kontsideratu dugu, tentsioa oso txikia deneko kasuan ($V_a << 1V$), eta hutseango potentzial-langa hau zeharkatzen duen korronte-dentsitatea kalkulatu dugu, elektrodoen arteko separazioaren funtzioan, Schrödinger-en ekuazioa numerikoki askaturik lorturiko transmisio-probabilitateak (2.9) adierazpenera eramanez, bai eta WKB hurbilketaren baitango batezbesteko langaren hurbilketa, MBA, zein Simmons-en batezbesteko langaren hurbilketa, SBA, erabiliz. Fermi-ren elektroien (2.10) adierazpeneko transmisio-probabilitateak txikiagoak dira, tentsio txikitarako, Schrödinger-en ekuazioa askaturik lorturikoak baino[51]; (2.10) adierazpena (2.9)-ra eramanez lortzen den WKB korronte-dentsitatearen separazioarekiko menpekotasuna, aldiz, korronte-dentsitate zehatzaren menpekotasunaren berdintsua da. Alabaina, MBA hurbilketan lorturiko (2.23) korronte-dentsitatea handiegia da oso separazio txikitarako ($s < 10$Å), alde batetik, eta bestetik, SBA hurbilketan lorturiko (2.24) eta (2.25) korronte-dentsitateek separazioarekiko menpekotasun ezberdina erakusten dute separazio txikitarako ($s < 20$Å): (2.24) txikiegia den bitartean, (2.25) handiegia da.

Ondorioz, (2.23), (2.24) eta (2.25) adierazpenak (2.100)-ra eramanez kalkulaturiko itxurazko potentzial-langak ez datoz bat, separazio txikitarako, Schrödinger-en ekuazioa askaturik lorturiko korronte-dentsitatea (2.100)-ra eramanez kalkulaturiko itxurazko potentzial-langarekin, 2.32 irudian erakusten den bezala. Elektrodoen arteko separazio handitarako ($s > 10$Å), ostera, emaitza berdintsuak lortzen dira: itxurazko potentzial-langa oso gutxi aldatzen da separazioarekin, eta lan-funtzioen berdintsua da, experientziak erakusten duen erara[21,22], potentzial-langaren altuera nahiz batezbestekoa txikiagoak izanagatik. Diogun, bestalde, korronte-dentsitatea kalkulatzeko (2.20) zein (2.23) adierazpenak erabiliz itxurazko potentzial-langaren balio berdina lortzen dela, espero zitekeen bezala, bai eta (2.21) zein (2.24) direlakoak erabiliz ere. Tentsio txikitarako, bestalde, (2.26) adierazpenaren bidez lorturiko potentzial-langa eraginkorra batezbesteko potentzial-langaren berdintsua dela aurkitzen da.

Payne-k eta Inkson-ek (2.21) hurbilketa erabili dute korronte-dentsitatea kalkulatzeko, (2.68) irudi-potentziala, hots, Simmons-en irudi-potentziala kontsideraturik. Diogun, (2.21) adierazpenaren bidez kalkulaturiko korronte-dentsitatea (2.100) adierazpenera eremanez gero, 2.32 irudian zatika eta puntuka adierazten den itxurazko potentzial-langa lortzen dela,

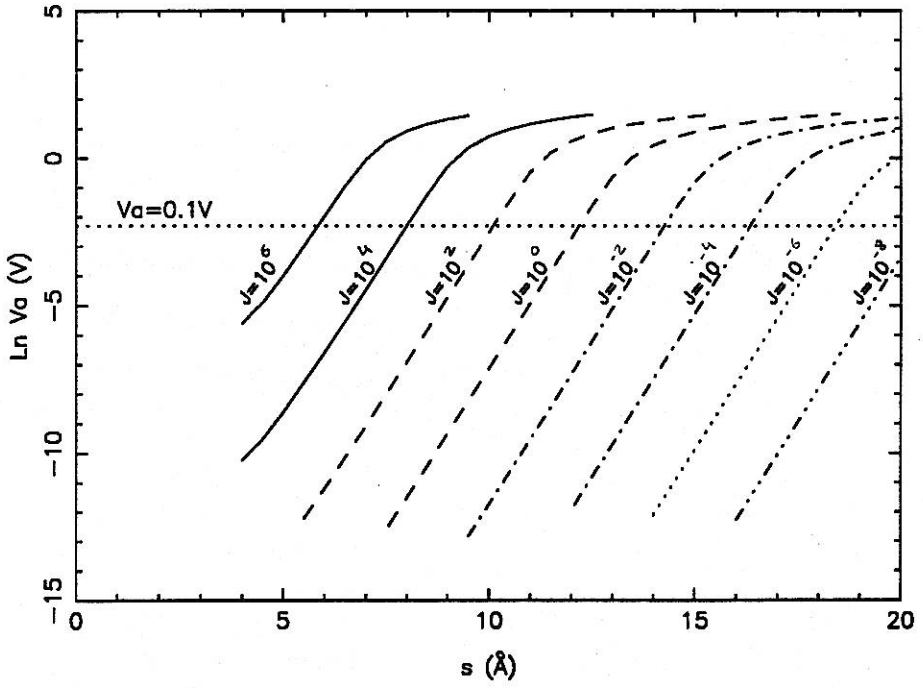
separazioaren funtzioan.



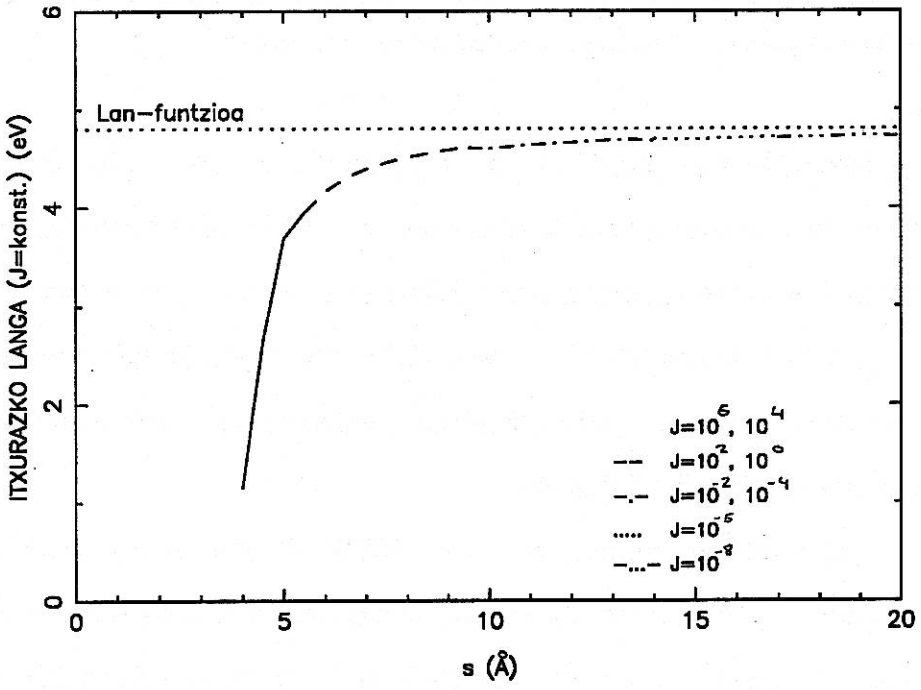
2.32 irudia. Itxurazko potentzial-langa, separazioaren funtzioan, Simmons-en irudi-potentzialak beheraturiko (2.67) potentzial-langaren kasuan, korronte-dentsitatea kalkulatzeko Schrödinger-en ekuazioa askatzen denean nahiz WKB hurbilketaren baitango (2.23), (2.24) eta (2.25) adierazpenak erabiltzen direnean. Lan-funtzioa, potentzial-langaren altuera maximoa eta langaren batezbestekoa ere erakusten dira.

Itxurazko potentzial-langa, bestalde, korronte-dentsitatea konstante egiten duen tentsioa (2.101) adierazpenera eramanez ere lor daiteke, tentsioa oso txikia den bitartean; separazioa handiagotu egiten den neurrian, beraz, beharrezkoa dugu korronte-dentsitate txikiagoak kontsideratzea, $V_a << 1V$ izan dadin. 2.33 irudian, (2.21) adierazpeneko korronte-dentsitatea konstante egiten duen tentsioaren logaritmo nepertarra erakusten da, separazioaren funtzioan, korronte-dentsitatearen balio ezberdinetarako.

Itxurazko potentzial-langa, korronte-dentsitatea $10^6 A/cm^2$-takoa egiten duen $V_a(s)$ kurba deribatuz lor daiteke, $s \lesssim 6Å$ denean, eta korronte-dentsitatea txikiagoa egiten duten $V_a(s)$ kurbak deribatuz, separazio handiagotarako; honela lorturiko emaitzak 2.34 irudian erakusten dira, separazioaren funtzioan, non itxurazko potentzial-langa 2.33 irudiko zein kurba deribatuz kalkulatu den adierazten bait da.



2.33 irudia. Simmons-en irudi-potentzialak beheraturiko hutseango potentzial-langan zeharreko korronte-dentsitatea konstante egiten duen tentsioaren logaritmo nepertarra, separazioaren funtzioan, korronte-dentsitatea kalkulatzeko (2.21) edo (2.24) erabilirik eta korronte-dentsitatearen zenbait baliotarako, berauek A/cm^2-tako unitateetan neurturik. Puntukako lerro horizontalak 0.1V-tako tentsioa adierazten du.



2.34 irudia. 2.33 irudiko lerro horizontalaren azpiko kurbak deribatuz lorturiko itxurazko potentzial-langa, separazioaren funtzioan. Lerro-mota bakoitzak 2.33 irudiko zein kurba deribatuz lortu den adierazten du.

(2.100) nahiz (2.101) adierazpenen bidez kalkulaturiko itxurazko potentzial-langak

berdinak dira, beraz, eta biak txikiagotzen dira, korronte-dentsitatea kalkulatzeko (2.21) adierazpena erabiliz gero, 2.34 irudiko kurbak erakusten duen erara, separazioa txikiagotzean. Payne-k eta Inkson-ek, ordea, (2.100) itxurazko potentzial-langa lan-funtzioen berdintsua dela ondorioztatzen dute, alde batetik, tentsio konstanteko $J(s)$ direlako kurbak separazio handitarako ($s \geq 7$Å) soilik kontsideratu dituztelako, eta bestetik, (2.101) itxurazko potentzial-langa txikiagoa delako ondorioa ateratzen dute, korronte-dentsitatea 1A/cm^2-takoa baino handiagoa edo berdina egiten duten $V_a(s)$ kurbak soilik deribatu dituztelako, itxuraz (2.102) berdintzarekin bateragarria ez den emaitza lortuz.

Coombs-ek, Welland-ek eta Pethica-k, bestalde, Simmons-en irudi-potentziala kontsideraturik kalkulatu duten itxurazko potentzial-langa ez da txikiagotzen, separazioa txikiagotzean, 2.32 irudiko zatikako kurbak zein 2.34 irudiko kurbak erakusten duten modura, korronte-dentsitatea kalkulatzeko (2.25) hurbilketa erabili dutelako. Izan ere, 2.32 irudian puntuka adierazitako kurba lortzen dute.

Itxurazko potentzial-langa separazio handitarako langaren altuera baino handiagoa izatearen zergatikoa azaltzeko asmoz, batezbesteko langaren hurbilketa (MBA) egiten dugu lehenengo, korronte-dentsitateak kalkulatzeko orduan, horrela eginez lorturiko emaitzak separazio handiko heinean ($s \gtrsim 10$Å) egokiak bait dira, 2.32 irudian erakutsi den bezala.

Separazio handiko heina: Batezbesteko langaren hurbilketa

(2.23) adierazpena (2.100) delakora eramanez gero, hauxe aurkitzen dugu:

$$\Phi_{ap} = \left\{ -(\bar{\Phi}^{1/2}\Delta s)\left[1+\frac{1}{\alpha\bar{\Phi}^{1/2}\Delta s\,(1+\alpha\bar{\Phi}^{1/2}\Delta s)}\right]-\frac{\Delta s'}{\alpha\Delta s}+\frac{\bar{\Phi}}{2\,\alpha\bar{\Phi}}\right\}^2, \quad (2.103)$$

non $\bar{\Phi}$ delakoa (2.18) adierazpeneko batezbesteko potentzial-langa den, Δs, $-\Phi_L$ energiadun elektroiek energia zinetiko nulua duteneko bi posizioen arteko distantzia, tunel-distantzia alegia, eta

$$\alpha = 2\sqrt{2}\ , \quad (2.104)$$

$\beta(-\Phi_L)$ delakoa unitatearen berdina dela emanik, tentsio txikitarako hala dela kontsideratzea hurbilketa ona bait da[45].

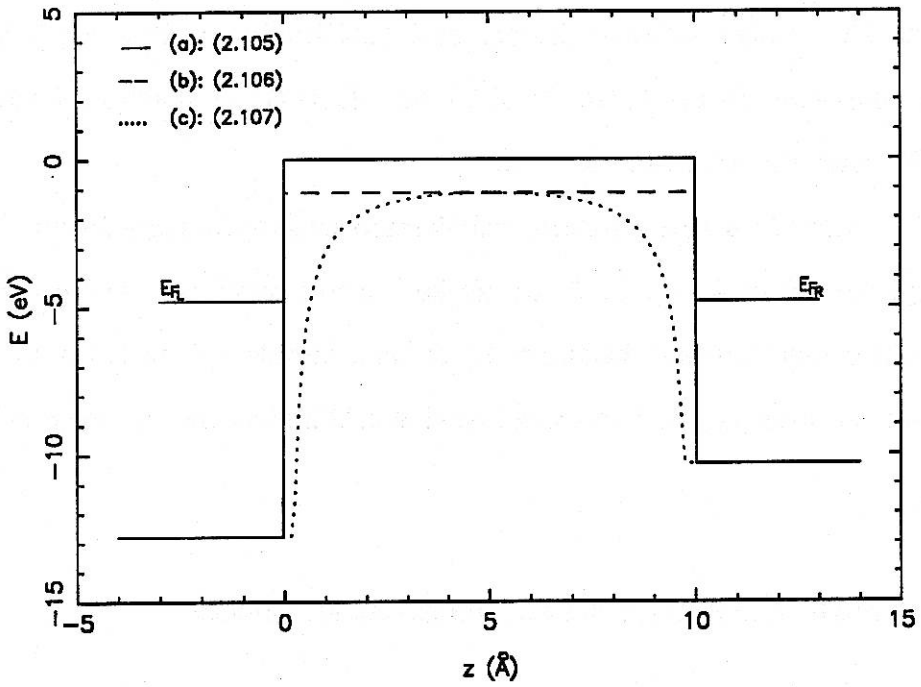
Ondoren, 2.35 irudian adierazitako bi elektrodoen arteko (2.67) potentzial-langa kontsideratuko dugu, tentsio txikiko limitean, irudi-potentzialaren ondoko hurbilketetarako:

$$\text{a) } V_{im}(z) = 0 \ , \tag{2.105}$$

$$\text{b) } V_{im}(z) = -\frac{C}{s} \tag{2.106}$$

eta

$$\text{c) } V_{im}(z) = -\frac{C\,s}{4\,z\,(s-z)} \ . \tag{2.107}$$



2.35 irudia. Potentzial-langa ereduak, tentsio txikiko limitean: (a) Irudi-potentzialik gabeko langa karratua, (b) langa karratu beheratua, eta (c) Simmons-en irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langa. Irudi honetan C = 1.15 ln2 aukeratu da, eta irudi-potentzialaren (2.107) hurbilketa Simmons-en irudi-potentziala da, beraz.

(a) kasuan, hots, elektrodoen arteko irudi-potentziala arbuiatzen denean, tunel-distantzia elektrodoen arteko separazioaren berdina da, eta batezbesteko potentzial-langa batezbesteko lan-funtzioarekin bat dator. Kasu honetan, beraz, hauxe dugu:

$$\Phi_{ap} = \left\{ \Phi_0^{1/2} \left[1 + \frac{1}{\alpha \Phi_0^{1/2} s \, (1 + \alpha \Phi_0^{1/2} s)} \right] + \frac{1}{\alpha s} \right\}^2 , \qquad (2.108)$$

non

$$\Phi_0 = \frac{\Phi_L + \Phi_R}{2} \qquad (2.109)$$

den, batezbesteko lan-funtzioa alegia. $s > 1/\Phi_0$ denean honela berridatz dezakegu (2.108):

$$\Phi_{ap} = \Phi_0 \left\{ 1 + 2 \alpha^{-1} \Phi_0^{1/2} (\Phi_0 s)^{-1} + O\left[(\Phi_0 s)^{-2} \right] \right\} , \qquad (2.110)$$

non $(\Phi_0 s)^{-1}$ ordenako gaia, (2.23) adierazpenaren bigarren ataleko biderkagai pre-exponentzialaren separazioarekiko menpekotasuna kontsideratzearen ondorioa den. Irudi-potentzialik gabeko hutseango potentzial-langa zeharkatzen duten elektroien itxurazko potentzial-langa, beraz, handiagoa da batezbesteko lan-funtzioa baino, oso handiak ez diren separazioetarako bereziki; izan ere, hala gertatzen da, zeren separazioa txikiagotzean energiaren E_z osagaia Fermi-ren energia baino txikiagoa duten elektroien ekarpena gero eta garrantzitsuagoa bilakatzen bait da.

(b) kasuan, hots, elektrodoen arteko hutseango puntu guztietan irudi-potentziala beraren balio maximoaren berdina dela kontsideraturik, tunel-distantzia separazioarekin bat dator, eta batezbesteko potentzial-langa ondokoa dugu, tentsio txikiko limitean:

$$\bar{\Phi} = \Phi_0 - \frac{C}{s} , \qquad (2.111)$$

non C delakoa konstante bat den, (2.65) irudi-potentzialaren kasuan ln 2 balio duena, (2.67) delakoaren kasuan, 1, eta (2.68) delakoarenean, 1.15 ln 2. Kasu honetan, bada, hauxe dugu:

$$\left(\bar{\Phi}^{1/2} \Delta s \right)' = \bar{\Phi}^{1/2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{C}{\bar{\Phi} s} \right) \qquad (2.112)$$

eta

$$\frac{\Delta s'}{\Delta s} - \frac{1}{2} \frac{\bar{\Phi}'}{\bar{\Phi}} = \frac{1}{s} - \frac{1}{2} \frac{C}{\bar{\Phi} s^2} . \qquad (2.113)$$

Orduan, (2.112) eta (2.113) direlakoak (2.103) adierazpenera eramanez, hauxe aurkitzen dugu:

$$\Phi_{ap} = \left\{ \bar{\Phi}^{1/2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{C}{\bar{\Phi} s} \right) \left[1 + \frac{1}{\alpha \bar{\Phi}^{1/2} s (1 + \alpha \bar{\Phi}^{1/2} s)} \right] + \frac{1}{\alpha s} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{C}{\bar{\Phi} s} \right) \right\}^2 , \quad (2.114)$$

non $\bar{\Phi}$ delakoa (2.111) adierazpenaren bidez lortzen den, separazioaren funtzioan.

Diogun, orain, $s > 1/\Phi_0$ denean (2.114) itxurazko potentzial-langa (2.110) delakora laburbiltzen dela, irudi-potentzialik gabeko potentzial-langaren kasuan bezalaxe, ondoko berdintza betetzen bait da:

$$\bar{\Phi}^{1/2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{C}{\bar{\Phi} s} \right) = \Phi_0^{1/2} \left\{ 1 + O\left[(\Phi_0 s)^{-2} \right] \right\} . \quad (2.115)$$

Hau da, potentzial-langa separazioarekin batera txikiagotzen denean, tunel-korrontea arinago areagotzen da elektrodoen arteko separazioa txikiagoa egitean, potentzial-langa konstantea denean baino, eta honen eraginez, neurturiko itxurazko potentzial-langa handiagoa izango da langaren batezbesteko balioa baino; izan ere, itxurazko potentzial-langaren handipen hau batezbesteko potentzial-langak jasaten duen beherapenaren berdina da, balio absolutuz, $(\Phi_0 s)^{-2}$ ordenako eta ordena altuagoko gaiak arbuiatuz gero. Beraz, hutseango potentzial-langak jasaten duen k/s erako beherapenak ez du eragiten itxurazko potentzial-langaren neurketan, oso txikiak ez diren separazioetarako behinik behin. Alabaina, irudi-potentzialaren itxurazko potentzial-langaren neurketaren gaineko eraginik ez dagoela ezin ondoriozta daiteke , ondoren ikusiko den bezala.

(c) kasuan, hots, bi elektrodoen arteko espazioaldean posizioarekin aldatzen den irudi-potentziala kontsideratzen denean, tunel-distantzia ez da separazioaren berdina izango, alde batetik, eta batezbesteko langa honela adieraz daiteke, bestetik:

$$\bar{\Phi} = \Phi_0 - \frac{f(s)}{\Delta s} , \quad (2.116)$$

non

$$f(s) = -\frac{C s}{4} \int_{s_1}^{s_2} \frac{dz}{z (s - z)} \quad (2.117)$$

den. (2.116) adierazpena, bada, (2.103)-ra eramanez, hauxe aurkitzen dugu:

$$\Phi_{ap} = \left\{ \bar{\Phi}^{1/2} \left(\Delta s' + \frac{1}{2} \frac{f(s)}{\bar{\Phi} \Delta s} \Delta s' - \frac{1}{2} \frac{f'(s)}{\bar{\Phi}} \right) \left[1 + \frac{1}{\alpha \bar{\Phi}^{1/2} \Delta s \, (1 + \alpha \bar{\Phi}^{1/2} \Delta s)} \right] \right.$$

$$\left. + \frac{1}{\alpha \Delta s} \left(\Delta s' + \frac{1}{2} \frac{f(s)}{\bar{\Phi} \Delta s} \Delta s' - \frac{1}{2} \frac{f'(s)}{\bar{\Phi}} \right) \right\}^2 , \qquad (2.118)$$

eta adierazpen hau ez da (2.107) adierazpenera laburbiltzen, $s > 1/\Phi_0$ denean, $f'(s)$ delako funtzioak $(\Phi_0 \, s)^{-1}$ ordenako gai ez-nulurik duen bitartean, kasu honetan ondokoa betetzen bait da:

$$\bar{\Phi}^{1/2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{C}{\bar{\Phi} s} \right) = \Phi_0^{1/2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \Phi_0^{-1/2} f'(s) + O\left[(\Phi_0 \, s)^{-2} \right] \right\} .$$

Izan ere, (2.117) adierazpenaren bigarren ataleko integrala burutu eta zenbait eragiketa egin ondoren hauxe aurkitzen dugu, tentsioa oso txikia deneko limitean:

$$f(s) = \frac{C}{2} \ln \frac{s + \Delta s}{s - \Delta s} , \qquad (2.119)$$

non

$$\Delta s = s \left(1 - \frac{C}{\Phi_0 \, s} \right)^{1/2} \qquad (2.120)$$

den. Behin (2.120) adierazpena (2.119)-ra eraman eta deribatuz gero, bestalde, hauxe dugu:

$$f'(s) = \frac{C/2}{\Delta s} , \qquad (2.121)$$

eta (2.120) deribatuz:

$$\Delta s' = \frac{s - C \, \Phi_0^{-1}/2}{\Delta s} . \qquad (2.122)$$

Horrelatan, bada, (2.116), (2.121) eta (2.122) direlakoak (2.103)-ra eramanez, honelaxe idatz dezakegu itxurazko potentzial-langa:

$$\Phi_{ap} = \left\{ \bar{\Phi}^{1/2} \left(\frac{\bar{\Phi} + \Phi_0}{2\bar{\Phi}} \frac{s - C\,\Phi_0^{-1}/2}{\Delta s} - \frac{C/4}{\bar{\Phi}\Delta s} \right) \left[1 + \frac{1}{\alpha \bar{\Phi}^{1/2} \Delta s\,(1 + \alpha \bar{\Phi}^{1/2} \Delta s)} \right] \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\alpha \Delta s} \left(\frac{\Phi_0 - 3\bar{\Phi}}{2\bar{\Phi}} \frac{s - C\,\Phi_0^{-1}/2}{\Delta s} - \frac{C/4}{\bar{\Phi}\Delta s} \right) \right\}^2 , \qquad (2.123)$$

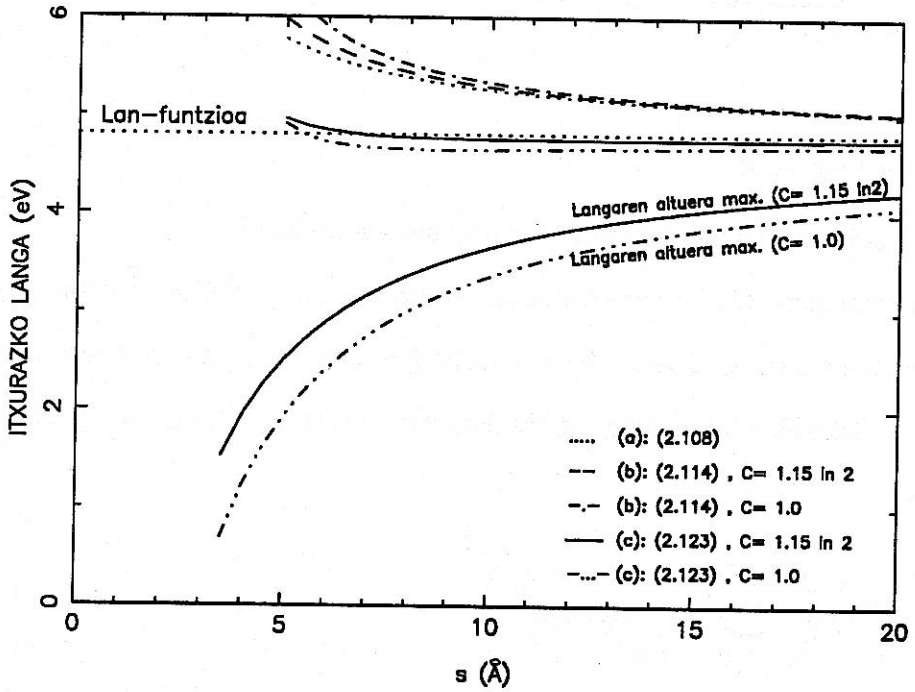
non Φ delakoa (2.116) adierazpenaren bidez lor daitekeen, separazioaren funtzioan. $s > 1/\Phi_0$ denean, bestalde, honela berridatz daiteke (2.123) adierazpena[31]:

$$\Phi_{ap} = \Phi_0 \left\{ 1 - \left(C/2 - 2\,\alpha^{-1}\,\Phi_0^{1/2} \right) (\Phi_0\, s)^{-1} + O\left[(\Phi_0\, s)^{-2} \right] \right\} . \qquad (2.124)$$

Hau da, (2.107) irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langa zeharkatzen duen tunel-korrontea ez da handiagotzen separazioa txikiagotzean, (2.106) irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langa zeharkatzen duen tunel-korrontea bezain azkar, (2.107) irudi-potentzialaren kasuan betezbesteko potentzial-langa astiroago txikiagotzen bait da, (2.121) adierazpenak erakusten duen legez. Honen ondorioz, beraz, posizioarekin aldatzen den (2.107) irudi-potentzialaren kasuan itxurazko potentzial-langa txikiagoa bilakatzen da, hutseango puntu guztietan berdina den (2.106) irudi-potentzialaren kasuan baino, edozein kasutan batezbesteko potentzial-langa baino handiagoa izan arren. Izan ere, (2.23) adierazpenaren bigarren ataleko biderkagai pre-exponentzialaren separazioarekiko menpekotasuna kontsideratzearen eta posizioarekin aldatzen den irudi-potentziala kontsideratzearen ondorioz azaltzen diren $(\Phi_0\, s)^{-1}$ ordenako gaiak aurkakoak dira zeinuz eta oso berdintsuak dira balio absolutuz, ohizko lan-funtzioetarako: $\Phi_0 = 4.8$eV deneko kasuan itxurazko potentzial-langa lan-funtzioaren berdina izango litzateke, bigarren ordenako eta ordena altuagoko gaiak arbuiatuz gero, $C = 0.59$ denean; (2.65), (2.67) eta (2.68) irudi potentzialen kasuan, beraz, itxurazko potentzial-langa lan-funtzioa baino txikixeagoa izango da, oso txikiak ez diren separazioetarako, lan-funtzioa baino, experientziak erakusten duen bezala.

2.36 irudian (2.108) adierazpeneko itxurazko potentzial-langa adierazten da, elektrodoen arteko separazioaren funtzioan, (2.114) eta (2.123) adierazpenetakoekin batera, C

konstantearen bi baliotarako: $C = 1.15 \ln 2$ eta $C = 1.0$. Posizioarekin aldatzen den (2.107) irudi-potentzialari dagokion itxurazko potentzial-langak, (2.106) potentzial-langa karratu beheratuari dagokionak ez bezala, badu separazio handitarako langaren altuerarekiko menpekotasun nabaria, (2.124) adierazpenak ere erakusten duen erara. Horrelatan, bada, itxurazko potentzial-langaren neurketa experimentalak, elektroiek hutsean jasaten duten potentzial eraginkorraren berri eman diezagukete. 2.36 irudiak, bestalde, posizioarekin aldatzen den irudi-potentzialak itxurazko potentzial-langaren neurketaren gainean eragina baduela erakusten du, goian azaldu den bezala.



2.36 irudia. 2.35 irudiko (a), (b) eta (c) potentzial-ereduei dagozkien (2.108), (2.114) eta (2.123) itxurazko potentzial-langak, separazioaren funtzioan, C = 1.15 ln2 zein C = 1 .0 denean. Potentzial-langen altuerak ere erakusten dira, C = 1.15 ln2 zein C =1 .0 denean

Separazio txikiko heina: kalkulu zehatza

Itxurazko potentzial-langa elektrodoen arteko separazio txikitarako ($s < 10$Å) kalkulatu nahi izanez gero, beharrezkoa dugu elektroiek hutseango potentzial-langa zeharkatzeko duten transmisio- probabilitatearen kalkulu zehatza burutzea, Schrödinger-en ekuazioa askaturik.

(2.105) zein (2.106) irudi-potentzialek beheraturiko potentzial-langa karratuaren eraginpeko elektroiaren Schrödinger-en ekuazioaren soluzioak diren uhin launak nahiz beraien deribatuak $z = 0$ eta $z = s$ direneko puntuetan loteraziz, ondoko adierazpena lortzen da transmisio- probabilitaterako:

$$D = \frac{4\, k_L\, k_R\, k^2}{k^2\,(k_L + k_R)^2 + \left[k^2\,(k^2 + k_L^2 + k_R^2) + k_L^2\, k_R^2\right] \sinh^2(k\, s)} \quad , \tag{2.125}$$

non

$$k_L = \sqrt{2\,(E - U_L)} \quad , \tag{2.126}$$

$$k_R = \sqrt{2\,(E - U_R)} \tag{2.127}$$

eta

$$k = \sqrt{2\,(-E - C/s)} \tag{2.128}$$

diren, (2.105) irudi-potentzialaren kasuan C konstantea zero izanik.

(2.125) adierazpena (2.9)-ra eramanez eta lorturiko emaitza (2.100)-ra eramanez, beraz, potentzial-langaren balioa lor daiteke. Bereziki, energiaren E_z osagaia Fermi-ren energia baino txikiagoa duten elektroien transmisio-probabilitateak arbuiatuz gero, hauxe genuke itxurazko potentzial-langa:

$$\Phi_{ap} = \frac{1}{8}\left(\frac{\partial \ln D_0}{\partial s} + \frac{C}{k_0\, s^2}\frac{\partial \ln D_0}{\partial k_0}\right)^2 \quad , \tag{2.129}$$

non

$$\frac{\partial \ln D_0}{\partial s} = \frac{-\,k_0\left[k_0^2\,(k_0^2 + k_L^2 + k_R^2) + k_L^2\, k_R^2\right] \sinh(2\, k_0\, s)}{B} \tag{2.130}$$

eta

$$\frac{\partial \ln D_0}{\partial k_0} = \frac{2}{k_0} - \frac{A}{B} \tag{2.131}$$

diren, D_0 delakoa Fermi-ren elektroien transmisio-probabilitatea izanik, eta

$$k_0 = \sqrt{2\,(\Phi_L - C/s)} \quad . \tag{2.132}$$

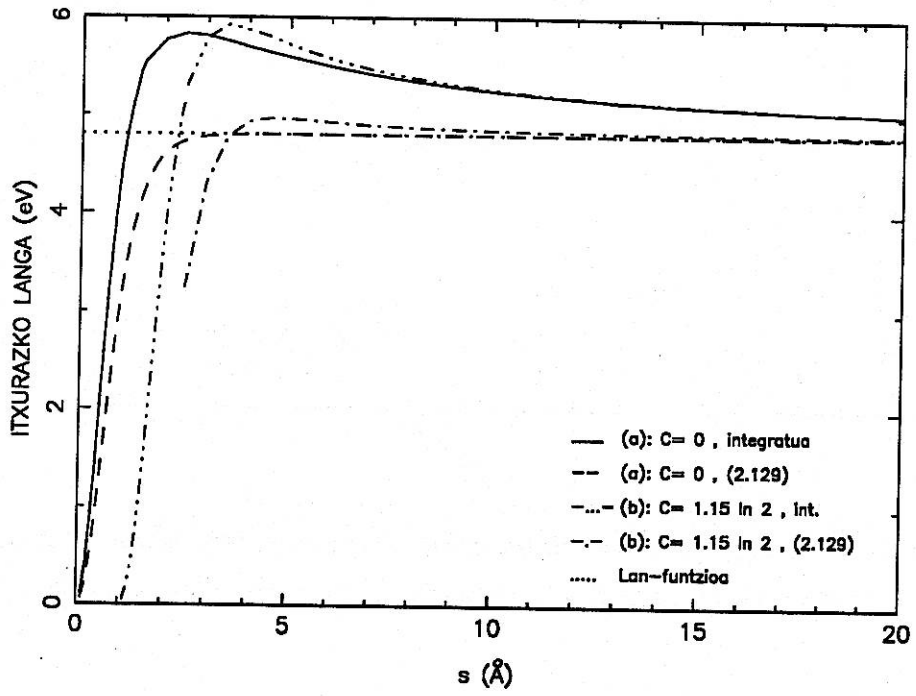
A eta B, bestalde, ondokoak ditugu:

$$A = 2\,k_0\,(k_L + k_R)^2 + 2\,k_0\,(2\,k_0^2 + k_L^2 + k_R^2)\,\sinh^2(k_0 s) + \left[k_0^2\,(k_0^2 + k_L^2 + k_R^2) + k_L^2\,k_R^2\right] s\,\sinh(2\,k_0 s) \qquad (2.133)$$

eta

$$B = k_0^2\,(k_L + k_R)^2 + \left[k_0^2\,(k_0^2 + k_L^2 + k_R^2) + k_L^2\,k_R^2\right]\sinh^2(k_0 s) \quad . \qquad (2.134)$$

2.37 irudian (2.125) transmisio-probabilitatea (2.9)-ra eraman ondoren lorturiko itxurazko potentzial-langa adierazten da, separazioaren funtzioan, $C = 0$ zein $C = 1.15\ \ln 2$ denean, (2.129) itxurazko potentzial-langarekin batera. Irudi honek, energiaren E_z osagaia Fermi-ren energia baino txikiagoa duten elektroien ekarpena itxurazko potentzial-langa neurtzeko orduan oso garrantzisua bilakatzen dela erakusten du, aurreko ataleko (2.110) eta (2.124) emaitzek ere erakusten duten erara.

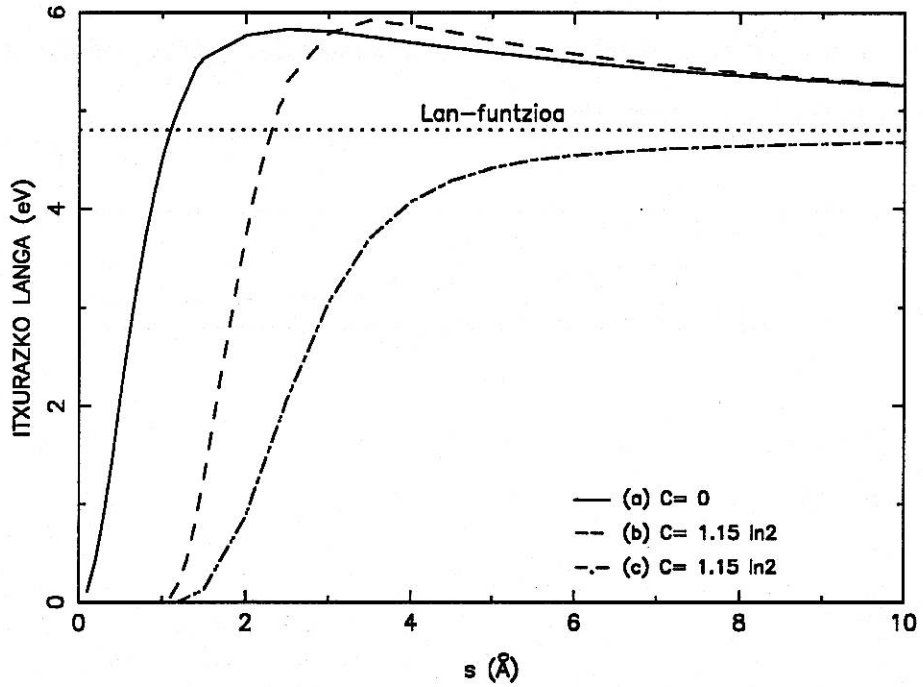


2.37 irudia. Itxurazko potentzial-langaren kalkulu zehatza, 2.35 irudiko (a) eta (b) kasuetan, hots, potentzial-langa karratuaren zein langa karratu beheratuaren kasuan, bigarren kasu honetan $C = 1.15\ \ln 2$ eginik. (2.129) itxurazko potentzial-langak ere erakusten dira, kasu berberetan.

Bestalde, potentzial-langa karratua C/s delako faktoreaz beheratzeak ez du eragiten itxurazko potentzial-langaren neurketan, oso separazio txikitarako izan ezik, aurreko atalean ere erakutsi den bezala, eta C-ren balio ezberdinetarako lorturiko emaitzak oso antzekoak dira.

Diogun, azkenik, Airy-ren funtzioak erabiliz lorturiko (2.53) transmisio-probabilitatea (2.9)-ra eraman ondoren aurkituriko itxurazko potentzial-langak 2.37 irudian erakutsitakoen berdinak direla, tentsioa oso txikia denean ($V_a << 1V$), espero genezakeen bezala.

2.35 irudiko (c) potentzial-langaren kasuan Schrödinger-en ekuazioa numerikoki askatu beharra dago, transmisio-probabilitateak kalkulatu ahal izateko. Era honetara lorturiko transmisio-probabilitateak (2.9)-ra eraman ondoren aurkituriko itxurazko potentzial-langa 2.38 irudian adierazten da, separazio txikitarako, 2.37 irudian erakutsitako (a) eta (b) kasuetako itxurazko potentzial-langekin batera.



2.38 irudia. Itxurazko potentzialaren kalkulu zehatza, (a) langa karratua, (b) langa karratu beheratua (C = 1.15 ln2), eta (c) Simmons-en irudi-potentzialak (C = 1.15 ln2) beheraturiko potentzial-langa kontsideraturik.

Irudi-potentzialak beheraturiko potentzial-langa bi elektrodoen arteko puntu guztietan berdina balitz, itxurazko potentzial-langa lan-funtzioa baino handiagoa izanen litzateke oso txikiak ez diren distantzietarako ($s > 2$Å), aurreko ataleko (2.110) emaitzak erakusten duen erara; (2.107) irudi-potentzialaren kasuan, aldiz, itxurazko potentzial-langa lan-funtzioa baino txikiagoa da separazio guztietarako, eta lan-funtzioaren berdintsua, oso txikiak ez diren separazioetarako ($s > 6$Å), aurreko atalean ere ondorioztatu den bezala (ikus (2.124)). Irudi-potentzialak itxurazko potentzial langaren neurketaren gainean duen eragina nabaria da,

beraz, itxurazko potentzial-langa potentzial-langaren altuera maximoa baino handiagoa baldin bada ere. Diogun, bestalde, 2.38 irudian erakutsitako itxurazko potentzial-langak 1Å-etako separazioetarako jotzen duela zerora, irudi-potentziala kontsideratuz gero, Lang-ek[86] nahiz Ferrer-ek, Martin-Rodero-k eta Flores-ek[87] erakutsitakoaren aurka. Emaitza hau, ordea, separazio txikitarako baliagarriak ez diren (2.106) eta (2.107) irudi-potentzial klasikoak erabiltzearen ondorioa da.

Elektroiek jasaten duten hutseango potentzial-langaren deskribapen zehatzagoa eman nahian, beraz, (2.73) potentzial-langa parametrizatua kontsideratu da. Separazio txikitarako, aldiz, (2.80) eta (2.81) direlako berdintzak ez dira betetzen, eta λ_L zein λ_R parametroak irudi-planoen arteko distantziaren arauerakoak dira, hutseango potentzialaren eta irudi-planoen arteko ebakidura-puntuak separazioarekin aldatzen ez direla emanez gero. Horrelatan, bada, ondoko bi ekuazioetaz osoturiko sistema algebraikoa askatu dugu numerikoki, behin $V(z_L)$ eta $V(s\text{-}z_R)$ finkatuz gero, irudi-planoen arteko distantziaren arauerako λ_L eta λ_R parametroak aurkitzeko asmoz:

$$V(z_L) = -\frac{1}{4}\left[\lambda_L - \frac{e^{-\lambda_R d} - 1}{d} - \frac{\mu}{d}\right], \tag{2.135}$$

$$V(s - z_R) = -\frac{1}{4}\left[\lambda_R - \frac{e^{-\lambda_L d} - 1}{d} - \frac{\mu}{d}\right] - \Delta\Phi \ . \tag{2.136}$$

$V(z_L) = V(s\text{-}z_R) = -\Phi_L - 1.3\text{eV}$ direlako balioei dagozkien λ_L eta λ_R parametroak 2.1 taulan erakusten dira, $\Phi_L = \Phi_R = 4.8\text{eV}$ direnean, eta 2.2 taulan, $\Phi_L = 3\text{eV}$ eta $\Phi_R = 6\text{eV}$ direnean. Taula hauetan, itxurazko potentzial-langa kalkulatzeko orduan kontsideratu dugun d distantziaren arauerako μ parametroa ere erakusten da. 2.39 irudian, 2.1 taulan erakutsitako d-ren arauerako parametroak dituen (2.73) potentzial-langan zeharreko (2.9) korronte-dentsitatearen logaritmo nepertarra adierazten da, irudi-planoen arteko distantziaren funtzioan, $V_a = 0.01\text{V}$ eta $\Phi_L = \Phi_R = 4.8\text{eV}$ direnean.

2.40 eta 2.41 irudietan, bestalde, era honetara kalkulaturiko korronte-dentsitateen logaritmo nepertarrak separazioarekiko deribatu ondoren lorturiko itxurazko potentzial-langak adierazten dira, d distantziaren funtzioan, $\Phi_L = \Phi_R = 4.8\text{eV}$ direnean eta $\Phi_L = 3\text{eV}$ eta $\Phi_R = 6\text{eV}$ direnean, hurrenez hurren. Emaitza hauek ere itxurazko potentzial-langa langaren altuera

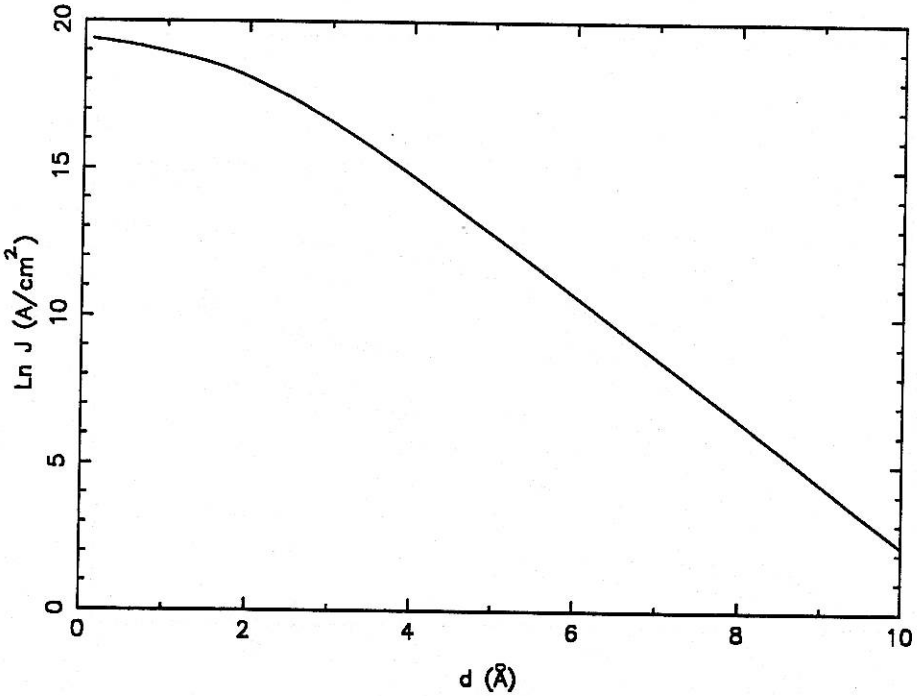
maximoa baino handiagoa dela eta $d > 6$Å denean ia konstantea dela erakusten dute, Simmons-en irudi-potentzial klasikoa erabiliz lorturiko emaitzek erakusten duten bezala; hala ere, 2.40 eta 2.41 irudietako itxurazko potentzial-langa Simmons-en irudi potentzialaz baliaturik lorturikoa baino txikixeagoa da, kontsideraturiko langaren altuera Simmons-ena baino txikiagoa bait da, $\mu < 0.66$ delako alegia.

2.1. taula. Itxurazko potentzial-langaren kalkuluetan kontsideraturiko λ_L, λ_R eta μ parametroen balioak, irudi-planoen arteko distantziaren funtzioan, $\Phi_L = \Phi_R = 4.8$eV direnean.

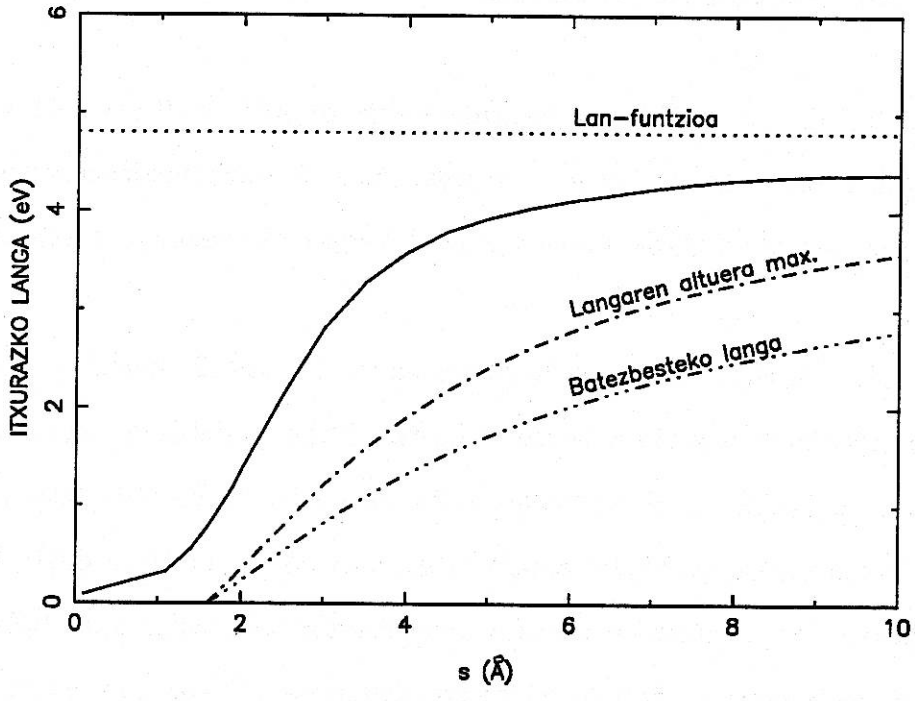
d (Å)	μ	$\lambda_L = \lambda_R$ (a_0^{-1})	d (Å)	μ	$\lambda_L = \lambda_R$(a_0^{-1})
0.1	0.01	0.49	1.0	0.50	0.76
0.3	0.09	0.57	3.0	0.50	0.81
0.5	0.22	0.65	5.0	0.50	0.85
0.7	0.35	0.71	7.0	0.50	0.86
0.9	0.46	0.75	9.0	0.50	0.87

2.1. taula. Itxurazko potentzial-langaren kalkuluetan kontsideraturiko λ_L, λ_R eta μ parametroen balioak, irudi-planoen arteko distantziaren funtzioan, $\Phi_L = 3$eV eta $\Phi_R = 6$eV direnean.

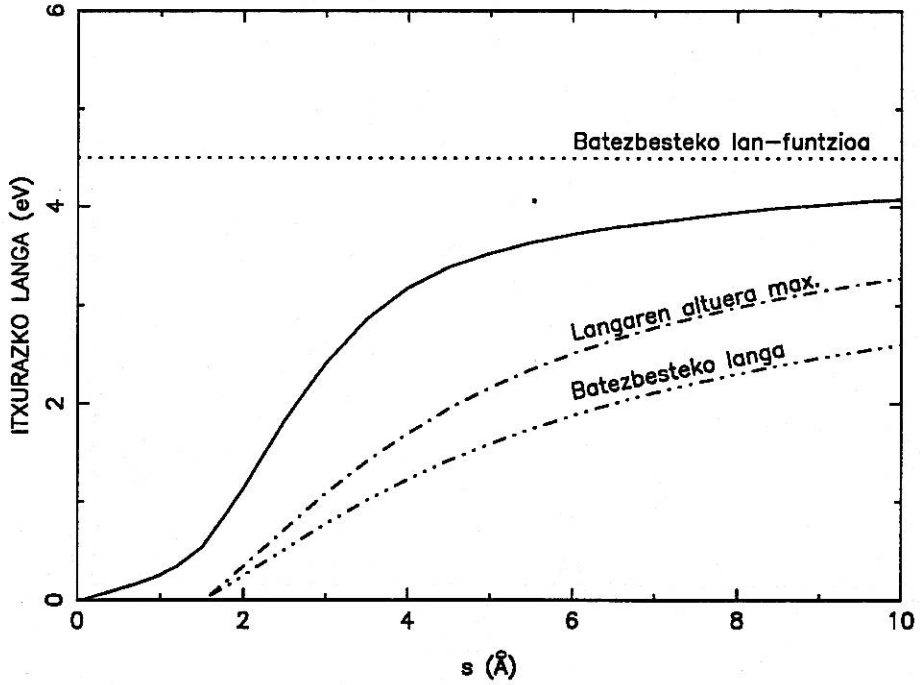
d(Å)	μ	$\lambda_L(a_0^{-1})$	$\lambda_R(a_0^{-1})$	d(Å)	μ	$\lambda_L(a_0^{-1})$	$\lambda_R(a_0^{-1})$
0.1	0.01	-1.59	2.99	1.0	0.50	0.44	1.04
0.3	0.09	-0.19	1.43	3.0	0.50	0.55	1.00
0.5	0.22	0.16	1.16	5.0	0.50	0.58	1.02
0.7	0.35	0.33	1.08	7.0	0.50	0.60	1.04
0.9	0.46	0.42	1.05	9.0	0.50	0.61	1.05



2.39 irudia. (2.73) potentzial-langa zeharkatzen duen korronte-dentsitatearen logaritmo nepertarra, irudi-planoen arteko distantziaren funtzioan, 2.1 taulan erakutsitako *d*-ren arauerako parametroen balioetarako. $V_a = 0.01$V eta $\Phi_L = \Phi_R = 4.8$eV.



2.40 irudia. (2.73) potentzial-langa zeharkatzen duen korronte-dentsitatea (2.100) adierazpenera eramanez lorturiko itxurazko potentzial-langa, irudi-planoen arteko distantziaren funtzioan, 2.1 taulan erakutsitako d-ren arauerako parametroen balioetarako, $\Phi_L = \Phi_R = 4.8$eV direnean. Potentzial-langaren altuera maximoa eta batezbesteko balioa ere erakusten dira.



2.41 irudia. (2.73) potentzial-langa zeharkatzen duen korronte-dentsitatea (2.100) adierazpenera eramanez lorturiko itxurazko potentzial-langa, irudi-planoen arteko distantziaren funtzioan, 2.2 taulan erakutsitako d-ren arauerako parametroen balioetarako, $\Phi_L = 3.0$eV eta $\Phi_R = 6.0$eV direnean. Potentzial-langaren altuera maximoa eta batezbesteko balioa ere erakusten dira, 2.40 irudian bezala.

Bestalde, (2.73) potentzial-langa kontsideraturik lorturiko 2.40 eta 2.41 itxurazko potentzial-langek zerorantz jotzen dute $d = 0$ denean, 86 eta 87 erreferentzietan erakusten den erara, (2.107) irudi-potentzial klasikoa kontsideraturik lorturiko itxurazko potentzial-langek ez bezala.

2.40 eta 2.41 irudietan, (2.73) potentzial-eredua eta 2.1 eta 2.2 tauletako parametroak erabiliz (2.18) ekuazioaren bidez kalkulaturiko batezbesteko potentzial-langa, $\overline{\Phi}$, ere erakusten da, d distantziaren funtzioan. Era honetara definituriko itxurazko potentzial-langa eta batezbesteko potentzial-langa, beraz, zeharo ezberdinak direla aurkitzen dugu. Bestalde, itxurazko potentzial-langa elektrodoen lan-funtzioen batezbesteko balioa baino txikiagoa da, distantzia guztietarako: hauxe da, hain zuzen ere, distantzia txikitara gure emaitzekin bat datozen Lang-en emaitzen[81] eta guk lorturikoen arteko ez-adostasuna. Ez-adostasun honen jatorria Lang-ek efektu ez-lokalak arbuiatu egiten dituen dentsitate lokaleko hurbilketa erabiltzean datza, irudi-indarren efektu ez-lokalek itxurazko potentzial-langa beheratuz zeregin handia betetzen bait dute, goian erakutsi den bezala.

Bibliografia

1. E. Schrödinger, *Quantization as a problem of proper values*, Part I. Annalen der Physik. **79** 361 (1926). Part II, **79** 489 (1926). Part III, **80** 437 (1926). Part IV, **81** 109 (1926).
2. J.R. Oppenheimer, *Three notes on the quantum theory of aperiodic effects*, Phys. Rev. **31** 66 (1928).
3. G. Gamow, *Zur quanten theorie des atomkernes*, Z. Phys. **51** 204 (1928).
4. R.H. Fowler & L. Nordheim, *Electron emission in intense electric fields*, Proc. Roy. Soc. (London) **119** 173 (1928).
5. E.W. Müller, *Electron-microscopic observations upon field cathodes*, Z. Physik. **106** 541 (1937).
6. E.W. Müller, *The resolution of the field-ion microscope*, Z. Naturforsch. **11a** 88 (1956). Ikus bedi ere, R.H. Good & E.W. Müller, *Field emission*, Encyclopedia of physics, Vol.XXI.
7. R.D. Young, J. Ward & F. Scire, *Observation of metal-vacuum-metal tunneling, field emission, and the transition region*, Phys. Rev. Lett. **27** 922 (1971).
8. R.D. Young, J. Ward & F. Scire, *The topografiner: An instrument for measuring surface microtopografy*, Rev. Sci. Instrum. **43** 999 (1972).
9. W.A. Thompson & S.F. Hanrahan, *Thermal drive apparatus for direct vacuum tunneling experiments*, Rev. Sci. Instrum. **47** 1303 (1976).
10. E.C. Teague, *Room temperature gold-vacuum-gold tunneling experiments*, Ph.D. thesis, North Texas State University, Denton, Texas (1978).
11. G.Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber & E. Weibel, *Tunneling through a controlable vacuum gap*, Appl. Phys. Lett. **40** 178 (1982).
12. G.Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber & E. Weibel, *Surfaces studies by scanning tunneling microscopy*, Phys. Rev. Lett. **49** 57 (1982).
13. G.Binnig & H. Rohrer, *Scanning tunneling microscopy*, Helv. Phys. Acta **55** 726 (1982).

14. G.Binnig & H. Rohrer, *Scanning tunneling microscopy - from birth to adolescence*, Rev. Mod. Phys. **59** 615 (1987).

15. C. Kittel, *Elementary statistical physics*. New York: John Wiley (1958) 25. orr..

16. Tunnel mikroskopioaren funtsa eta erabilgarritasunaren berri ondoko lanok ematen dute, besteak beste: G. Binnig & H. Rohrer, *Scanning tunneling microscopy*, Physica **127B** 37 (1984). A. Baratoff, *Theory of scanning tunneling microscopy - Methods and approximations*, Physica **127B** 143 (1984). G. Binnig & H. Rohrer, *Scanning tunneling microscope*, Sci. Am. **253** 50 (1985); J.A. Golovchenko, *The tunneling microscope: A new look at the atomic world*, Science **232** 48 (1986); C.F. Quate, *Vacuum tunneling: A new technique for microscopy*, Phys. Today, **39** 26 (1986); P.H. Cutler, T.E. Feuchtwang & Y. Kuk., *Theory and application of scanning tunneling microscopy*, Materials forum **10** no.2 (1987); T.E. Feuchtwang & P.H. Cutler, *Tunneling and scanning tunnel microscopy: A critical review*, Physica Scripta **35** 132 (1987); E. Louis, F. Flores & P.M. Echenique, *Theoretical aspects of scanning tunneling microscopy*, Physica Scripta **37** (1988); J. Gimzewski, *New fields for STM*, Physics World **225** (1989); E. Louis, F. Flores & P.M. Echenique, *Theory of scanning tunneling microscopy*, Radiat. Eff. **109** 309 (1989).

17. G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber & E. Weibel, *7×7 reconstruction on Si(111) resolved in real space*, Phys. Rev. Lett. **50** 120 (1983).

18. R.S. Becker, J.A. Golovchenko, E.G. McRae & B.S. Swartzentruber, *Tunneling i mages of atomic steps on the Si(111) 7×7 surface*, Phys. Rev. Lett. **55** 2028 (1985).

19. G. Binnig & H. Rohrer, *Scanning tunneling microscopy*, Surf. Sci. **126** 236 (1986).

20. R.M. Tromp, *Spectroscopy with the scanning tunneling microscope: a critical review*, J. Phys. C **1** 10211 (1989).

21. G. Binnig, N. García, H. Rohrer, J.M. Soler & F.Flores, *Electron-metal surface interaction potential with vacuum tunneling: Obervation of the image force*, Phys. Rev. B **30** 4816 (1984).

22. J.K. Gimzewsky & R. Moller, *Transition from the tunneling regime to point contact studied using scanning tunneling microscopy*, Phys. Rev. B **36** 1284 (1987).

23. G. Binnig, K.H. Frank, H. Fuchs, N. García, B. Reihl, H. Rohrer, F. Salvan & A.R. Williams, *Tunneling spectroscopy and inverse photoemission: Image and field states*, Phys. Rev. Lett. **55** 991 (1985).

24. R.S. Becker, J.A. Golovchenko & B.S. Swartzentruber, *Electron interferometry at crystal surfaces*, Phys. Rev. Lett. **55** 987 (1985).

25. R.S. Becker, J.A. Golovchenko, D.R. Hamann & B.S. Swartzentruber, *Real-space observation of surface states on Si(111) 7×7 with the tunneling microscope*, Phys. Rev. Lett. **55** 2032 (1985).

26. R.M. Feenstra, J.A. Stroscio and A.P. Fein, *Tunneling spectroscopy of the Si(111) 2×1 surface*, Surface Sci. **181** 295 (1987).

27. J.H. Coombs & J.K. Gimzewski, *Fine structure in field emission resonances at surfaces*, J. Microscopy **152** 841 (1988).

28. J. Bono and R.H. Good, *Conductance oscillations in scanning tunneling microscopy as a probe of the surface potential*, Surface Sci. **188** 153 (1987).

29. J.M. Pitarke & P.M. Echenique, *Potential barrier for tunneling electrons in STM*, Proceeding of the 11th Werner Brandt Workshop on Penetration Phenomena of Charged Particles in Matter, Oak Ridge, Tennessee, April 14-15 (1988).

30. J.M.Pitarke, F. Flores & P.M. Echenique, *Tunneling spectroscopy: Surface geometry and interface potential effects*, Surf. Sci. **234** 1 (1990).

31. J.M. Pitarke, P.M. Echenique & F.Flores, *Apparent barrier height for tunneling electrons in STM*, Surf. Sci. **217** 267 (1989).

32. J. Bardeen, *Tunneling from a many-particle point of view*, Phys. Rev. Lett. **6** 57 (1961).

33. J. Tersoff & D.R. Hamann, *Theory and application of the scanning tunneling microscope*, Phys. Rev. Lett. **50** 1998 (1983).

34. T.E. Feuchtwang, P.H. Cutler & N.M. Miskovsky, *A theory of vacuum tunneling microscopy*, Phys. Lett. A **99** 167 (1983).

35. J. Tersoff & D.R. Hamann, *Theory of the scanning tunneling microscope*, Phys. Rev. B **31** 805 (1985).

36. M.S. Chung, T.E. Feuchtwang, P.H. Cutler, *Spherical tip model in the theory of the*

scanning tunneling microscope, Srf. Sci. **187** 559 (1987).

37. J. Tersoff, *Method for the calculation of scanning tunneling microscope images and spectra*, Phys. Rev. B **40** 11990 (1989).
38. N.D. Lang, *Vacuum tunneling current from an adsorbed atom*, Phys. Rev. Lett. **55** 230 (1985).
39. N.D. Lang, *Theory of single-atom imaging in the scanning tunneling microscope*, Phys. Rev. Lett. **56** 1164 (1986).
40. N.D. Lang, *Apparent size of an atom in the scanning tunneling microscope as a function of bias*, Phys. Rev. Lett. **58** 45 (1987).
41. A. Sommerfeld & H. Bethe, *Electronentheorie der Metalle*, in Hanbuch der Physik Vol. 24 (Edited by S. Flugge, Springer Verlag, Berlin, 1953), 240 orr.
42. N. García, C. Ocal & F. Flores, *Model theory for scanning tunneling microscopy: application to Au(110) (1×2)*, Phys. Rev. Lett. **50** 2002 (1983).
43. E. Stoll, A. Baratoff, A. Selloni & P. Carnevali, *Current distribution in the scanning vacuum tunnel microscope: a free-electron model*, J. Phys. C **17** 3073 (1984).
44. L.D. Landau & E.M. Lifshitz, *Course of theoretical physics, Vol.3: Quantum Mechanics (non relativistic theory)*, 3rd. ed. Oxford, England: Pergamon Press (1977) 76-78 orr..
45. J.G. Simmons, *Generalized formula for the electric tunnel effect between similar electrodes separated by a thin insulating film.* J. Appl. Phys. **34** 1793 (1963).
46. C.B. Duke, *Tunneling in solids*, New York: Academic Press (1969) 60 orr..
47. E. Merzbacher, *Quantum mechanics*, 2nd edition, New York: Jon Wiley and Sons (1952) 7. atala.
48. R. Holm, *The electric tunnel effect across thin insulator films in contacts*, J. Appl. Phys. **22** 569 (1951).
49. N.M. Miskovsky, P.H. Cutler, T.E. Feuchtwang & A.A. Lucas, *The multiple-image interactions and the mean-barrier approximation in MOM and MVM tunneling junctions*, Appl. Phys.A **27** 139 (1982).
50. M. Abramowitz & I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1965) 446 orr..

51. B.A. Politzer, *Comparison of a numerical method and the WKB approximation in the determination of transmission coefficients for thin insulating films*, J.Appl. Phys. **37** 279 (1965).

52. K.H. Gundlach, *Zur Berchnung des tunnelstroms durch eine trapezformige potentialstufe*, Solid-State Electron. **9** 949 (1966).

53. W.R. Smythe, *Static and Dynamic Electricity*, New York, Mac Graw-Hill (1953) 4. atala.

54. Ikus. 28. Erreferentzia honetan erabilitako irudi-potentziala oker dago, egileak berak hurrengo lan batetan aipatzen duen bezala (J.G. Simmons, *Potential barriers and emission-limited current flow between closely spaced parallel metal electrodes*, J. Appl. Phys. **35** 2472 (1964)), eta beronen erdia den lan honetako (2.61) ekuazioak adierazitakoa erabili behar dugu.

55. Ikus 50, 6. atala.

56. C.M.M. Nex, *The use of Chebyshev series in computational physics* , Computer Physics Communications **20** 1 (1980).

57. P.M. Echenique & J.B. Pendry, *The existence and detection of Rydberg states at surfaces*, J. Phys. C **11** 2065 (1978).

58. R. García, J.J. Sáenz, J.M. Soler & N. García, *Tunneling current through localized surface states*, Surf. Sci. **181** 69 (1987).

59. R. García, J.J. Sáenz, J.M. Soler & N. García, *Distance-voltage characteristics in scanning tunneling microscopy*, J. Phys. C **19** L31 (1986).

60. C.T. Lynch, *CRC Handbook of Material Science*, CRC Press, Inc. Boca Raton, Florida.

61. P. Hohenberg & W. Kohn, *Inhomogeneous electron gas*, Phys. Rev. 136 B864 (1964). Ikus bedi ere, N.D. Lang, *Density-functional formalism and the electronic structure of metal surfaces*, Solid State Physics **28** 225 (1973).

62. W. Kohn & L.J. Sham, *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*, Phys. Rev. **140** A1133 (1965).

63. N.D. Lang & W. Kohn, *Theory of metal surfaces: charge density and surface energy*, Phys. Rev. B **1** 4555 (1970).

64. N.D. Lang & W. Kohn, *Theory of metal surfaces: work function*, Phys. Rev B **3** 1215 (1971).

65. N.D. Lang & W. Kohn, *Theory of metal surfaces: induced surface charge and image potential*, Phys. Rev. B **7** 3541 (1973).

66. V. Dose, W. Altman, A. Goldman, V. Kolac & J. Rogozik, *Image-potential states observed by inverse photoemission*, Phys. Rev. Lett. **52** 1922 (1984).

67. D. Straub & F.J. Himpsel, *Identification of image-potential surface states on metals*, Phys. Rev. Lett. **52** 1922 (1984).

68. B. Reihl, K.H. Frank & R.R. Schliter, *Image-potential and intrinsic surface states on Ag(100)*, Phys. Rev. B **30** 7328 (1984).

69. N. García, B. Reihl, K.H. Frank & A.R. Williams, *Image states: Binding energies, effective masses and surface corrugations*, Phys. Rev. Lett. **54** 591 (1985).

70. P.M. Echenique, R.H. Ritchie, N. Barberan & J.Inkson, *Semiclassical image potential at a solid surface*, Phys. Rev. B **23** 6486 (1981).

71. J.R. Manson & R.H. Ritchie, *Self-energy of a charge near a surface*, Phys. Rev. B **24** 4867 (1981).

72. P.M. Echenique, A. Gras-Marti, J.R. Manson & R.H. Ritchie, *Image potential for a tunneling electron*, Phys. Rev. B **35** 7357 (1987).

73. F. García Moliner and F. Flores, *Introduction to the theory of solids surfaces*, Cambridge Univ. Press (1979).

74. P. De Andrés, F. Flores, P.M. Echenique & R.H. Ritchie, *A barrier potential calculation for tunneling electrons at a metal-metal interface*, Europhys. Lett. **3** 101 (1987).

75. S. Ossicini & C.M. Bertoni, *Image-force effects on the barrier height for metal-metal tunneling electrons*, Phys. Rev. B **35** 848 (1987).

76. M.T. Michalewicz & J.Mahanty, *Correction to image potential between metals* , Phys. Lett. A **116** 392 (1986).

77. B.N.J. Persson & A. Baratoff, *Self-consistent dynamic image potential in tunneling*, Phys. Rev B **38** 9616 (1988).

78. R.O. Jones, P.J. Jennings and O. Jepsen, *Surface barrier in metals: A new model with*

application to W(001), Phys. Rev. B **29** 6474 (1987).

79. S. Ossicini, C.M. Bertoni & P. Gies, *Image plane for surface potential*, Europhys. Lett. **1** 661 (1989).
80. P.A. Serena, *Self-consistent image potential in a metal surface*, Phys. Rev. B **34** 6767 (1986).
81. N.D. Lang, *Apparent barrier height in scanning tunneling microscopy*, Phys. Rev. B **37** 10395 (1988).
82. Ikus 53, 5. atala.
83. R.S. Becker & J.A. Golovchenko, komunikazio pribatua.
84. J.H. Coombs, M.E. Welland & J.P. Pethica, *Experimental barrier heights and the image potential in scanning tunneling microscopy*, Surf. Sci. **198** L353 (1988).
85. M.C. Payne & J.C. Inkson, *Measurement of workfunctions by tunneling and the effect of the image potential*, Surf. Sci. **159** 485 (1985).
86. N.D. Lang, *Resistance of a one-atom contact in the scanning tunneling microscope*, Phys. Rev. B **36** 8173 (1987).
87. J. Ferrer, A. Martin-Rodero & F. Flores, *Contact resistance in the scanning tunneling microscope at very small distances*, Phys. Rev. B **38** 10113 (1988).

3. IOI-BIKOTE AZKARREN ETA SOLIDOETAKO ELEKTROIEN ARTEKO ELKARREKINTZA: KOLISIO-ELEKTROIEN EMISIOA

3.1.Sarrera

Gauza ezaguna da, partikula kargatuek solidoetan sorterazitako eremu zein potentzial elektrikoa hutsean sorterazitakoen berdinak ez direla, ingurunea polarizatu egiten bait da, eremu eta potentzial elektrikoak hutsean izanen lituzketen balioak aldaraziz.

Bestalde, partikula kargatua Fermi-rena baino abiadura handiagoaz ($v > 1.0$a.u.) higitzen baldin bada solidoan zehar, ingurunearen elektroi-dentsitate induzituak fluktuazio espazial periodikoak jasaten ditu kargaren atzekaldeko espazioaldean, Böhr-ek aditzera eman zuen bezala[1]. Izan ere, Böhr-ek, elektroiek jasaten duten desplazamendu koherentearen azterketa kualitatiboa egin zuen, ioi azkarrek materia kondentsatua zeharkatzean beraien atzekaldeko espazioaldean kono erako *lorratza* sorterazten dutela ondorioztatuz. Ioi azkarrek sorterazitako lorratzaren banaketa espazio-denboralaren azterketa kuantitatiboa ez zen burutu, ostera, Neufeld-ek eta Ritchie-k beraien lan aitzindaria[2-4] plazaratu zuten arte.

Pines-ek eta Bohm-ek berriki burutua zuten solidoetako elektroien arteko elkarrekintzen deskribapen kolektiboa[5-8], elektroi-gasa plasma kuantikoa bait litzen kontsideratuz. Elektroi-gasaren deskribapen honetan oinarritu ziren, bada, Neufeld eta Ritchie, solidoetan zehar higitzen diren ioi azkarrek sorterazitako lorratz-potentzialaren nahiz elektroi-dentsitate induzituen berri jasotzeko, elektroi-gasaren erantzuna lineala dela emanik; honetarako, elektroi-gasaren erantzunaren berri eman dezakeen funtzio dielektriko lokala erabili zuten, lorratz-potentzialak zein elektroi-dentsitate induzituak espazioan zeharreko oszilazioak jasaten dituztela aurkituz, elektroi-gasaren jokabide kolektiboaren eraginez. Lindhard-ek, bestalde, elektroi-gasaren erantzunaren berri zehatza ematen duen funtzio dielektriko mekaniko-kuantikoa aurkitu zuen[9], zorizko fasearen hurbilketan (RPA)[10].

Lan aitzindari haiek burutu zirenetik hona, lan teoriko[11-23] zein experimental[25-27] ugari eman da argitara arlo honetan, materia kondentsatua zeharkatzen duten ioi azkarrek sorterazitako elektroi-dentsitatearen fluktuazioak fenomeno berrien oinarria izan zitezkeelako ustean. Izan ere, elektroi-gasaren erantzuna deskribatzen duten funtzio dielektriko ez-lokalak erabili dira lorratz-potentziala zein elektroi-dentsitate induzitua kalkulatzeko[5,8,9,23], bai eta ingurune polarizatuak ioiaren gainean eragiten duen balaztatze-indarraren berri lortzeko ere.

Orain arte eginiko lan experimental gehienetan ioi azkarrek polarizaturiko inguruneak sorterazten duen eremu elektrikoaren intentsitatearen nahiz lorratz-potentzialaren berri baino jaso ez bada ere, oraintsu, lorratz-potentzialaren jatorria den elektroi-dentsitatearen fluktuazioaren berri ere eman lezakeen lan experimentala burutu da[28]. Lan honetan, oso mehea den karbonozko xafla bat pasarazi dira nitrogenozko ioi dimolekular azkarrak, eta jaurtikituriko agregatuen norabide berean ateratzen diren kolisio-elektroien kopuruak neurtu dira, agregatuen orientazioaren funtzioan, neurketa honek agregatuen ioi aurrelariak ioi atzelariaren posizioan sorterazten duen elektroi-dentsitate induzituaren berri eman bait diezaguke.

Era honetako experimentuak interpretatu ahal izateko, aldiz, beharrezkoa izango litzateke, elektroi-dentsitatearen fluktuazioen nahiz ioi dimolekularren eta elektroien arteko elkarrekintza anizkoitzari dagozkion interferentzien berri ematen duen teoria ez-lineala erabiltzea. Alabaina, halako teoriarik ez dago, oraingoz, eta atal honetan era honetako experimentuak interpretatu ahal izateko lehen urratsak ematen dira.

3.2 atalean, ioi dimolekularrak materia kondentsatua zeharka eraztean ioi aurrelariak ioi atzelariaren posizioan sorterazten dituen elektroi-dentsitatearen fluktuazioen kalkulu teorikoa burutzen da, projektilaren orientazioaren funtzioan, elektroi-gasaren erantzuna lineala dela jorik eta funtzio dielektrikoaren plasmoi-poloaren hurbilketa erabilirik[29].

3.3 atalean bi ioietaz osoturiko agregatu azkarren eta ingurunearen elektroien arteko elkarrekintzaren azterketa egiten da. Honetarako, sakabanaketa anizkoitza arbuiatu egiten da lehenengo, eta ioi bakar batek sorterazitako potentzialaren fase-lerrakuntzak kalkulatzen ditugu, elkarrekintzaren sakabanaketa-anplitudeak aurkitzeko; ondoren, bigarren ordenako perturbazioen teoriaz baliatzen gara, bi ioien eta solidoko elektroien arteko elkarrekintza anizkoitzari dagozkion interferentzi fenomenoen berri emateko asmoz[30].

Azkenik, 3.4 atalean energia txikiko elektroi-difrakzioaren teorian garaturiko metodoak erabiltzen ditugu, bi ioietaz osoturiko agregatu azkarren eta ingurunearen elektroien arteko elkarrekintzaren azterketa egiteko, sakabanaketa anizkoitza barnehartuz[31]. Ondoren, bibliografia ematen da.

3.2. Elektroi-dentsitatearen fluktuazioak

Kontsidera dezagun elektroi-gas homogeno eta isotropikoa $\boldsymbol{v}$ abiadura konstanteaz zeharkatzen duen Z kargadun partikula. Partikula honek sorterazten duen eremu elektrikoa oso bortitza ez bada, desplazamendu-eremuaren eta eremu elektrikoaren arteko erlazioa lineala izango da, eta, orduan, kanpoko karga-dentsitatearen eta karga-dentsitate osoaren Fourier-en transformatuen arteko erlazioa ondoko ere honetara idatz daiteke:

$$\rho\,(\boldsymbol{k}\,,\,\omega)=\frac{\rho_{\text{ext}}\,(\boldsymbol{k}\,,\,\omega)}{\varepsilon\,(\boldsymbol{k}\,,\,\omega)}\,, \tag{3.1}$$

non $\varepsilon(\boldsymbol{k}\,,\,\omega)$ delakoa elektroi-gasaren erantzunaren berri ematen duen funtzio dielektrikoa den.

Ondorioz, elektroi-gasa $\boldsymbol{v}$ abiaduraz zeharkatzen duen Z kargadun partikula puntualak sorterazten duen elektroi-dentsitate induzitua ondokoa dugu:

$$\delta\,n\,(\boldsymbol{r}\,,t)=\,-\frac{1}{(2\,\pi)^4}\int d\boldsymbol{k}\,d\omega\,\rho_{\text{ext}}(\boldsymbol{k}\,,\,\omega)\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{k}\,,\,\omega)}-1\right]e^{\,i\,(\boldsymbol{k}\,.\,\boldsymbol{r}\,-\,\omega\,t)}\,, \tag{3.2}$$

non

$$\rho_{\text{ext}}\,(\boldsymbol{k}\,,\,\omega)=2\,\pi Z\,\delta(\boldsymbol{k}.\boldsymbol{v}-\omega) \tag{3.3}$$

den. (3.3) adierazpena (3.2)-ra eramanez, beraz, hauxe lortzen dugu, $\boldsymbol{k}$ zein $\boldsymbol{r}$ bektoreak $\boldsymbol{v}$ bektorearen norabidean eta honekiko plano perpendikularrean deskonposatu ondoren:

$$\delta\,n(\rho,z,t)=\,-\frac{Z}{(2\pi)^2\,v}\int_0^{\infty}d\,k_{\perp}\,k_{\perp}\,J_0\,(k_{\perp}\,\rho)\int_{-\infty}^{\infty}d\,\omega\,e^{\,i\,\frac{\omega}{v}\,(z-\,v\,t)}\left[\frac{1}{\varepsilon\left(k_{\perp}\,,\,\omega;k_z=\frac{\omega}{v}\right)}-1\right], \tag{3.4}$$

non k_z eta z direlakoak $\boldsymbol{k}$ eta $\boldsymbol{r}$ bektoreek $\boldsymbol{v}$ bektorearen norabidean dituzten osagaiak diren, hurrenez hurren, eta $k_{\perp}$ eta ρ, $\boldsymbol{v}$-rekiko plano perpendikularrean dituztenak.

Elektroi-gasaren erantzunaren berri emateko, funtzio dielektrikoaren plasmoi-poloaren hurbilketa erabiltzen dugu[32-34]:

$$\varepsilon\,(k,\,\omega)=1+\frac{\omega_p^2}{\beta^2\,k^2+\frac{1}{4}\,k^4-\omega\,(\omega+i\,\gamma)}\,, \tag{3.5}$$

non γ delakoa indargetze-konstantea den, eta ω_p, elektroi-gasaren plasmoi-maiztasuna:

$$\omega_p=(3\,/\,r_s^3)^{1/2}\,, \tag{3.6}$$

r_s delakoa elektroi bakoitzari dagokion esferaren erradioa izanik. β, bestalde, honako hau dugu:

$$\beta = \left(\frac{3}{5}\right)^{1/2} v_F , \tag{3.7}$$

v_F delakoa elektroi-gasaren Fermi-ren abiadura izanik.

(3.5) funtzio dielektrikoa (3.4)-ra eramanez eta zenbait eragiketa burutuz gero, hauxe lortzen da[18]:

$$\delta n(\rho, z) = \delta n_1(\rho, z) + \delta n_2(\rho, z) , \tag{3.8}$$

non

$$\delta n_1(\rho, z) = -\frac{Z\omega_p^2}{\sqrt{2}\pi} \int_0^{Q_c} dQ\, Q J_0(\sqrt{2}\, Q\rho)\, \frac{\sin\left(\sqrt{2(\alpha \pm \xi)}\, \tilde{z}\right)}{\xi\sqrt{\alpha \pm \xi}} \tag{3.9}$$

eta

$$\delta n_2(\rho, z) = \frac{Z\omega_p^2}{2\sqrt{2}\pi} \int_{Q_c}^{\infty} dQ\, Q J_0(\sqrt{2}\, Q\rho) \frac{e^{-\sqrt{2}\,\delta|\tilde{z}|}}{\gamma\delta} \frac{\gamma\cos(\sqrt{2}\,\gamma|\tilde{z}|) + \delta\sin(\sqrt{2}\,\gamma|\tilde{z}|)}{G} \tag{3.10}$$

diren,

$$\tilde{z} = z - v t \tag{3.11}$$

izanik. Adierazpen hauetan,

$$Q_c = \frac{1}{\sqrt{2}\, v}\left[(v^2 - \beta^2)^2 - \omega_p^2\right]^{1/2} , \tag{3.12}$$

$$\alpha = v^2 - \beta^2 - Q^2 , \tag{3.13}$$

$$\xi = \left[(v^2 - \beta^2)^2 - 2v^2 Q^2 - \omega_p^2\right]^{1/2} , \tag{3.14}$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{G + \alpha} , \tag{3.15}$$

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{G - \alpha} , \tag{3.16}$$

$$G = (Q^4 + 2\beta^2 Q^2 + \omega_p^2)^{1/2} , \tag{3.17}$$

eta "+" zeinua erabili behar da $\tilde{z} > 0$ denean, baina "-" delakoa erabili behar da, $\tilde{z} < 0$ denean.

Diogun, bestalde, (3.8) adierazpena Poisson-en ekuazioa askaturik ere lor daitekeela, behin Z kargadun partikulak sorterazitako potentzial eskalarraren batezbezteko balioa kalkulatuz gero[35,36], oinarrizko egoeraren eta egoera kitzikatuen arteko energi aldakuntza ondokoa dela emanik (plasmoi-poloaren hurbilketa), alde batetik:

$$\omega_k = \left(\omega_p^2 + \beta^2 k^2 + \frac{1}{4} k^4\right)^{1/2} , \tag{3.18}$$

eta elkarrekintzaren hamiltondarra ondokoa dela emanik, bestetik[37]:

$$H_i = \sum_k g_k f_k(t) \, (b_k + b_{-k}^{+}) , \tag{3.19}$$

non

$$f_k(t) = -Z \, e^{i k.v t} \tag{3.20}$$

eta

$$g_k = \left(\frac{2 \pi \omega_p^2}{k^2 V \omega_k} \right)^{1/2} \tag{3.21}$$

diren, V delakoa normalizazio-bolumena izanik, eta b_k, b_k^{+}, plasmoien deusestatze- eta sortze-operatzaileak, hurrenez hurren.

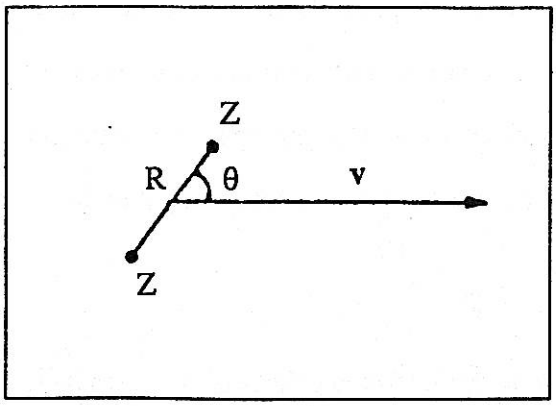
Z kargadun ioi-bikote baten ioi aurrelariak, beraz, elektroi-gasa zeharkatzean ioi atzelariaren posizioan sorterazten duen elektroi-dentsitate induzitua, (3.8) adierazpenekoa dugu, plasmoi-poloaren hurbilketan, non

$$\rho = R \sin \theta \tag{3.22}$$

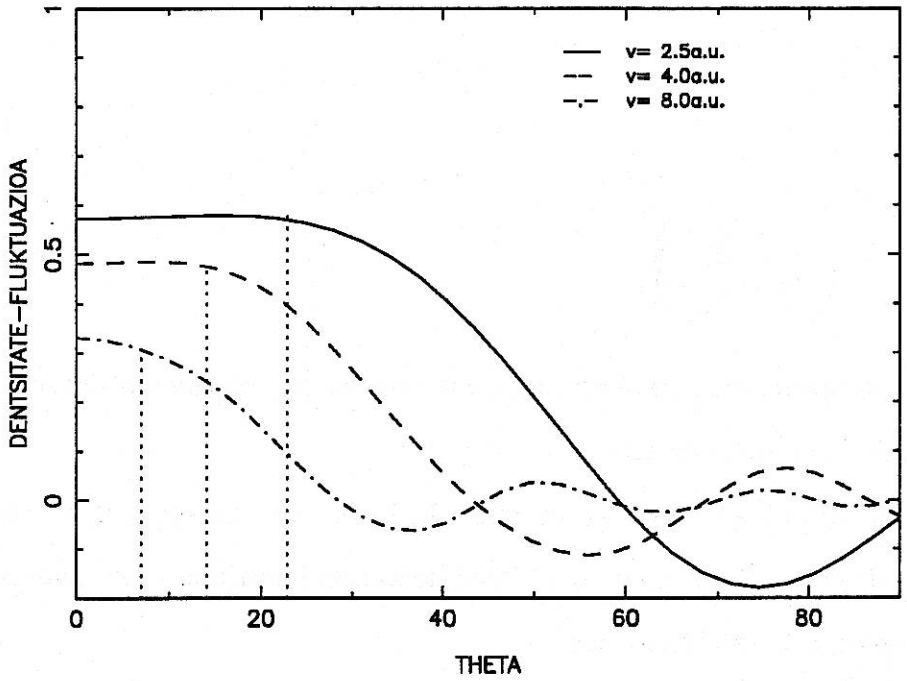
eta

$$\tilde{z} = - R \cos \theta \tag{3.23}$$

diren, R , ioi-bikotearen bi ioien arteko distantzia izanik, eta θ, ioi-bikotearen bi ioiak lotzen dituen lerro zuzenak v bektorearekin osotzen duen angelua (ikus 3.1 irudia). 3.2 irudian era honetara kalkulaturiko elektroi-dentsitate induzitua adierazten da, θ angeluaren funtzioan, R = $2.2a_0$ eta $r_s = 1.53a_0$ direnean, ioi-bikotearen abiaduraren zenbait baliotarako.



3.1 irudia. Z kargadun ioi-bikotea. R delakoa bi ioien arteko distantzia dugu, eta θ angeluak ioi-bikotearen orientazioaren berri ematen digu.



3.2 irudia. 3.1 irudiko ioi-bikotearen ioi aurrelariak ioi atzelariaren posizioan sorterazten duen elektroi-dentsitate induzituaren eta elektroien batezbesteko dentsitatearen arteko zatidura, orientazioaren funtzioan, $Z = 1$ denean, ioi-bikotearen abiaduraren zenbait baliotarako. Puntukako lerro bertikalek $\theta = \sin^{-1}(\beta/v)$ delako angeluaren balioa adierazten dute.

Elektroi-dentsitateak ioi atzelariaren posizioan duen balioa, θ angeluaren balio txikitarako balio handitarako baino handiagoa da, eta θ angelua lorratz kolektiboaren inguratzailea definitzen duen angelua baino txikiagoa denean, hots, $\theta < \sin^{-1}(\beta/v)$ denean bereziki. Era honetara, beraz, halako ioi-bikoteek materia zeharkatzeaz batera ateratzen diren kolisio-elektroien kopuruak, jaurtikitako ioi-bikoteen orientazioaren arauerakoak izanen direla

pentsatzea arrazoizkoa dela dirudi; are gehiago, era honetako neurketa experimentalek solidoan sorterazitako elektroi-dentsitatearen fluktuazioen berri eman liezagukete, Yamazaki-k proposatu duen bezala[28]. Horrelatan, bada, Yamazaki-k 4.5MeV-tako energiadun nitrogenozko ioi dimolekularrak karbonozko xafla meheak zeharka erazi ditu, jaurtikitako ioi-bikoteen norabide berean ateratzen diren kolisio-elektroien kopuruak neurtuz, ioi-bikoteen orientazioaren funtzioan; izan ere, hala neurturiko elektroi-kopuruak θ angelu txikitarako angelu handitarako baino handiagoak dira , eta emaitza hau 3.2 irudiak erakusten duenarekin bateragarria dugu.

Alabaina, ateratzen den elektroi-kopuruaren θ angeluarekiko menpekotasuna ez da soilik elektroi-gasaren elektroi-dentsitatearen fluktuazioen arauerakoa izango; izan ere, ioi-bikote baten eta elektroi-gasa osotzen duten elektroien arteko elkarrekintzari dagozkion sakabanaketaren sekzio eraginkorrak ioi-bikoteen orientazioaren arauerakoak dira, eta berau kontutan hartu beharrekoa dugu, beraz, experimentuak interpretatzeko orduan.

Horrelatan, bada, ondoko ataletan bi ioetaz osoturiko ioi-bikote azkarren eraginpeko elektroien sakabanaketaren azterketa egiten dugu, bigarren ordenako perturbazioen teoriaz baliaturik, lehenengo, eta sakabanaketaren teoria energia txikiko elektroien difrakzioaren teorian garaturiko metodoekin konbinatuz, ondoren.

3.3.Ioi-bikote azkarren eraginpeko elektroien sakabanaketa: metodo perturbatiboa

Biz materia kondentsatua v abiadura konstanteaz zeharkatzen duen eta Z kargadun bi ioietaz osoturik dagoen ioi-bikotea, bi ioien arteko distantzia R izanik, eta ioi aurrelariak ioi atzelariarekiko duen posizio-bektoreak v-rekin osotzen duen angelua, θ. Ioi-bikotearen masa ingurunearen elektroien masarekin konparaturik infinitutzat harturik, ioi-bikotearekin batera doan erreferentzi sistema inertziala kontsideratuko dugu.

Solidoaren elektroi-gasa osotzen duten sakabanatu gabeko uhin elektronikoak uhin launtzat harturik, berauek uhin esferikotan gara daitezke, r_1 posizio-bektorea duen ioi atzelariaren posizioarekiko edo r_2 posizio bektorea duen ioi aurrelariaren posizioarekiko[38]:

$$\varphi_{k_i}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} 4\pi e^{k_i r_j} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} i^l j_l(k|r - r_j|) Y^*_{lm}(k_i/k) Y_{lm}(s_j) \quad , \tag{3.24}$$

non k_i delakoa elektroi erasotzailearen momentua den, V, normalizazio bolumena, j_l, lehen motako eta l ordenako Bessel-en funtzio esferikoa[39], k, elektroiaren momentuaren modulua, r_j, garapena egiten deneko erreferentzi puntuaren posizio-bektorea, Y_{lm}, l eta m zenbaki kuantikoak dituen momentu angeluarrari dagokion harmoniko esferikoa, eta

$$s_j = \frac{r - r_j}{|r - r_j|} \quad . \tag{3.25}$$

Ioi-bikotearen eta solidoaren elektroien arteko elkarrekintzaren eraginez, aldiz, uhin elektroniko geldikorrak ez dira gehiago uhin launak izango; izan ere, ioi-bikoteak sorterazitako potentzialari dagokion eta denborarekiko menpekotasunik ez duen Schrödinger-en ekuazioaren soluzioak izanen dira. Ioi-bikotea osotzen duten ioiek sorterazitako potentzial elektrikoa Coulomb-en potentzial biluzia balitz, ioi-bikotearen potentzialaren eraginpeko elektroien Schrödinger-en ekuazioa aska liteke, koordenatu esferoidalak erabiliz[40-46], eta, horrela, sakabanaketa-anplitudea edo eta sekzio eraginkorrak lor litezke, behin fase-lerrakuntzak numerikoki kalkulatuz gero. Ioiek sorterazitako Coulomb-en potentziala, ordea, pantailatu egiten da, ingurunearen polarizazioaren eraginez. Hortaz, bada, ioi-bikotearen elkarrekintzaren eraginpeko elektroien sakabanaketa-anplitudeak kalkulatzekotan, bi ioi independenteren eta

elektroien arteko sakabanaketaren prozesua aztertuko dugu, lehenengo, sakabanaketa anizkoitza arbuiagarria bait litzen. Ondoren, perturbazioen teoriaz baliatuko gara, sakabanaketa anizkoitzaren eragina aztertzeko asmoz.

Elektroi-gasa zeharkatzen duen Z kargadun ioi bakar batek sorterazitako potentzial zentralaren eraginpeko elektroiaren uhin geldikorra, sakabanatu gabeko uhin launa bezala, uhin partzialetan gara daiteke, r_j posizio-bektorea duen ioiaren posizioarekiko:

$$\Psi_{k_i}(r) = e^{i k_i r_j} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-1}^{m=1} c_{l\,m}(k)\, R_l(k\,,\,|r - r_j|)\, Y_{l\,m}(s_j) \quad , \tag{3.26}$$

non c_{lm} direlakoak garapenaren koefizienteak diren eta R_l, momentu angeluarraren l balioari dagokion ekuazio erradialaren soluzioa:

$$-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R_l(k\,,\,r) + U(r)\, R_l(k\,,\,r) = E\, R_l(k\,,\,r) \quad . \tag{3.27}$$

Z kargadun ioiak sorterazten duen potentzial pantailatuak, bestalde, ondoko baldintza betetzen du:

$$\lim_{r\to\infty} |U(r)| < \frac{M}{r^{1+\varepsilon}} \quad , \tag{3.28}$$

non M eta ε direlakoak konstante positibo eta ez-nuluak diren. Horrelatan, bada, ioiak sorterazitako potentzialaren irispenetik kanpo dauden puntuetan (3.27) ekuazioaren soluzioa honela adieraz daiteke[47]:

$$R_l(k\,,\,r) = C_l^{(1)}(k)\, j_l(k\,r) + C_l^{(2)}(k)\, n_l(k\,r) \quad , \tag{3.29}$$

non n_l delakoa Bessel-en bigarren motako eta l ordenako funtzio esferikoa den, eta C_l direlako koefizienteek ondoko erlazioa betetzen duten:

$$\tan \delta_l(k) = - C_l^{(2)}(k) / C_l^{(1)}(k) \quad , \tag{3.30}$$

δ_l delakoa l momentu angeluarrari dagokion fase-lerrakuntza izanik. (3.30) delako berdintza erabiliz, (3.29) adierazpena ondoko erara berridatz daiteke, Hankel-en lehen eta bigarren motako funtzio esferikoen funtzioan:

$$R_l(k\,,\,r) = D_l(k)\left[e^{2i\delta_l}\, h_l^{(1)}(k\,r) + h_l^{(2)}(k\,r)\right] \quad , \tag{3.31}$$

D_l delakoa momentu angeluarraren l balioari dagokion k-ren funtzioa izanik.

(3.31) delako adierazpena (3.26)-ra eramanez, eta Bessel-en lehen motako funtzio esferikoen eta Hankel-en funtzio esferikoen arteko erlazioaz baliatuz, beraz, honela adieraz dezakegu elektroiaren uhin geldikorra, ioiak soterazitako potentzialaren irispenetik kanpoko puntuetan:

$$\Psi_{k_i}(r) = \varphi_{k_i}(r) + \Psi^{(s)}_{k_i}(r) \quad , \tag{3.32}$$

non $\varphi_{ki}(r)$ delakoa sakabanatu gabeko uhin launa den,

$$\varphi_{k_i}(r) = e^{i k_i r_j} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} d_{lm}(k)\, j_l(k\,|r - r_j|)\, Y_{lm}(s_j) \tag{3.33}$$

eta $\Psi^{(s)}_{ki}(\mathbf{r})$, uhin sakabanatua,

$$\Psi^{(s)}_{k_i}(r) = e^{i k_i r_j} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} d_{lm}(k)\, \frac{e^{2 i \delta_l} - 1}{2}\, h_l^{(1)}(k\,|r - r_j|)\, Y_{lm}(s_j) \quad . \tag{3.34}$$

Uhin launaren (3.24) eta (3.33) adierazpenak konparaturik, bada, d_{lm} koefizienteen balioa aurki daiteke, eta, orduan, (3.34) uhin sakabanatua ondo erara berridatz dezakegu:

$$\Psi^{(s)}_{k_i}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}}\, 4\pi\, e^{i k_i r_j} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} i^l\, \frac{e^{2 i \delta_l} - 1}{2}\, h_l^{(1)}(k\,|r - r_j|)\, Y^*_{lm}(k_i/k)\, Y_{lm}(s_j), \tag{3.35}$$

eta distantzia handiko limitean,

$$\Psi^{(s)}_{k_i}(r) \underset{r\to\infty}{=} \frac{1}{\sqrt{V}}\, e^{i \Delta . r_j}\, f^0(k_i, k_f)\, \frac{e^{i k r}}{r} \quad , \tag{3.36}$$

non k_f delakoa elektroi sakabanatuaren momentua den, Δ, momentu-transferentzia,

$$\Delta = k_i - k_f \quad , \tag{3.37}$$

eta $f^0(k_i,k_f)$, sakabanaketa-anplitudea,

$$f^0(k_i, k_f) = \frac{4\pi}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} \frac{e^{2 i \delta_l} - 1}{2 i}\, Y^*_{lm}(k_i/k)\, Y_{lm}(k_f/k) \quad , \tag{3.38}$$

edo, z ardatza k_i bektorearen norabidean aukeraturik,

$$f^0(k_i, k_f) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, \frac{e^{2 i \delta_l} - 1}{2 i}\, P_l(\cos\theta) \quad . \tag{3.39}$$

Adierazpen honetan, θ delakoa k_i eta k_f bektoreek osotzen duten angelua dugu, eta P_l direlakoak, Legendre-ren polinomioak.

Sakabanaketa anizkoitza arbuiatuz gero, beraz, ioi-bikotea osotzen duten bi ioien elkarrekintzaren eraginez k_f momentua lortzen duten elektroien sekzio eraginkor diferentziala ondokoa dugu:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \left(1 + e^{i\Delta.R}\right) \overset{0}{f}(k_i, k_f) \right|^2 , \qquad (3.40)$$

k_i delakoa elektroiak sakabanaketaren aurretik duen momentua izanik, eta R bektorea, bikotearen ioi aurrelariak ioi atzelariarekiko duen posizio-bektorea. Diogun, bada, bikotearen bi ioien eraginak independentetzat harturik ere, sekzio eraginkor diferentzialak ioi-bikotearen orientazioarekiko menpekotasun nabaria duela. Izan ere, jaurtikitako bikote-sortaren norabide berean ateratzen diren elektroien sekzio eraginkorra maximoa izanen da, ioi-bikoteak sortaren norabidearekiko perpendikularki orientaturik daudenenan; are gehiago, beste orientaziorekiko ere izan daiteke maximoa, ioi-bikoteen abiaduraren eta R distantziaren arauera.

Alabaina, bikotearen ioietariko batek sakabanaturiko elektroia beste ioiaren erasotzailea izan daiteke, eta bigarren sakabanaketa honetan ateratzen den elektroia berriro izan daiteke hasierako ioiaren erasotzailea, eta abar. Hau da, ioi bakoitzak topatzen duen elektroia ez da, izatez, uhin launa izango, sakabanaketa anizkoitz baten elektroi sakabanatua baizik. Horrelatan, bada, efektu hauen berri eman nahian, bigarren ordenako perturbazioen teoriaz baliatuko gara ondoren.

Born-en bigarren ordenako hurbilketa

Distantzia handitara (3.32) eta (3.36) adierazpenen bidez jar daitezkeen Schrödinger-en ekuazioaren soluzioak Lippman-Schwinger-en ekuazio integralaren soluzioak dira[48]:

$$\Psi_{\mathbf{k}_i}(r) = \varphi_{\mathbf{k}_i}(r) + 2\int dr' G_0^{(+)}(r, r')\, U(r')\, \Psi_{\mathbf{k}_i}(r') \quad , \qquad (3.41)$$

non $\varphi_{ki}(\mathbf{r})$ delakoa uhin launa den, $U(\mathbf{r}')$, elektroiak jasaten duen potentziala, eta $G_0(r,r')$, Green-en funtzio ateratzailea,

$$G_0^{(+)}(r, r') = -(2\pi)^{-3} \lim_{\varepsilon \to 0^+} \int \frac{e^{i k'.(r - r')}}{k'^2 - k^2 - i\varepsilon} \, dk' \quad . \tag{3.42}$$

Izan ere, distantzia handiko limitean (3.41) ekuazioaren soluzioak (3.32) delako berdintza betetzen du, uhin sakabanatua ondokoa izanik:

$$\Psi_{k_i}^{(s)}(r) \underset{r \to \infty}{=} \frac{1}{\sqrt{V}} f(k_i, k_j) \frac{e^{ikr}}{r} \quad , \tag{3.43}$$

non

$$f(k_i, k_f) = -\frac{V}{2\pi} \langle \varphi_{k_f} | U | \Psi_{k_i} \rangle \tag{3.44}$$

den.

Elektroiaren energia potentziala energia zinetikoarekin konparaturik txikia baldin bada, Lippman-Schwinger-en ekuazio integrala iterazioz aska daiteke, eta honela lorturiko soluzioa (3.44)-ra eramanez, sakabanaketa-anplitudea kalkula dezakegu, beraz. Bereziki, Lippman-Schwinger-en ekuazioaren lehen ordenako soluzioa (3.44)-ra eramanez, sakabanaketa- anplitudearen Born-en bigarren ordenako hurbilketa lortzen dugu:

$$f_{B_2} = -\frac{V}{2\pi} \left[\langle \varphi_{k_f} | U | \varphi_{k_i} \rangle + 2 \langle \varphi_{k_f} | U G_0^{(+)} U | \varphi_{k_i} \rangle \right] , \tag{3.45}$$

eta (3.42) adierazpena (3.45)-ra eramanez:

$$f_{B_2} = -\frac{V}{2\pi} \left[\langle \varphi_{k_f} | U | \varphi_{k_i} \rangle - \frac{V}{4\pi^3} \int dq \, \frac{\langle \varphi_{k_f} | U | \varphi_q \rangle \langle \varphi_q | U | \varphi_{k_i} \rangle}{q^2 - k^2 - i0^+} \right] . \tag{3.46}$$

Sakabanaketa-anplitudearen azken adierazpen hau konstanteen aldakuntzaren metodo perturbatiboaz baliaturik ere lor daiteke, behin $t \to -\infty$ denean perturbazio konstante bat piztu eta $t \to +\infty$ denean itzali egiten dela emanik[49].

Projektilaren eta elektroien arteko momentu-transferentzia handia izanik, elektroiek jasaten duten potentzial pantailatua honela adieraz daiteke:

$$U(r) = U_1(r) + U_1(r + R) \quad , \tag{3.47}$$

non $U_1(r)$ delakoa, hots, ioi bakar batek sorterazten duen potentzial pantailatua abiaduraren arauerako ondoko Yukawa-ren potentzialaz hurbil daitekeen, ioiaren abiadura beronek zeharkatzen duen elektroi-gasaren Fermi-ren abiadura baino handiagoa den bitartean:

$$U_1(r) = -\frac{Z}{r} e^{-\alpha r}, \tag{3.48}$$

α delakoa ondokoa izanik:

$$\alpha = \frac{\omega_p}{v} . \tag{3.49}$$

Adierazpen honetan, ω_p delakoa (3.6) adierazpenaren bidez definituriko plasmoi-maiztasuna dugu, eta v, ioi-bikotearen abiadura.

(3.48) potentziala (3.46) adierazpenera eramanez hauxe aurkitzen dugu, zenbait eragiketa burutu ondoren:

$$f_{B_2}(k_i, k_f) = \left(1 + e^{i \Delta . R}\right) f^0_{B_2}(k_i, k_f) + f'(k_i, k_f) , \tag{3.50}$$

non Δ bektorea (3.37) adierazpenekoa den, $f^o_{B2}(k_i, k_f)$, ioi bakar baten eta elektroien arteko sakabanaketari dagokion Born-en bigarren ordenako anplitudea (ikus Eranskina),

$$f^0_{B_2} = \frac{2Z}{\Delta^2 + \alpha^2} + \frac{(2Z)^2}{\Delta \Gamma}\left[\tan^{-1} \frac{\alpha \Delta}{2\Gamma} + \frac{1}{2} i \ln \frac{\Gamma + k\Delta}{\Gamma - k\Delta} \right], \tag{3.51}$$

Γ delakoa ondokoa izanik,

$$\Gamma = \left[\alpha^4 + k^2 (4\alpha^2 + \Delta^2)\right]^{1/2} , \tag{3.52}$$

eta $f'(k_i, k_f)$, lehen ordenako sakabanaketa anizkoitzaren berri ematen duen sakabanaketa-anplitudea,

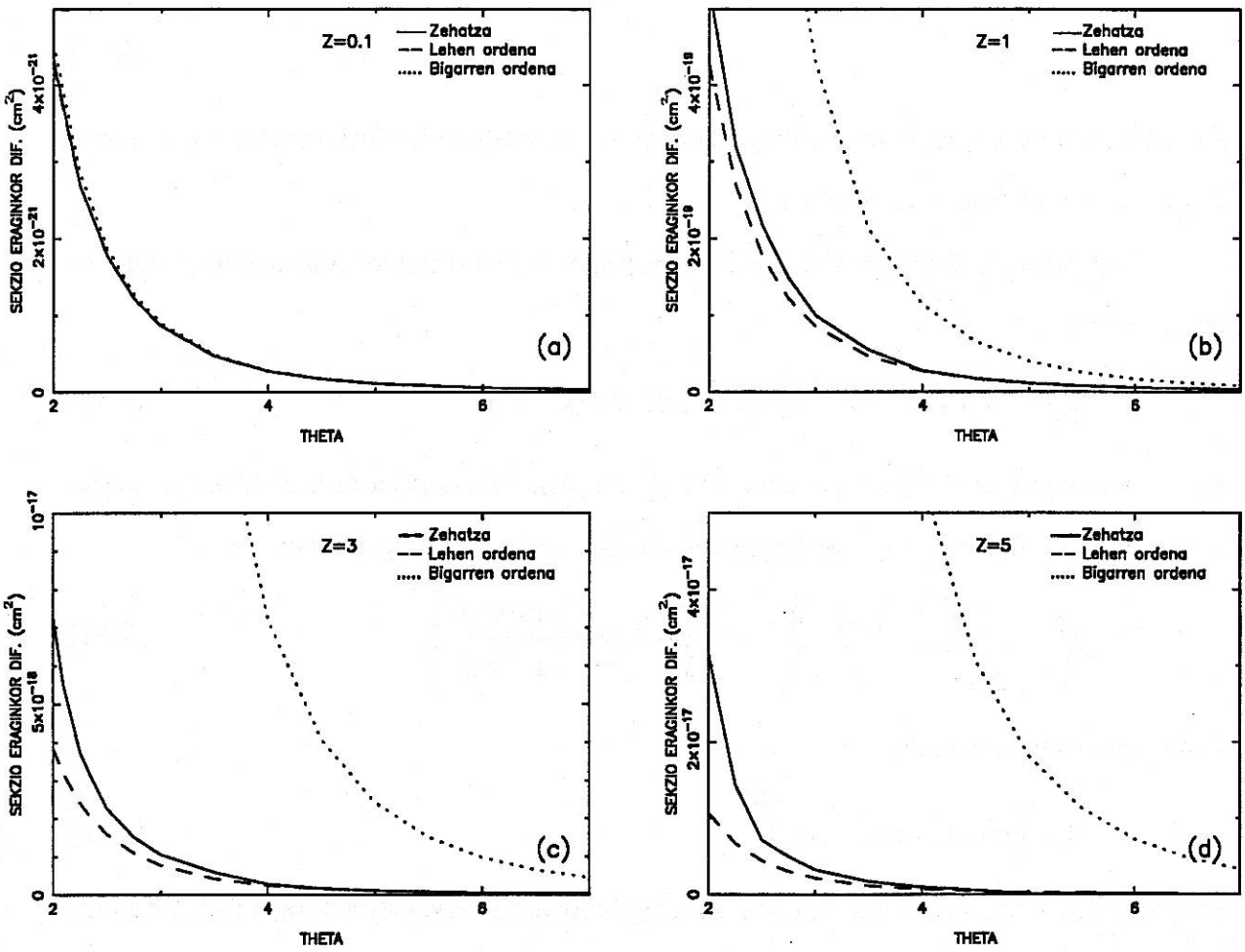
$$f = \frac{2Z^2}{\pi} \int \frac{dq}{q^2 - k^2 - i0^+} \frac{e^{-i(k_i - q).R} + e^{-i(q - k_f).R}}{\left(\alpha^2 + |k_i - q|^2\right)\left(\alpha^2 + |q - k_f|^2\right)} . \tag{3.53}$$

Esku artean ditugun ioi-bikoteen abiaduretarako, ioi bakar batek sorterazten duen (3.47) potentzialari dagozkion Born-en serieak ondoko baldintza betetzen denean konbergitzen dira:

$$\frac{Z}{k} \ln \frac{k}{\alpha} << 1 . \tag{3.54}$$

Baldintza hau, aldiz, handi samarrak diren abiaduretarako eta ioien karga txikitarako betetzen da, soilik. Hau 3.3 irudian ikus daiteke, non ioi bakar baten eraginpeko elektroien bigarren ordenako sekzio eraginkor diferentzialak erakusten diren, $k_i = -v$ eta $k_f = v$ direneko kasu berezian, lehen ordenako sekzio eraginkor diferentzialekin eta sekzio eraginkor diferentzial

zehatzekin batera.



3.3 irudia. Bigarren ordenako (3.51) sakabanaketa-anplitudearen moduluaren karratua eginez kalkulaturiko sekzio eraginkor diferentziala, ioiaren abiaduraren funtzioan, $k_i = -v$ eta $k_f = v$ direneko kasu berezian, kargaren ondoko balioetarako: $Z = 0.1$ (3.3a irudia), $Z = 1$ (3.3b irudia), $Z = 3$ (3.3c irudia) eta $Z = 5$ (3.d3 irudia) balioetarako. (3.51) sakabanaketa-anplitudearen lehen gaiaren nahiz (3.39) sakabanaketa-anplitude zehatzaren moduluaren karratua eginez kalkulaturiko lehen ordenako sekzio eraginkor diferentziala eta sekzio eraginkor diferentzial zehatza ere erakusten dira; azken hau kalkulatzeko, (3.48) potentzialari dagozkion fase-lerrakuntzak numerikoki kalkulatu dira.

$Z \geq 1$ denean, bigarren ordenako sekzio eraginkor diferentziala handiegia da, bai eta (3.52) delako baldintza betetzen duten abiaduretarako, hots, sakabanaketa-anplitudearen Born-en serieak konbergitzen direneko abiaduretarako ere. Emaitza hau bigarren ordenako sekzio eraginkor diferentzialaren adierazpenean k^{-2} ordenako gai guztiak ez azaltzearen ondorioa da, Joachain-ek azaldu duen bezala[50].

Horrelatan, bada, ioi-bikotearen eraginpeko elektroien (3.50) sakabanaketa-anplitudea kontsideratu beharrean, honako hau hartuko dugu, sakabanaketa anizkoitzaren ondorioak aztertzeko asmoz:

$$f(k_i, k_f) = \left(1 + e^{i \Delta.R}\right) f^0(k_i, k_f) + f'(k_i, k_f) , \tag{3.55}$$

non f^0 delakoa ioi bakar batek sorterazitako potentzialari dagokion (3.39) sakabanaketa-anplitude zehatza den, eta f', (3.53) adierazpenekoa. Hurbilketa honetan, beraz, ondokoa dugu sekzio eraginkor diferentziala:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \left(1 + e^{2 i \Delta.R}\right) f^0(k_i, k_f) + f'(k_i, k_f) \right|^2 . \tag{3.56}$$

Bestalde, dakigunez,

$$\lim_{\varepsilon \to 0^+} \frac{1}{x - i\varepsilon} = PP \frac{1}{x} + i \pi \delta(x) , \tag{3.57}$$

eta, ondorioz, (3.53) adierazpena ondoko erara berridatz daiteke:

$$f = \frac{2Z^2}{\pi^2} \left[\int_0^\infty PP \frac{g(q)}{q^2 - k^2} dq + i \pi \frac{g(k)}{2k} \right] , \tag{3.58}$$

non

$$g(q) = \int d\Omega \frac{e^{-i(k_i - q).R} + e^{-i(q - k_f).R}}{\left(\alpha^2 + |k_i - q|^2\right)\left(\alpha^2 + |q - k_f|^2\right)} \tag{3.59}$$

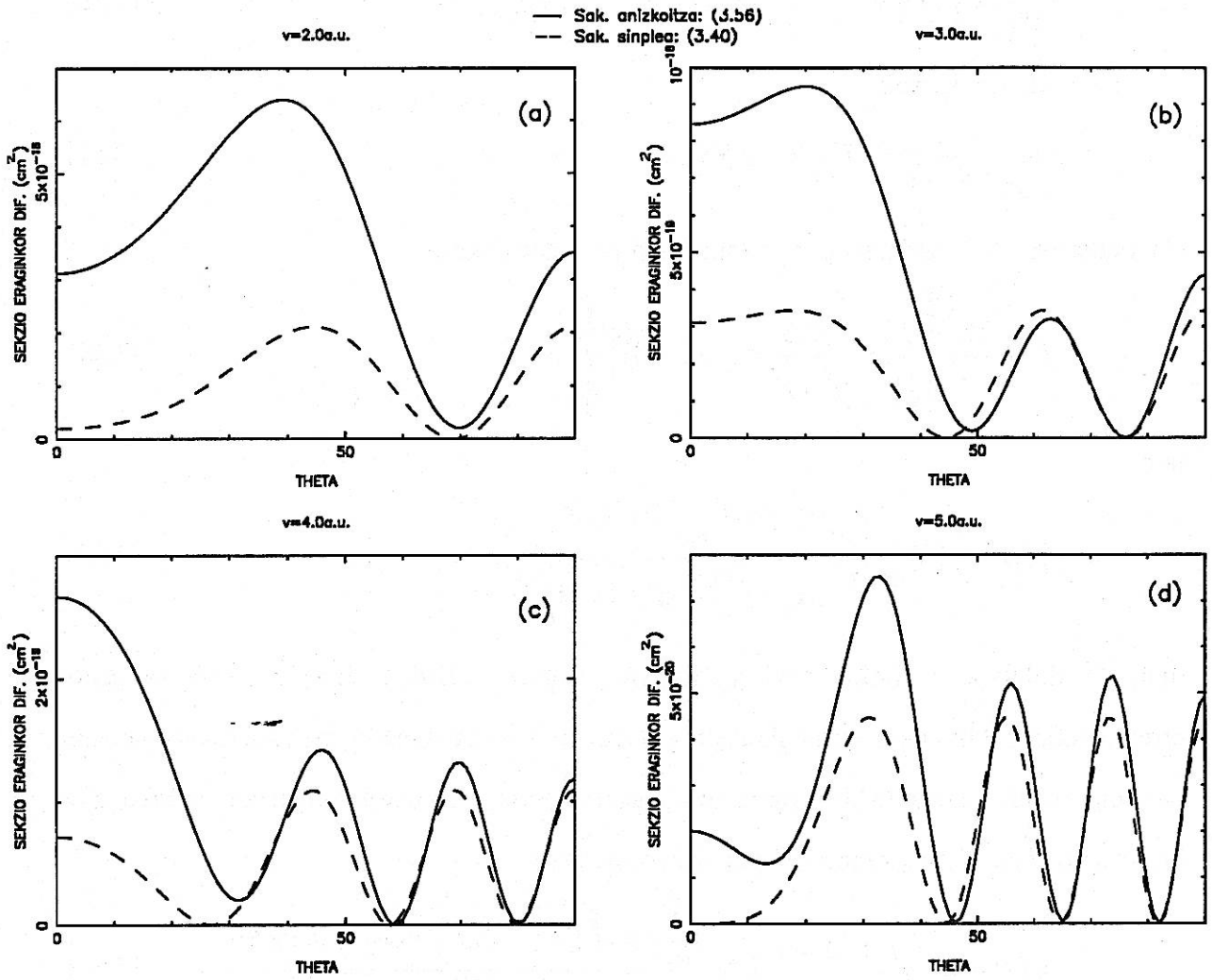
den, Ω delakoa q bektoreari dagokion angelu solidoa izanik. Laborategiko erreferentzialarekiko momentu nulua duten elektroien kasuan bereziki, elektroi sakabanatuaren momentuak ioi-bikoteen abiaduraren norabide eta norantza berberak dituenean, ondoko erara berridatz daiteke (3.59), zenbait eragiketa burutuz gero:

$$g(q) = 4 \pi q^2 e^{i v R \cos\theta} \int_{-1}^{1} dv \frac{J_0\left[q R \sqrt{1 - v^2} \sin\theta\right] \cos(q R v \cos\theta)}{(\alpha^2 + q^2 + v^2)^2 - 4 v^2 q^2 v^2} , \tag{3.60}$$

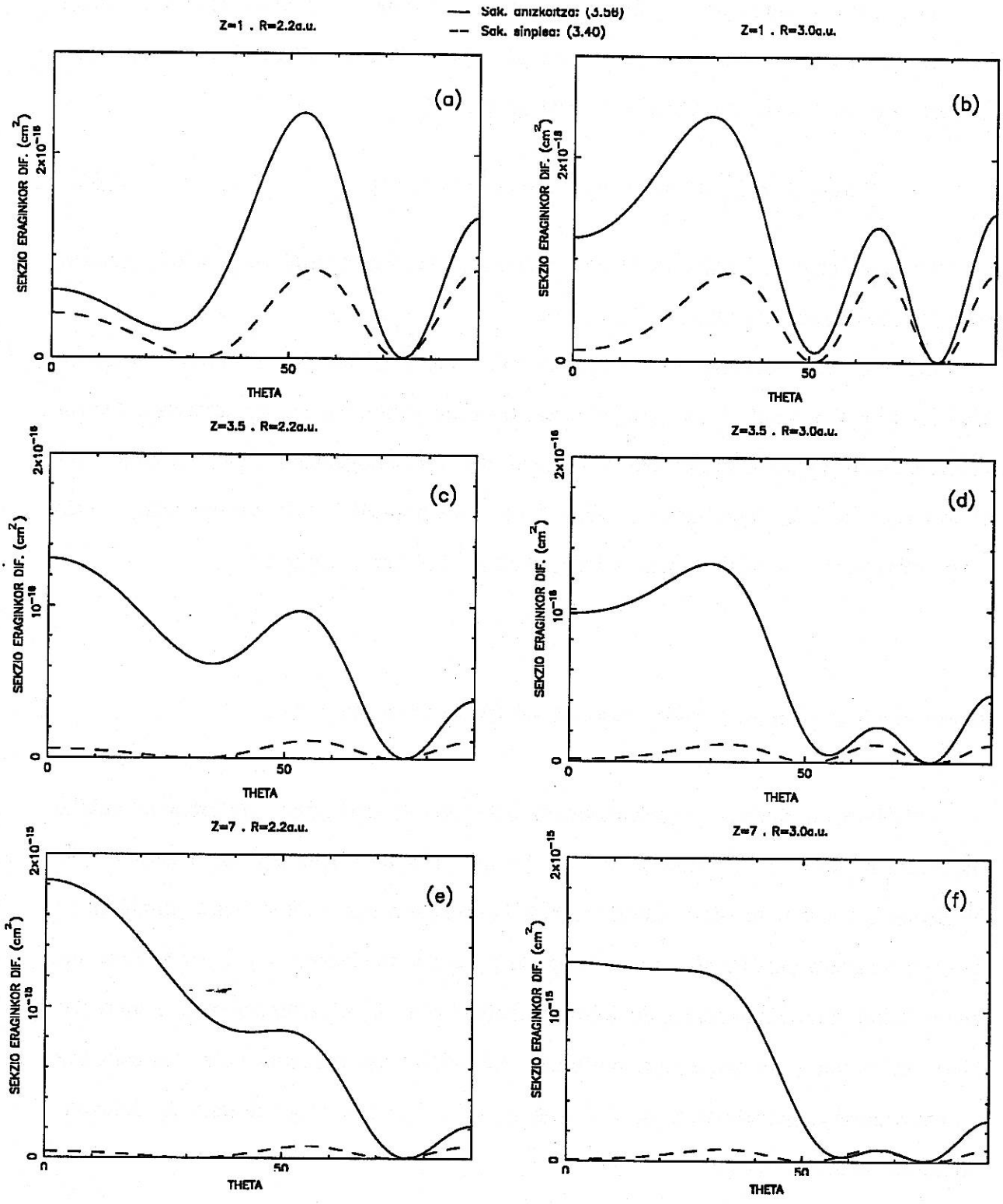
non θ delakoa R eta v bektoreek osotzen duten angelua den, eta J_0, Bessel-en lehen motako eta zero ordenako funtzioa.

3.4 eta 3.5 irudietan, (3.60) adierazpena (3.58)-ra eta (3.39) nahiz (3.58)

sakabanaketa-anplitudeak (3.56)-ra eramanez lorturiko sekzio eraginkor diferentzialak erakusten dira, ioi-bikoteen orientazioaren funtzioan, (3.40) sekzio eraginkor diferentzialekin batera, k_i=-v eta k_f= v direneko hasuan, ioi-bikoteen kargaren, abiaduraren eta R distantziaren zenbait baliotarako. 3.4 irudietan Z = 1eta R = 2.2a.u. direneko kasua kontsideratu da, v-ren zenbait baliotarako, eta 3.5 irudietan v = 2.5a.u. deneko kasua kontsideratu da, Z-ren nahiz ioi-bikotea osotzen duten ioien arteko distantziaren balio ezberdinetarako.



3.4 irudia. (3.40) nahiz (3.56) sekzio eraginkor diferentzialak, ioi-bikotearen orientazioaren funtzioan, k_i = -v, k_f= v, R = 2.2a.u. eta Z = 1 direnean, abiaduraren ondoko balioetarako: v = 2.0a.u. (3.4a irudia), v = 3.0a.u. (3.4b irudia), v = 4.0a.u. (3.4c irudia) eta v = 5.0a.u. (3.4d irudia).



3.5 irudia. (3.40) nahiz (3.56) sekzio eraginkor diferentzialak, ioi-bikotearen orientazioaren funtzioan, k_i=-v, k_f= $v$eta v = 2.5a.u. direnean, kargaren eta bi ioen arteko distantziaren ondoko balioetarako: Z = 1, R = 2.2a.u.(3.5a irudia), Z = 1, R = 3.0a.u. (3.5b irudia), Z = 3.5, R = 2.2a.u. (3.5c irudia), Z = 3.5, R = 3.0a.u. (3.5d irudia), Z = 7 , R = 2.2a.u. (3.5e irudia) eta Z = 7, R = 3.0a.u. (3.5f irudia).

Sakabanaketa anizkoitza arbuiatu egiten duen (3.40) sekzio eraginkorrak, beraz, badu ioi-bikoteen orientazioarekiko menpekotasuna, goian aureratu dugun bezala; izan ere, aztertzen ari garen kasuan, honako erara berridatz dezakegu (3.40):

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{0} = 2\left[1 + \cos\left(2\, v R\, \cos\theta\right)\right]\left|f^{0}(-\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v})\right|^{2}; \qquad (3.61)$$

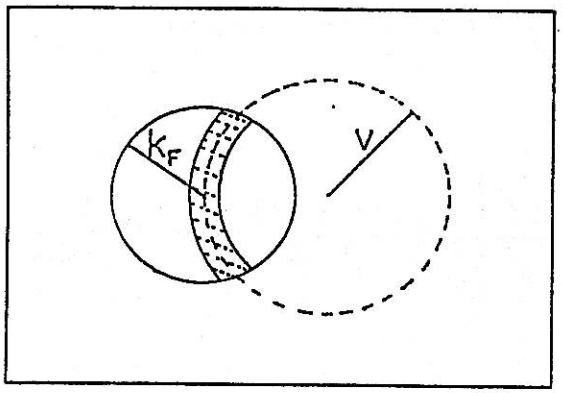
eta sekzio eraginkorrak, bada, ioi-bikoteen v eta R parametroen araueraako oszilazioak agertzen ditu, 3.4 eta 3.5 irudiek erakusten duten erara.

Lehen ordenako sakabanaketa anizkoitzaren berri ematen duen f sakabanaketa-anplitudea kontsideratzeak, bestalde, sekzio eraginkorrak θ angeluarekiko duen menpekotasuna aldarazi egiten du nabarmenki, Z handia denean bereziki; izan ere, θ angeluaren balio txikitarako, eta ioi-bikoteak beraien higiduraren norabide berean orientaturik daudenean bereziki, sekzio eraginkorra handiagoa bilakatzen da, sakabanaketa anizkoitzaren eraginez.

Balentzi elektroien hasierako momentu-banaketaren ekarpena

Ioi-bikoteek elektroi-gasa zeharkatzen dutenean, laborategiko erreferentzialarekiko momentu nulua duten elektroiek ez ezik, Fermi-ren esfera betetzen duten gainontzeko elektroiek ere badute bikote-sortaren norabide berean ateratzeko probabilitatea ez-nulua, eta hasierako egoera posible guztiekiko integrala burutu behar izanen dugu, beraz. Bereziki, bikote-sortaren norabide berean eta ioi-bikoteekiko $[\lambda_1 v, \lambda_2 v]$ tarteko abiaduraz ateratzen diren elektroien hasierako egoera posibleak, 3.6 irudian adierazitako Fermi-ren esferaren espazioaldeari dagozkionak dira, $v - k_F \leq \lambda_1 v$ eta $\lambda_2 v \leq v + k_F$ direnean, k_F delakoa Fermi-ren momentua izanik:

$$k_F = \frac{(9\pi/4)^{1/3}}{r_s}. \qquad (3.62)$$



3.6 irudia. Bikote-sortaren norabide berean eta $[\lambda_1 v, \lambda_2 v]$ tarteko abiaduraz ateratzeko probabilitate ez-nulua duten elektroien hasierako momentuen espazioaldea, $v - k_F \leq \lambda_1 v$ eta $\lambda_2 v \leq v + k_F$ direnean. Espazioalde hau $\lambda_1 v$ eta $\lambda_2 v$ erradiodun eta k_F erradiodun gainazal esferikoek osotzen dutena dugu. $v - k_F \geq \lambda_1 v$ eta $\lambda_2 v \geq v + k_F$ direnean, bestalde, balentzi elektroi guztiek izanen lukete bikote-sortaren norabide berean eta $[\lambda_1 v, \lambda_2 v]$ tarteko abiaduraz ateratzeko probabilitate ez-nulua.

Ondorioz, bikote-sortaren norabide berean eta $[\lambda_1 v, \lambda_2 v]$ tarteko abiaduraz ateratzen diren kolisio-elektroien balentzi elektroi bakoitzeko sekzio eraginkor diferentziala honela adieraz dezakegu, sakabanaketa-probabilitateak hasierako egoera posible guztietarako integratuz gero:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{3}{4\pi k_F^3 v} \int_{k_{min}}^{k_{max}} dk\, k^3 \int_{\mu_{min}}^{1} d\mu \int_0^{2\pi} d\varphi\, |f(k, \mu, \varphi)|^2 \quad , \tag{3.63}$$

non k, μ eta φ direlakoak k_i bektorearen koordenatu polarrak diren, z ardatza $-v$ bektorearen norabide eta norantzan aukeraturik. Bestalde,

$$k_{min} = \max (v - k_F, \lambda_1 v) \quad , \tag{3.64}$$

$$k_{max} = \min (v + k_F, \lambda_2 v) \quad , \tag{3.65}$$

$$\mu_{min} = \frac{k^2 + v^2 - k_F^2}{2 k v} \quad , \tag{3.66}$$

eta $f(k,\mu,\varphi)$ delakoa $k_i(k,\mu,\varphi)$ hasierako momentua duen elektroiaren sakabanaketa-anplitudea da, hau da:

$$f(k, \mu, \varphi) = \left\{ 1 + e^{-ikR\left[(1+\mu)\cos\theta - \sqrt{1-\mu^2}\cos\varphi\sin\theta\right]} \right\} f^0(k, \mu, \varphi) + f'(k, \mu, \varphi) \quad , \tag{3.67}$$

non

$$f^0(k\,,\mu\,,\varphi)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2\,l+1)\,\frac{e^{2\,i\,\delta_l}-1}{2\,i}\,P_l(-\mu) \tag{3.68}$$

eta

$$f'(k\,,\mu\,,\varphi)=\frac{2Z^2}{\pi^2}\left[\int_0^{\infty}PP\,\frac{g(q\,,\mu\,,\varphi)}{q^2-k^2}\,dq\;+i\,\pi\,\frac{g(k\,,\mu\,,\varphi)}{2\,k}\right] \tag{3.69}$$

diren,

$$g(q\,,\mu\,,\varphi)=q^2\int_{-1}^{1}dv\int_0^{2\pi}d\varphi'\,\frac{e^{-i\,\xi_1 R}+e^{i\,\xi_2 R}}{A}\;, \tag{3.70}$$

$$\xi_1=(\,qv-k)\cos\theta+q\,(1-v^2)^{1/2}\cos\varphi'\,\sin\theta\;, \tag{3.71}$$

$$\xi_2=(\,k\,\mu+q\,v)\cos\theta+\left[k\,(1-\mu^2)^{1/2}\cos\varphi-q\,(1-v^2)^{1/2}\cos\varphi'\right]\sin\theta\,, \tag{3.72}$$

$$A=(\alpha^2+q^2+k^2)^2-2\,k\,q\,(\alpha^2+q^2+k^2)\,(v+B)+4\,k^2\,q^2\,v\,B \tag{3.73}$$

eta

$$B=-\,\mu\,v+(1-\mu^2)^{1/2}\,(1-v^2)^{1/2}\cos(\varphi-\varphi') \tag{3.74}$$

izanik.

Diogun, bestalde, solidoaren balentzi elektroi guztien eta laborategiko erreferentzialarekiko momentu nulua duten elektroien sakabanaketa-probabilitateak berdinak direla emanez gero, (3.63) sekzio eraginkor diferentziala ondoko erara idatz daitekeela:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{3}{4\,\pi\,k_F^3}\,V_k\left|\left(1+e^{-2\,i\,v\,R\,\cos\theta}\right)f^0(v\,,1)+f'(v\,,1)\right|^2\;, \tag{3.75}$$

non V_k delakoa 3.6 irudian adierazitako espazioaldearen bolumena den, $v-k_F\le\lambda_1\,v$ eta $\lambda_2\,v\le v+k_F$ direnean, hau da,

$$V_k=\pi\,v\left[\frac{(k_F^2-v^2)\,(\lambda_2^2-\lambda_1^2)}{2}+\frac{2\,v^2(\,\lambda_2^3-\lambda_1^3)}{3}-\frac{v^2\,(\lambda_2^4-\lambda_1^4)}{4}\right]. \tag{3.76}$$

$f^0(v\;,1)$ eta $f'(v\,,1)$ direlakoak, bestalde, (3.68) eta (3.69) adierazpenen bidez lortzen dira, bertan $k=v$ eta $\mu=1$ eginez; bereziki, hala eginez gero, (3.69) adierazpena (3.58)-ra laburbiltzen da, espero genezakeen bezala.

Yamazaki-k[28] buruturiko experimentuan 4.5 MeV-tako nitrogenozko ioi dimolekularrak erabili dira xafla meheak zeharka erazteko, alde batetik, eta laborategiarekiko [1.95 v , 2.15 v] tarteko abiaduraz projektil-sortaren norabide berean ateratzen diren elektroi-kopuruak neurtu dira, projektilen orientazioaren funtzioan. Ioi-bikoteen abiadura, hortaz, v = 2.5a.u.-takoa da; bestalde, ioi-bikoteek materia zeharkatu aurretik dituzten karga eta distantzia interatomikoa $Z = 1$ eta $R \approx 2$a.u. direla ere, berauek abiaduraren eta xaflen lodieraren arauerakoak izanen dira.

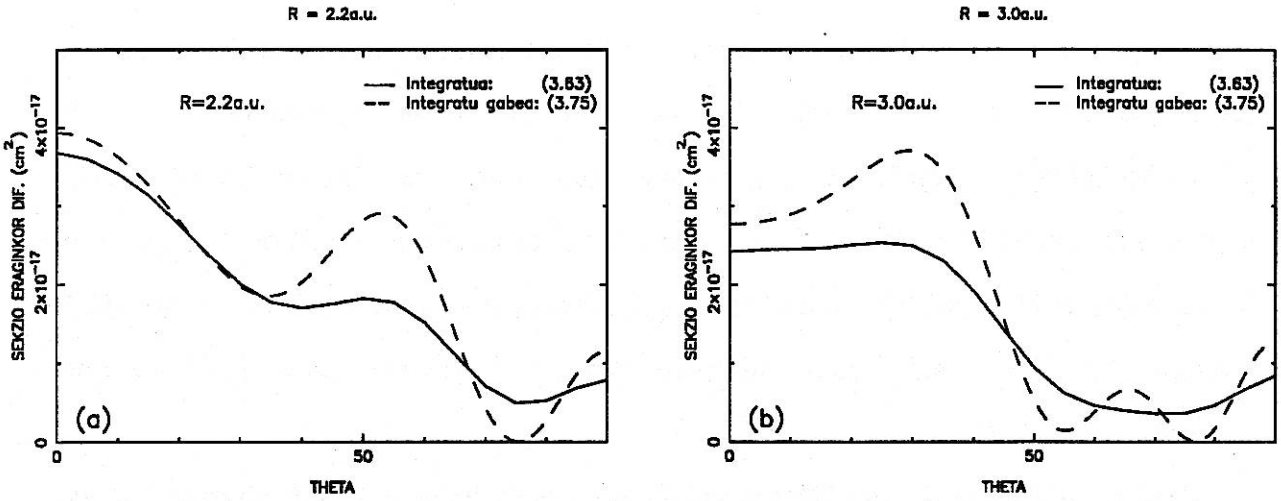
Izan ere, ioiek materia zeharkatzean elektroiak galdu eta irabazteko probabilitatea dute, eta beraien karga alda daiteke, beraz, ibilbidean barrena. Elektroi-galera eta harrapaketaren prozesuak oso aztertuak izan dira urteetan zehar[51-53], eta ioi azkarren kasuan (v > 1a.u.) honela definitu ohi da ioiaren abiaduraren arauerakoa den karga eraginkorra:

$$Z = Z_1 \left[1 - \exp\left(- v Z_1^{-2/3}\right) \right], \qquad (3.77)$$

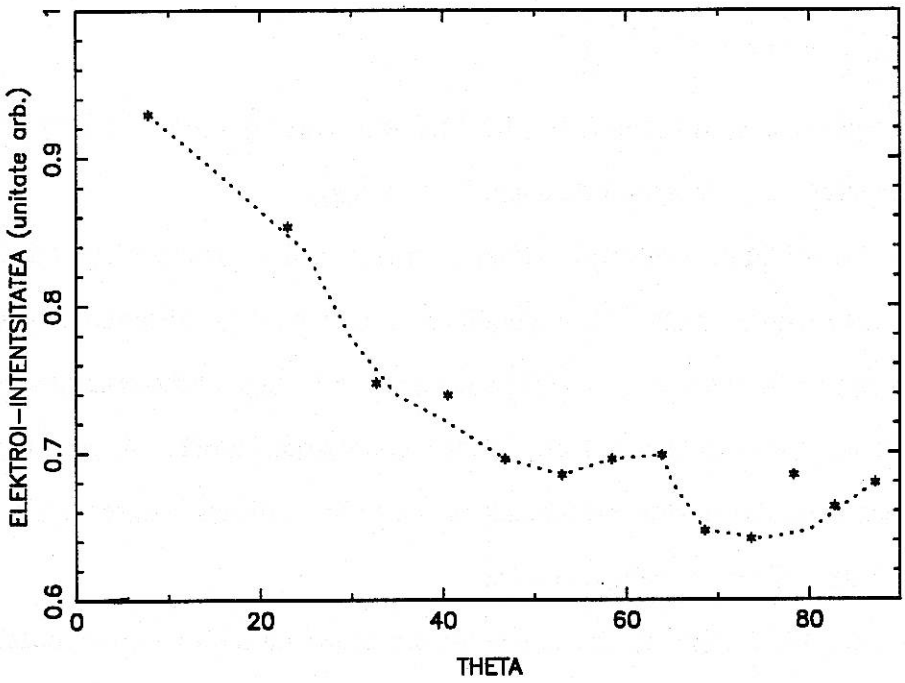
non Z_1 delakoa ioi biluziaren karga den . 4.5 MeV-tako nitrogenozko ioi dimolekularrak osotzen dituzten ioien karga eraginkorra, bada, $Z \approx 3.5$ dugu.

Nitrogenozko ioi dimolekularrak osotzen dituzten ioien arteko distantziak zurikoa zeharkatzean duen balioa, bestalde, N_2 molekularen atomoen arteko distantziaren berdintsua izango da xafla oso mehea denean (d < 100Å), baina xafla lodiagotarako areagotu egingo da, ioien arteko aldarapenaren eraginez. Horrelatan, bada, bikotea osotzen duten ioeien arteko distantzia ezberdinetarako burutu ditugu sekzio eraginkor diferentzialaren kalkuluak, R= 2.2a.u. eta R = 3.0a.u. direnean hain zuzen ere.

3.7 irudietan (3.63) nahiz (3.75) adierazpenen bidez kalkulaturiko balentzi elektroi bakoitzeko sekzio eraginkor diferentzialak erakusten dira, projektilen orientazioaren funtzioan, v = 2.5a.u eta Z = 3.5 direnean, goian aipaturiko R distantziaren balioetarako. 3.8 irudian, bestalde, Yamazaki-k karbonozko 2μg/cm^2-tako ($d \approx$ 100Å) xaflak erabiliz lorturiko emaitza experimentalak[28] erakusten dira.



3.7 irudia. (3.63) eta (3.75) sekzio eraginkor diferentzialak, projektilen orientazioaren funtzioan, $v = 2.5$a.u eta $Z = 3.5$a.u. direnean, R distantziaren zenbait baliotarako: $R = 2.2$a.u. (3.7a irudia) eta $R = 3.0$a.u. (3.7b irudia). Karbonozko zurikoari dagokion r_s parametroa kontsideratu da ($r_s = 1.53$a.u.), $\lambda_1 = 0.95$ eta $\lambda_2 = 1.15$.



3.8 irudia. Yamazaki-ren emaitza experimentalak (izartxoak), 4.5 MeV-tako nitrogenozko ioi dimolekularrak karbonozko 2μg/cm^2-tako ($d \approx 100$Å) xaflak zeharka erazten direnean. Experimentu honetan laborategiarekiko [1.95v , 2.1v] tarteko abiaduraz projektil-sortaren norabide berean ateratzen diren elektroi-kopuruak neurtu dira. Puntukako lerroa begia gidatzeko adierazi da.

Zurikoaren balentzi elektroi guztiek (3.60) adierazpeneko sekzio eraginkorra ez dute maximoa eta minimoa egiten orientazioaren balio berberetarako, eta, ondorioz, sekzio eraginkor diferentzialaren egitura leundu egiten da, zurikoaren balentzi elektroien

momentu-banaketaren eraginez, 3.8 irudiak erakusten duen erara. Bi dira, bestalde, 3.7 irudiko emaitzek erakusten dituzten ezaugarriak; sekzio eraginkor diferentziala, alde batetik, θ angeluaren zenbait baliotarako areagotu egiten da, (3.60) delakoa ere areagotu egiten den era berean, goian azaldu den bezala, eta, bestetik, θ txikitarako handiagoa bilakatzen da θ handitarako baino, sakabanaketa anizkoitzaren eraginez.

Diogun, bada, emaitza experimentalek ezaugarri berberak erakusten dituztela; izan ere, neurturiko elektroi-intentsitateak θ-rekin duen beherapenaz gain, $\theta \approx 60°$ denean gailurra erakusten du, 3.7 irudiko emaitzek erakusten duten modura; izan ere, gailurrari dagokion θ angelua R distantziaren arauerakoa da, eta R areagotzean handiagotu egiten da. Gailurraren posizioa, beraz, erabilitako zurikoaren lodieraren arauerakoa izanen da, R distantzia lodieraren arauerakoa izanen bait da, Coulomb-en leherketaren eraginez.

Experimentalki neurturiko elektroi-intentsitateak $\theta = 0°$ denean eta $\theta = 90°$ denean dituen balioen arteko zatidura, ordea, 3.7 irudiak erakutsitako sekzio eraginkorrak θ berberetarako dituen balioen arteko zatidura baino handiagoa da. Hau, berriz, sakabanaketa anizkoitzaren lehen ordenako gaiak soilik kontsideratzearen ondorioa izan daiteke, eta hurrengo urratsa, beraz, ordena altuagoko gaiak kontsideratzea izanen litzateke. Kalkulu honen konputazio-lana, berriz, handiegia izango litzateke; hala ere, kalkulua burutzeko asmotan gaude, balentzi elektroien hasierako egoerekiko integratu gabe.

Hurrengo atalean, energia txikiko elektroien difrakzioaren teorian garaturiko metodoetaz baliatzen gara, sekzio eraginkor diferentziala kalkulatzeko orduan sakabanaketa anizkoitza osorik kontsideratzeko asmotan.

3.4.Ioi-bikote azkarren eraginpeko elektroien sakabanaketa: metodo ez-perturbatiboa

Ioi-bikoteen eta solidoko elektroien arteko elkarrekintza anizkoitzak arbuia daitezkeeneko limitean, bikotea osotzen duten ioiekin interakzionatu egiten duten sakabanatu gabeko uhin erasotzaileak uhin launak ditugu, eta r_j puntuarekiko gara daitezke, beraz, uhin esferikotan, (3.24) adierazpenak erakusten duen erara. Adierazpen hau ondoko modura berridatz daiteke[55]:

$$\varphi_{k_i}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} A^0_{l m_j} j_l(k\,|r - r_j|)\, Y_{l m}(s_j) \ , \tag{3.78}$$

non

$$A^0_{l m_j} = \mathrm{e}^{\,\mathrm{i} k_i r_j}\, 4\,\pi\,\mathrm{i}^l\, Y^*_{l m}(k_i / k) \tag{3.79}$$

den, k_i delakoa elektroiak projektilarekiko duen momentua izanik, k, momentuaren modulua, eta s_j, (3.25) adierazpenekoa. Uhin sakabanatuak, orduan, (3.35) adierazpenekoak izanen lirateke, ioiek sorterazitako potentzialaren irispenetik kanpoko puntuetan, hau da,

$$\Psi^{(s)}_{k_i}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} A^0_{l m_j} \frac{\mathrm{e}^{2\,\mathrm{i}\,\delta_l} - 1}{2}\, h^{(1)}_l(k\,|r - r_j|)\, Y_{l m}(s_j) \ , \tag{3.80}$$

non δ_l direlakoak fase-lerrakuntzak diren; hortaz, bi ioietaz osoturiko agragatuaren eraginpeko elektroein sekzio eraginkor diferentziala (3.40) adierazpenekoa izango litzateke, R delakoa ioi aurrelariak ioi atzelariarekiko duen posizio-bektorea izanik.

Alabaina, ~~bi~~kotea osotzen duen ioi bakoitzarekin interakzionatu egiten duen sakabanatu gabeko uhin launak ez ezik, beronek beste ioiarekin duen interakzioaren ondorioz ateratzen den uhin sakabanatuak ere erasotzen du; azken hau, berriro, sakabanatu gabeko uhin launaren eta hasierako ioiarekiko interakzioaren ondorioz ateratzen den uhinaren arteko gainezarmenari dagokion uhin sakabanatua dugu, eta abar. r_j posizio-bektorea duen ioiarekiko uhin erasotzaile osoa honela idatz dezakegu[54-56], beraz:

$$\Psi_{k_i}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} A_{l m_j} j_l(k\,|r - r_j|)\, Y_{l m}(s_j) \ , \tag{3.81}$$

$A_{lm\,j}$ delakoa uhin erasotzaile osoaren anplitudea izanik, eta uhin sakabanatua,

$$\Psi^{(s)}_{k_i}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} A_{l m_j} \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2} h_l^{(1)}(k\,|r - r_j|)\, Y_{l m}(s_j). \qquad (3.82)$$

ioiak sorterazitako potentzialaren irispenetik kanpoko puntuetan.

Ondorioz, uhin erasotzaile osoa uhin launaren eta beste ioiarekiko elkarrekintzaren ondorioz ateratzen den uhin sakabanatuaren arteko gainezarmena denez gero, bikotea osotzen duten bi ioien arteko distantzia ioiek sorterazitako potentzial pantailatuen irispena baino handiagoa denean, uhin erasotzaile osoa honako erara berridatz dezakegu:

$$\Psi_{k_i}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} A^0_{l m_j} j_l(k\,|r - r_j|)\, Y_{l m}(s_j)$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} A_{l m_k} \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2} h_l^{(1)}(k\,|r - r_k|)\, Y^*_{l m}(k_i / k)\, Y_{l m}(s_k)\ , \qquad (3.83)$$

r_j eta r_k direlakoak bi ioiei dagozkien posizio-bektore ezberdinak izanik. r_k posizioarekiko garapena den bigarren ataleko bigarren gaia, aldiz, r_j posizioarekiko adieraz daiteke, eta, horrela, (3.81) eta (3.83) adierazpenak konparaturik, A_{lm} anplitudeak lor ditzakegu. Izan ere, zera idatz daiteke[57]:

$$h_l^{(1)}(k\,|r - r_k|)\, Y_{l m}(s_k) = \sum_{l' m'} G_{l m, l' m'}(r_j - r_k)\, j_{l'}(k\,|r - r_j|)\, Y_{l' m'}(s_j)\ . \qquad (3.84)$$

Hemen, $G_{lm,l'm'}$ direlakoak ondokoak ditugu:

$$G_{l m, l' m'}(r_j - r_k) = \sum_{l'' m''} 4\pi i^{l - l' - l''} (-1)^{m' + m''} h_{l''}^{(1)}(k\,|r_j - r_k|)\, Y_{l'' -m''}(s_{jk})\, B^l(l'' m'', l' -m')\ , \qquad (3.85)$$

non

$$s_{j k} = \frac{r_j - r_k}{|r_j - r_k|} \qquad (3.86)$$

den, eta $B^l(l''m'', l'-m')$, hiru harmoniko esferikoren arteko biderkaduraren integrala, hau da,

$$B^l(l'' m'',\ l' -m') = \int Y_{l m}(\Omega)\, Y_{l'' m''}(\Omega)\, Y_{l' -m'}(\Omega)\, d\Omega\ . \qquad (3.87)$$

(3.84) delako adierazpena (3.83)-ra eraman eta uhin erasotzaile osoaren (3.83) adierazpena (3.81) delakoarekin konparaturik, bada, hauxe lortzen da:

$$A_{l m_j} = A^0_{l m_j} + \sum_{l' m'} A_{l' m'_k} X_{l' m', l m}(r_j - r_k)\ , \qquad (3.88)$$

non

$$X_{l'm',lm}(r_j - r_k) = \sum_{l''m''} C^{l'}(l''m'', lm)\, h^{(1)}_{l''}(k|r_j - r_k|)\, \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2} \tag{3.89}$$

den, $C^{l'}(l''m'', lm)$ direlakoak ondokoak izanik:

$$C^{l'}(l''m'', lm) = 4\pi(-1)^{(l'-l''-l)} \quad (-1)^{m''+m}\, Y_{l''-m''}(s_{jk})\, B^{l'}(l''m'', l-m). \tag{3.90}$$

Bikotea osotzen duten bi ioiei dagozkien anplitude osoak, beraz, honelaxe lor daitezke:

$$(A_1, A_2) = (A_1^0, A_2^0) \begin{pmatrix} 1 & -X(R) \\ -X(-R) & 1 \end{pmatrix}^{-1}, \tag{3.91}$$

non A_1, A_2, A_1 eta A_2 direlakoak $(l_{max}+1)^2$ dimentsiodun lerro-matrizeak diren, eta $X(R)$ nahiz $X(-R)$, $(l_{max}+1)^2 \times (l_{max}+1)^2$ dimentsiodun matrize karratuak, l_{max} delakoa (3.81) eta (3.82) garapenetan kontsideraturiko momentu angeluarraren balio maximoa izanik.

Distantzia handiko limitean, (3.82) uhin sakabanatua ondoko modura idatz daiteke:

$$\Psi^{(s)}_{k_i}(r) \underset{r\to\infty}{=} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-ik_f r_j} f_j(k_i, k_f) \frac{e^{ikr}}{r}, \tag{3.92}$$

non

$$f_j(k_i, k_f) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} A_{lm_j} \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2} i^{-(l+1)} Y_{lm}(k_f / k) \tag{3.93}$$

den, $A_{lm\,j}$ direlakoak (3.91) adierazpenen bidez lorturikoak izanik. Ioi-bikotearekiko elkarrekintzaren eraginez, bada, k_f momentua lortzen duten elektroien sekzio eraginkor diferentziala ondokoa dugu:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| f_1(k_i, k_f) + e^{-ik_f \cdot R} f_2(k_i, k_f) \right|^2, \tag{3.94}$$

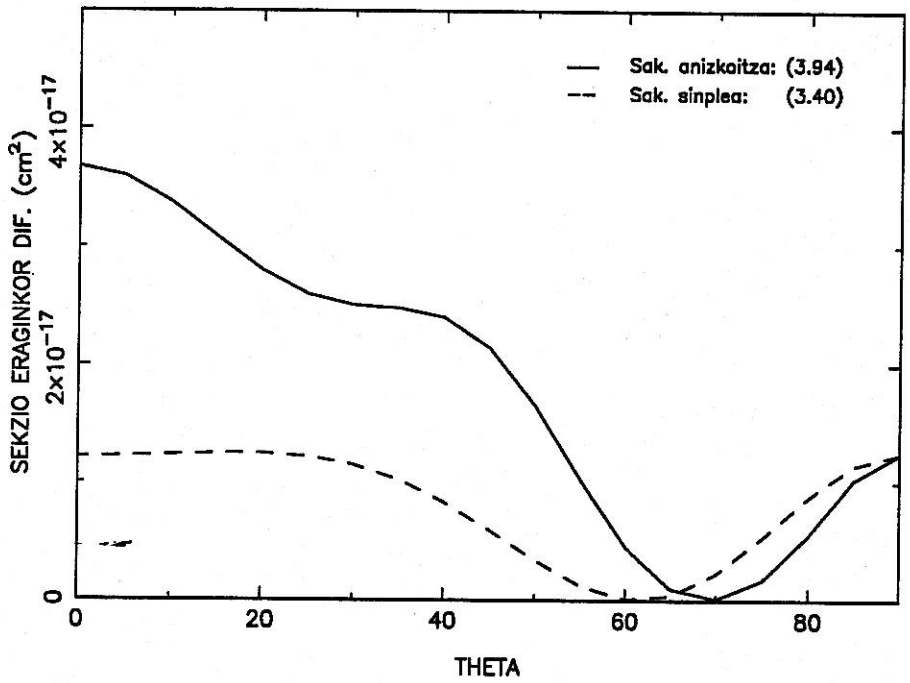
1 delakoa ioi atzelaria izanik, 2 delakoa, ioi aurrelaria, eta R, ioi aurrelariak ioi atzelariarekiko duen posizio-bektorea.

3.9 irudian (3.94) adierazpenaren bidez kalkulaturiko sekzio eraginkor diferentziala erakusten da, sakabanaketa anizkoitza arbuiatu egiten duen (3.40) adierazpenaren bidez kalkulaturikoarekin batera, ioi-bikoteen orientazioaren funtzioan, $k_i = -v$ eta $k_f = v$ izanik, Z =1, v = 1.5a.u. eta R = 2.2a.u. direnean. Kalkulu hauetan ioiek sorterazitako potentziala

(3.48) adierazpenekoa dela kontsideratu da, eta potentzial honi dagozkion fase-lerrakuntzak numerikoki kalkulatu dira, Schrödinger-en ekuazio erradiala ebatziz; bestalde, (3.93) garapenean $l_{max} = 7$ egin da. $v = 1.5$a.u. eta $R = 2.2$a.u. direneko kasua kontsideratu da soilik, v nahiz R handiagotarako l_{max} handiagoak kontsideratzea beharrezkoa izango bait litzateke, honek konputazio-lana izugarri korapilatuko lukeelarik. Diogun, bestalde, uhin sakabanatuaren (3.82) adierazpena, ioiak sorterazitako potentzialaren irispenetik kanpoko puntuetan baino ez dela baliagarria, eta kalkulu hau zilegia dugu, beraz, ondoko ezberdintza betetzen denean:

$$\frac{v}{\omega_p} < R \ , \tag{3.95}$$

ω_p delakoa zurikoaren plasmoi-maiztasuna izanik.



3.9 irudia. (3.94) adierazpenaren bidez kalkulaturiko sekzio eraginkor diferentziala, ioi-bikoteen orientazioaren funtzioan, $k_i = -v$ eta $k_f = v$ izanik, $Z = 1$, $v = 1.5$a.u., $R = 2.2$a.u. eta $l_{max} = 7$ izanik. (3.40) adierazpeneko sekzio eraginkor diferentzialak ere erakusten dira.

3.9 irudian erakutsitako emaitzak ez dira behin betikoak, zeren, esku artean ditugun abiaduretarako (3.54) potentzialaren irispena handi samarra izanik, (3.93) garapenean momentu angeluar handiagoak kontsideratzea beharrezkoa bait da. Hala ere, 3.9 irudiko

emaitza aurreko ataleko 3.4, 3.5 eta 3.7 irudietako emaitzekin zein emaitza experimentalekin bateragarria dugu. Alegia, (3.94) adierazpeneko sekzio eraginkorrak, (3.40) adierazpenekoak bezala, maximo erlatiboak erakusten ditu, (3.61) delakoa maximoa deneko θ-ren balioetarako, alde batetik, eta bestetik, elkarrekintza anizkoitzaren eraginez, sekzio eraginkorrak θ txikitarako θ handitarako baino handiagoak bilakatzen dira, experimentuek erakusten duten bezala.

Elkarrekintza anizkoitzaren eraginaren berri emateko, beraz, metodo hau erabilgarria dugu ioi-bikoteen eta elektroi-gasaren arteko elkarrekintza aztertzeko asmoz, oso handiak ez diren abiaduretarako bereziki ($v < 2.5$a.u.); izan ere, (3.93) garapenean momentu angeluar handiagoak kontsideratzeko eta lorturiko emaitzak zurikoaren balentzi elektroien hasierako egoera guztietarako integratzeko asmotan gaude, honek konputazio-lan handia eskatzen badu ere. Abiadura handitarako, bestalde, perturbazioen teoriaz balia gaitezke, aurreko atalean erakutsi den bezala.

Eranskina: Z kargadun partikula batek sorterazitako (3.48) potentzialari dagokion bigarren ordenako sakabanaketa-anplitudea

(3.48) potentziala (3.46) adierazpenera eramanez, hauxe lortzen da:

$$f_{B_2}^{0} = \frac{2Z}{\Delta^2 + \alpha^2} + \frac{2Z^2}{\pi^2} I_{1,1}(\alpha\,,\,\alpha\,;\,k_i\,,\,k_f\,;\,k)\,, \tag{E3.1}$$

non $I_{1,1}$ delakoa Dalitz-en integrala den[58,59]:

$$I_{1,1}(\alpha\,,\,\alpha\,;\,k_i\,,\,k_f\,;\,k) = \int \frac{dq}{q^2 - k^2 - i\,0^+} \frac{1}{\left(\alpha^2 + |q - k_i|^2\right)\left(\alpha^2 + |q - k_f|^2\right)}\,, \tag{E3.2}$$

hau da,

$$I_{1,1}(\alpha\,,\,\alpha\,;\,k_i\,,\,k_f\,;\,k) = \pi^2 \int_0^1 \frac{dt}{\gamma\,(\alpha^2 - 2\,i\,k\,\gamma)}\,, \tag{E3.3}$$

γ delakoa ondokoa izanik:

$$\gamma = \left[\alpha^2 + t\,(1 - t)\,|k_i - k_f|^2\right]^{1/2}\,. \tag{E3.4}$$

(E3.3) adierazpeneko integralean aldagai-aldaketa eginez gero, honako erara lor daiteke Dalitz-en $I_{1,1}$ delako integrala:

$$I_{1,1}(\alpha\,,\,\alpha\,;\,k_i\,,\,k_f\,;\,k) = \pi^2 \int_{\alpha}^{\sqrt{\alpha^2 + k^2 \sin^2(\theta/2)}} \frac{d\gamma}{\sqrt{\alpha^2 + k^2 \sin^2(\theta/2) - \gamma^2}\; k \sin(\theta/2)\,(\alpha^2 - 2\,i\,k\,\gamma)}\,, \tag{E3.5}$$

non θ delakoa $\vec{k}_i$ eta $\vec{k}_f$ bektoreek osotzen duten angelua den.

(E3.5) integrala burutu[60] eta (E3.1)-ra eramanik, (3.51) lortzen da, behin Δ eta Γ direlakoak (3.37) eta (3.52) adierazpenen bidez definituz gero.

Bibliografia

1. N. Bohr, *The penetration of atomic particles through matter*, Dans. Vidensk. Selsk. Mat.-fys. Medd., **18** no.8 (1948).
2. J. Neufeld & R.H. Ritchie, *Passage of charged particles through plasma*, Phys. Rev. **98** 1632 (1955).
3. J. Neufeld & R.H. Ritchie, *Density effect in ionization energy loss of charged particles*, Phys. Rev. **99** 1125 (1955).
4. R.H. Ritchie, *On the interaction of charged particles with plasma*, Ph. D. thesis, University of Tennessee, Knoxville, Tennessee (1959).
5. D. Bohm & D. Pines, *A collective description of electron interactions: I. Magnetic interactions*, Phys. Rev. **82** 625 (1951).
6. D. Pines & D. Bohm, *A collective description of electron interactions, II. Collective vs. individual particle aspects of the interactions*, Phys. Rev. **85** 338 (1952).
7. D. Bhom & D. Pines, *A collective description of electron interactions: III. Coulomb interactions in a degenerate electron gas*, Phys. Rev. **92** 609 (1953).
8. D. Pines, *A collective description of electron interactions: IV. Electron interaction in metals*, Phys. Rev. **92** 626 (1953). Ikus bedi ere D. Pines, *Elementary excitations in solids*, W.A. Benjamin Inc., New York, Amsterdam (1963).
9. J. Lindhard, *On the propierties of a gas of charged particles*, Dans. Vidensk. Selsk. Mat.-fys. Medd. **28** no. 8 (1954).
10. Ikus bedi D. Pines and P. Nozièrs, *Theory of quantum liquids* (Benjamin, New York, 1966).
11. V.N. Neelavathi, R.H. Ritchie & W. Brandt, *Bound electron states in the wake of swift ions in solids*, Phys. Rev. Lett. **33** 302 (1974); **33** 670E (1974); **34** 560E (1975).
12. M.H. Day, *Effect of dispersion on wake-bound electron states in metals*, Phys. Rev.B **12** 514 (1975).
13. V. N. Neelavathi & R.K. Kher, *Bound-electron state in the wake of a swift ion in solids*, Phys. Rev. B **14** 4229 (1976).

14. Z. Vager & D.S. Gemmell, *Polarization induced in a solid by the passage of fast charged particles*, Phys. Rev. Lett. **37** 1352 (1976).

15. R.H. Ritchie, W. Brandt & P.M. Echenique, *Wake potential of swift ions in solids*, Phys. Rev. B **14** 4808 (1976).

16. D.H. Jakubassa, *Dynamic screening of ions passing through solids*, J. Phys. C **10** 4491 (1977).

17. M. Day & M. Ebel, *Wake-bound states: Dispersive & surface effects*, Phys. Rev. B **19**, 3434 (1979).

18. P.M. Echenique, R.H. Ritchie & W. Brandt, *Spatial excitation patterns induced by swift ions in condensed matter*, Phys. Rev. B **20**, 2567 (1979).

19. J. Tejada, P.M. Echenique, O.H. Crawford & R.H. Ritchie, *Wake shifts in electron states on swift ions passing through solids*, Nucl. Instr. and Meth. **170**, 249 (1980).

20. P.M. Echenique & R.H. Ritchie, *Wake-binding energies in the random-phase approximation*, Phys. Rev. B **21** 5854 (1980).

21. F. Guinea, F. Flores & P.M. Echenique, *Charge states for protons moving in an electron gas*, Phys. Rev. Lett. **47** 604 (1981); F. Guinea, F. Flores & P.M. Echenique, *Charge states for H and He moving in an electron gas*, Phys. Rev. B **25** 6109 (1982).

22. R.H. Ritchie & P.M. Echenique, *The wake of charged particles in condensed matter*, Philos. Mag. **45** 347 (1982).

23. A. Mazarro, P.M. Echenique & R.H. Ritchie, *Charged-particle wake in the random-phase approximation*, Phys. Rev. B **27** 4117 (1983).

24. W. Brandt, A. Ratowski & R.H. Ritchie, *Energy loss of swift proton clusters in solids*, Phys. Rev. Lett. **33** 1325 (1974); E **25** 130 (1975).

25. D.S. Gemmell, J. Remilleux, J. C. Poizat, M. J. Gaillard, R.E. Holland & Z. Vager, *Evidence for an aligment effect in the motion of swift ion clusters through solids*, Phy. Rev. Lett. **34** 1420 (1975).

26. S. Datz, C. D. Moak, O.H. Crawford, M.F. Krouse, P. F. Dittner, J. Gómez del Campo, J.A. Biggerstaff, P.F. Miller, P. Huelpund & H. Knudsen, *Resonant coherent excitation of channeled ions*, Phys. Rev. Lett. **40** 843 (1978).

27. F. Bell, H.D. Betz, H. Pank & W. Stehling, *Evidence for dynamical screening of projectile ions pas sing through solids.*, J. Phys. B**9** L443 (1976).

28. Y. Yamazaki, *Wakes, Dynamic screening*, Proc. NATO Meeting: Interaction of charged particles with solids and surfaces, Alacant, Spain, May 7-18 (1990).

29. J.M. Pitarke, P.M. Echenique & R.H. Ritchie, *Electron density fluctuactions induced by ion clusters in condensed matter*, Nucl. Instrum. Methods B **40/41** 333 (1989).

30. J.M. Pitarke, P.M. Echenique & R.H. Ritchie, *Dependence of knock-on collision electron emission on the orientation of swift diclusters in solids* (Argitaratzekotan).

31. J.M. Pitarke & P.M. Echenique, *Multiple scattering effects on electron emission by swift diclusters in solids*, (Argitaratzekotan).

32. B.I. Lundqvist, *Single-particle spectrum of degenerate electron gas: II. Numerical results for electrons coupled to atoms*, **6** 206 (1967). Ikus bedi ere L. Hedin & S. Lundquist, *Effects of electron-electron and electron-phonon interactions on the one-electron states of solids*, Solid State Physics **23** 1 (H. Ehrenreich & D. Turbull, eds.), Academic Press, New York, (1969).

33. J.C. Inkson, *Many body theory of solids: An introduction* (Plenium Press, New York, London, 1984), 81. orr., 9. atala.

34. P.M. Echenique, F. Flores & R.H. Ritchie, *Dynamic screening of ions in condensed matter*, Solid State Physics, Vol 43 (H. Ehrenreich & D. Turbull, eds., Academic Press, New York, 1969), 229. orr..

35. P.M. Echenique, *Aspectos de estela en la interacción de partículas cargadas con medios materiales*, Ph.D. thesis, Universidad Autónoma de Barcelona, 1977.

36. P.M. Echenique & R.H. Ritchie, *Ioi lasterren wake-potentziala egoera solidoan*, Elhuyar **7** 1 (1979).

37. A.W. Overhauser, *Simplified theory of electron correlations in metals*, Phys. Rev. B **3** 1888 (1971).

38. L.D. Landau & E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics. Volume 3: Quantum mechanics (non relativistic theory)*, 3rd. ed, Oxford, England: Pergamon Press (1977) 113 orr..

39. M. Abramowitz & I.A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover, New York (1965).
40. M.C. Li, *Scattering by a nonspherical potential*, J.Math. Phys. **12** 936 (1971).
41. M.C. Li, *Scattering by two charged centers*, J.Math. Phys. **13** 1381 (1972)
42. D.I. Abramov & L.V. Komarov, *Method of phase shifts for scattering by potentials admitting separation of variables in spheroidal coordinates*, Theor. Mat. Fiz. **13** 209 (1972).
43. M.C. Li, *Scattering by a spin-dependent spheroidal potential* **14** 1358 (1973).
44. M.C. Li, *Spheroidal analysis of Coulomb scattering*, J.Math. Phys. **15** 570 (1974).
45. L.I. Ponomarev & L.N. Somov, *The wave functions of continuum for the two-center problem in Quantum Mechanics*, Journal of Comp. Phys. **20** 183 (1976).
46. N.F. Mott & H.S.W. Massey, *The theory of atomic collisions*, Oxford University Press.
47. C.J. Joachain, *Quantum Collision Theory*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1975, 68. orr..
48. B.A. Lippman & J. Schwinger, *Variational principles for scattering processes*, Phys. Rev. **79** 469 (1950).
49. L.I. Shiff, *Quantum Mechanics* , Mc Graw-Hill, New York, 1955, 8. atala.
50. Ikus 47, 177. orr..
51. H. Betz, *Charge states and charge-changing cross sections of fast heavy ions penetrating through gaseous and solid media.* Rev. Mod. Phys. **44** 465 (1972).
52. R. Shakeshaft & L. Spruch, *Mechanisms for charge transfer (or for the capture of any light particle) at asymptoticallly high impact velocities*, Rev. Mod. Phys. **51** 369 (1979).
53. Y. Ohtsuki, *Charged beams interaction with solids* (Taylor & Francis Ltd, London, New York, 1983), 6. atala.
54. J.B. Pendry, *Theory of averaged low energy electron diffraction*, J. Phys. C **5** 2567 (1972).
55. J.B. Pendry, *Low Energy Electron Diffraction* , Academic Press, London, 1974.
56. M. A. Van Hove & S.Y. Tong, *Surface crystallography by LEED*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York (1979).

57. Ikus 55, 272 orr.

58. P.M. Morse & H. Fesbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGrawHill, New York (1953), 9. atala.

59. Ikus 47, 678.orr..

60. I.S. Gradshtein & J.M. Ryzhik, *Table of integrals, series and products*, Academic Press, London (1965).

4. KANALIZATURIKO IOIEN ERRADIAZIO-EMISIOAREN BIDEZKO ELEKTROI-HARRAPAKETA

4.1.Sarrera

Gauza jakina da, materia zeharkatzean ioi azkarren karga aldatu egiten dela, ioiaren eta materia osotzen duten atomoen arteko elkarrekintzaren eraginez; hau da, ioiak zurikoaren elektroiak harrapatu eta galdu egiten ditu, etengabe[1,2]. Ioi azkarren elektroi-harrapaketaren berri ematen duten prozesuak bi dira, nagusiki: elektroi-harrapaketa mekanikoa (MEC)[3] eta erradiazio-emisioaren bidezko elektroi-harrapaketa (REC)[4].

MEC delako prozesuan ioiak zurikoaren atomoei loturiko elektroi lotuak harrapatu egiten ditu, erradiazioa sorterazteke. REC prozesuan, aldiz, ioiak zurikoaren balentzi elektroiak harrapatzen ditu nagusiki, erradiazioa igortzeaz batera. Alabaina, azken prozesu honi dagokion sekzio eraginkorra, elektroi-harrapaketa mekanikoari dagokiona baino askoz txikiagoa da; hortaz, bada, MEC prozesua aspaldiko urteotan oso aztertua izan den bitartean, REC prozesuaren berri experimentala ez da oraintsu arte jaso.

Erradiazio-emisioaren bidezko elektroi-harrapaketaren berri experimentala 1972. urtean jaso zen lehen aldiz[5], energia handiko sufre, kloro eta bromozko ioiak materian zehar pasarazi ondoren. Ordutik hona, lan teoriko zein experimental ugari burutu da, prozesu honen azterketa eginez[6,12], elektroi-harrapaketaren bidez igorritako erradiazioaren neurketa experimentala zurikoaren elektroien momentu-banaketaren berri jasotzeko baliagarria izan bait daiteke.

REC prozesuan sorterazitako erradiazioa, aldiz, txikia da, ioi azkarrek materia zeharkatzean sorterazitako erradiazio osoarekin konparaturik, eta REC experimentuak interpretatzea, beraz, korapilatsu bilaka daiteke. Alabaina, ioiak solido monokristalinoetan zehar kanalizatzen direnean, era honetako prozesuen interpretazioa argiagoa izan daiteke, Appleton eta bestek azaldu zuten bezala[10-12].

Partikula kargatuak solidoetan zehar kanalizatzearen ondorioak hirurogeietako hamarkadan aztertu ziren lehenengo aldiz, teorikoki zein experimentalki, kanalizaturiko partikula kargatuak zurikoaren atomoetatik gutxienez 0.1 edo 0.2Å-etako distantzietara pasatzen direla aurkituz, partikulon energia zenbait MeV-takoa izanik ere[13,14]. Horrelatan, bada, baldintza hauetan jaurtikitako ioien kasuan igorritako X erradiazio karakteristikoaren intentsitatea txikiagoa da, ioiak zorizko norabideetan jaurtikitzen direnean baino, eta REC

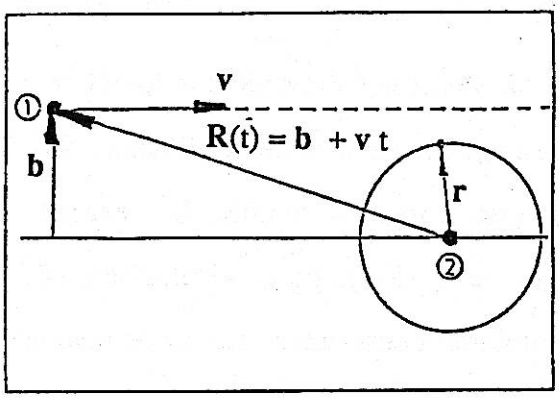
erradiazioa erlatiboki garrantzitsuagoa bilakatzen da, beraz. Are gehiago, kanalizaturiko ioiek karga-egoera izoztuak dituztela erakutsi da, eta kanalizazioaren kasuan talka hurbilak ezin gerta daitezkeenez, erradiazio-emisioaren bidezko elektroi-harrapaketa garrantzitsuagoa bihurtzen da[15-17], baldintza arruntetan MEC prozesuak nagusiak izanagatik.

Azken urteotan, bada, kanalizaturiko ioi azkarren erradiazio-emisioaren bidezko elektroi-harrapaketa prozesuen zenbait azterketa teoriko burutu da[12,17]. Atal honetan, azterketa teoriko hauek hedatu egiten dira, eta REC prozesuaren talka-parametroarekiko menpekotasunaren azterketa burutzen da, bai eta zurikoaren elektroi lotuen harrapaketaren ekarpenaren azterketa ere. Izan ere, zurikoaren balentzi bandaren eta ioi higikor biluzien egoera hidrogenoideen arteko trantsizioari dagozkion energiak, oraintsu buruturiko experimentuetan neurturiko REC erradiazioaren energiak baino handiagoak direla aurkitu da[16]. Atal honetan emaitza experimental horien interpretazioa ematen da, REC defizit hau zurikoaren elektroi lotuen harrapaketaren ekarpenarekin nahiz lorratz-potentzialak ioiaren egoera elektronikoen energiaren gainean duen eraginarekin erlazionatuz[18,19].

Diogun, azkenik, siliziozko xafla meheetan zehar pasarazten diren sufrezko ioi biluziak kontsideratuko ditugula atal honetan, gure eredu teorikoan kalkulaturiko REC erradiazioaren espektroaren gailur-energiak, erdi-zabalerak zein sekzio eraginkorrak 16 erreferentziaren emaitza experimentalekin konparatzeko asmoz.

4.2. REC probabilitateak

Biz solido batetan zehar pasarazten den ioi azkar eta biluzia, Z_1, $\boldsymbol{v}$ eta $\boldsymbol{b}$ direlakoak ioiaren karga, abiadura eta talka-parametroa izanik, hurrenez hurren, 4.1 irudian adierazten den bezala, eta kontsidera dezagun ioiak fotoi baten igorpenaren bidez elektroi bat harrapatu egiten dueneko prozesua.



4.1 irudia. 1 delako ioiaren ibilbide zuzena, ioia 2 delako atomoa dagoeneko zurikoa zeharkatzen ari delarik, *b* delakoa talka-parametroa izanik.

Sistemaren hasierako eta bukaerako egoerak deskribatzeko ortogonalak ez diren uhin-funtzio hurbilduak erabiliz lorturiko REC prozesuaren sekzio eraginkorrak, aukeraturiko erreferentzi sistema inertzialaren arauerakoak dira; izan ere, hala lorturiko sekzio eraginkorra masa-zentruaren erreferentzialarekiko soilik da zuzena, Shakeshaft-ek eta Spruch-ek erakutsi duten legez[20]. Hortaz, esku artean dugun REC prozesuan parte hartzen duen ioiaren masa elektroiarenarekin konparaturik oso handia dela emanik, ioiarekin batera doan erreferentzi sistema kontsideratuko dugu lehenengo, lorturiko emaitzak laborategiko erreferentzialarekiko transferitzeko, ondoren.

Eremu elektromagnetikoa perturbazio txikia bait litzen kontsideraturik eta perturbazioen lehen ordenako teoriaz baliaturik, REC prozesuari dagokion trantsizioaren probabilitate-anplitudea ondoko erara lor dezakegu:

$$a_{if}^{(1)} = \frac{1}{\mathrm{i}} \int \mathrm{d}t < f \mid H' \mid i > \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\omega t} \ , \qquad (4.1)$$

non $|i>$ eta $|f>$ direlakoek hasierako eta bukaerako egoerak adierazten dituzten, hurrenez hurren, eta H' delakoa elektroiaren eta eremu elektromagnetikoaren arteko elkarrekintzari dagokion hamiltondarra den[21],

$$H' = \frac{i}{c} A \cdot \nabla \ , \tag{4.2}$$

A delakoa eremu elektromagnetikoaren potentzial bektorea izanik[22],

$$A(r\ ,\ t) = \frac{1}{i} \sum_{k\ ,\ \lambda} \left(\frac{2\pi c^2}{EV} \right)^{1/2} \lambda_k \, e^{i k.r} \, (b^{+}_{-k\lambda} - b_{k\lambda}) \ . \tag{4.3}$$

Azken adierazpen honetan, λ_k delakoa k momentudun fotoiaren polarizazio-bektorea dugu, zein espazio askean hedapen-norabidearekiko perpendikularra den, E, fotoiaren energia, hots, $E = ck$, c delakoa argiaren abiadura izanik, V, eremu elektromagnetikoaren normalizazio-bolumena, eta $b_{k\lambda}$, $b^{+}_{k\lambda}$ direlakoak, k momentudun eta λ_k polarizazio-bektoredun fotoiaren deusestatze- eta sortze-operatzaileak, hurrenez hurren. Bestalde,

$$\omega = E + E_f - E_i - \frac{1}{2} v^2 \ , \tag{4.4}$$

non E, E_f eta E_i direlakoak igorritako fotoiaren energia eta harrapaturiko elektroiaren egoera egonkorren hasierako eta bukaerako energiak diren, berauek zurikoarekiko eta ioiarekiko adierazirik, hurrenez hurren, eta v, ioiaren abiadura.

Eremu elektromagnetikoaren potentzial bektorearen (4.3) adierazpena (4.2)-ra eramanez gero, H' hamiltondarraren matrize-elementua lor daiteke:

$$<f|H'|i> = \left(\frac{2\pi}{EV} \right)^{1/2} < \varphi_f(r) \, | \, e^{-i k.r} \, \lambda_k \cdot \nabla \, | \, \varphi_i(r + b + v t) \, e^{-i v.r} > , \tag{4.5}$$

ioiarekin batera doan erreferentzialarekiko, $\varphi_i(r)$ eta $\varphi_f(r)$ direlakoak elektroiaren hasierako eta bukaerako egoera egonkorrei dagozkien uhin-funtzioak izanik, berauek zurikoarekiko eta ioiarekiko adierazirik, hurrenez hurren. Uhin-funtzio horien Fourier-en transformazioak eginez, bestalde, (4.5) adierazpena honelaxe berridatz dezakegu:

$$<f|H'|i> = i \left(\frac{2\pi}{EV} \right)^{1/2} \int dq \ \lambda_k \cdot (q - v) \ \tilde{\varphi}^{*}_f(q - v - k) \ \tilde{\varphi}_i(q) \ e^{i q \cdot (b + v t)} , \tag{4.6}$$

non

$$\varphi_{i,f}(q) = (2\pi)^{-3/2} \int dr\, e^{-i q \cdot r}\, \varphi_{i,f}(r) \tag{4.7}$$

den.

(4.6) matrize-elementua (4.1)-ra eramanez, bada, hauxe dugu:

$$a_{if}^{(1)} = \frac{(2\pi)^{3/2}}{(E V)^{1/2}} \int dq\, \delta(\omega + q \cdot v)\, \lambda_k \cdot (q - v)\, e^{i q \cdot b}\, \tilde{\varphi}_f^*(q - v - k)\, \tilde{\varphi}_i(q) \,. \tag{4.8}$$

Ondorioz, zurikoaren $\varphi_i(r)$ uhin-funtziodun elektroia ioiaren $\varphi_f(r)$ uhin-funtziodun egoera elektronikora pasatzeaz batera k momentudun eta λ_k polarizazio-bektoredun fotoia igortzeko dagoen probabilitatea, fotoiaren energi unitateko eta angelu solido unitateko, ondokoa dugu, perturbazioaren bigarren ordenako eta ordena altuagoko gaiak arbuiaturik:

$$\left(\frac{d^3\gamma}{dE\, d\Omega}\right)_{b,\lambda} = \frac{E^2}{c^3} |f|^2 \,, \tag{4.9}$$

non

$$f = E^{-1/2} \int dq\, \delta(\omega + q \cdot v)\, \lambda_k \cdot (q - v)\, e^{i q \cdot b}\, \tilde{\varphi}_f^*(q - v - k)\, \tilde{\varphi}_i(q) \tag{4.10}$$

den.

Hasierako uhin elektronikoa q momentudun uhin launa edo uhin coulombiarra denean, bereziki, energi eta angelu solido unitateko emisio-probabilitatea ondoko modura ere lor daiteke:

$$\left(\frac{d^3\gamma}{dE\, d\Omega}\right)_{\lambda} = \frac{E T}{2\pi c^3} \left| \int dr\, \varphi_f^*(r)\, e^{-i k \cdot r}\, \lambda_k \cdot \nabla\, \varphi_i(r) \right|^2 \delta(\omega') \,, \tag{4.11}$$

non T delakoa elakrrekintzaren denbora den, $\varphi_i'(r)$, elektroiaren hasierako uhin-funtzioa, ioiarekiko adierazirik, hots, $(q - v)$ momentudun uhin-funtzioa, eta

$$\omega' = E + E_f - E_i' \,, \tag{4.12}$$

E_i' delakoa elektroiak harrapatua izan aurretik ioiarekiko duen energia izanik. Diogun, (4.11) emisio-probabilitatea talka-parametroaren independentea dela.

Elektroi harrapatuaren bukaerako egoera ioi biluziaren energia txikieneko egoera (K orbitala) deneko kasu berezian, hauxe dugu[23]:

$$\varphi_f(r) = \left(\alpha^3 / \pi\right)^{1/2} e^{-\alpha r} , \tag{4.13}$$

non

$$\alpha = \left(-2 E_f\right)^{1/2} \tag{4.14}$$

den.

Ioiak materia zeharkatzean sorterazten duen potentziala, aldiz, ez da Coulomb-en potentzial biluzia, zurikoaren elektroiek pantailaturiko potentziala baino, hots, lorratz-potentziala. Izan ere, zurikoaren elektroi-gasaren erantzuna lineala dela emanik, ingurune polarizatuak ioiaren posizioan sorterazten duen potentziala ondokoa dugu[24,25]:

$$\lim_{r \to 0} \left[\Phi(r) - \frac{Z_1}{r} \right] = - \frac{\pi Z_1 \omega_p}{2 v} , \tag{4.15}$$

non $\Phi(r)$ delakoa ioiak sorterazten duen lorratz-potentzial osoa den, Z_1, ioi biluziaren karga, v, abiadura, eta ω_p, elektroi-gasaren plasmoi-maiztasuna,

$$\omega_p = \left(3 / r_s^3\right)^{1/2} , \tag{4.16}$$

r_s delakoa elektroi-gasa osotzen duen elektroi bakoitzari dagokion esferaren erradioa izanik, unitate atomikoetan neurtua. Horrelatan, bada, ioiaren energia txikieneko egoera elektronikoaren energia ondokoa dugu:

$$E_f = - \frac{1}{2} Z_1^2 + \frac{\pi Z_1 \omega_p}{2 v} . \tag{4.17}$$

4.2. Solidoaren elektroi lotu baten harrapaketa

Solidoaren elektroien hasierako uhin-funtzioa ondoko orbitalaren bidez adieraz daiteke, oso hurbilketa arruntean, kanalizaturiko ioiaren kanalaren zentrualdean:

$$\varphi_i(r) = \left(\beta^3 / \pi\right)^{1/2} e^{-\beta r} , \tag{4.18}$$

non

$$\beta = \left(-2 E_i\right)^{1/2} \tag{4.19}$$

den, E_i delakoa elektroiaren sarearekiko lotura-energia izanik, zein zenbait elektronvoltatakoa izan ohi bait da, eta r, ioiaren eta sarearen atomorik hurbilenaren arteko distantzia.

(4.13) eta (4.18) direlako uhin-funtzioen Fourier-en transformatuak ondokoak ditugu:

$$\hat{\varphi}_f(q) = (2\pi)^{3/2} \frac{(\alpha / \pi)^{5/2}}{\left(\alpha^2 + q^2\right)^2} \tag{4.20}$$

eta

$$\tilde{\varphi}_i(q) = (2\pi)^{3/2} \frac{(\beta / \pi)^{5/2}}{\left(\beta^2 + q^2\right)^2} . \tag{4.21}$$

(4.20) eta (4.21), bada, (4.10)-era eramanez eta (4.10) anplitudea (4.9)-ra eramanez, hauxe aurkitzen dugu:

$$\left(\frac{d^3\gamma}{dE\, d\Omega}\right)_{b,\lambda} = \frac{2^6 (\alpha\beta)^5 E}{\pi^4 c^3} \left| \int dq\, \delta(\omega + q \cdot v) \frac{\lambda_k \cdot (q - v)\, e^{i q \cdot b}}{\left(\alpha^2 + q'^2\right)^2 \left(\beta^2 + q^2\right)^2} \right|^2 , \tag{4.22}$$

non q' delakoa ondokoa den:

$$q' = q - v - k . \tag{4.23}$$

q bektorea v bektorearen norabidean eta honekiko norabide perpendikularrean deskonposatuz, hots, $q = (Q , q_z)$ eginez, eta polarizazio-bektoreetarako batuz, k momentudun fotoia igorria izateko dagoen energi unitateko eta angelu solido unitateko probabilitatea ondoko erara lor dezakegu[19]:

$$\left(\frac{d^3\gamma}{dE\,d\Omega}\right)_b = \frac{2^6(\alpha\beta)^5 E}{\pi^4 c^3 v^2}\sum_{\lambda}\left|\int dQ \frac{\lambda_k\cdot\left(Q - v - (\omega/v^2)\,v\right)e^{iQ\cdot b}}{\left[\alpha^2+\left(Q' - (\omega/v^2)\,v\right)^2\right]^2\left[\beta^2+Q^2+\omega^2/v^2\right]^2}\right|^2 , \quad (4.24)$$

non Q' delakoa ondokoa den:

$$Q' = Q - v - k \ . \quad (4.25)$$

(4.24) delakoa, bestalde, talka-parametroarekiko integratuz, hauxe lortzen dugu:

$$\frac{d^3\gamma}{dE\,d\Omega} = \frac{2^8(\alpha\beta)^5 E}{\pi^2 c^3 v^2}\int dQ \frac{\left|k\wedge\left(Q - v - (\omega/v^2)\,v\right)\right|^2/k^2}{\left[\alpha^2+\left(Q' - (\omega/v^2)\,v\right)^2\right]^4\left[\beta^2+Q^2+\omega^2/v^2\right]^4} , \quad (4.26)$$

ondoko berdintza betetzen bait da[26]:

$$\sum_{\lambda}\left|\lambda_k\cdot\left(Q - v - (\omega/v^2)\,v\right)\right|^2 = \left|k\wedge\left(Q - v - (\omega/v^2)\,v\right)\right|^2/k^2 , \quad (4.27)$$

λ_k delakoa k bektorearekiko perpendikularra izanik.

Hurbilketa dipolarra

Hurbilketa dipolarra eginez, hots, fotoiaren momentua v-rekin konparaturik oso txikia dela emanez gero, honako era honetara berridatz dezakegu (4.24), behin laborategiko erreferentzialera transformatu ondoren:

$$\left(\frac{d^3\gamma}{dE\,d\Omega}\right)_b = \frac{2^6(\alpha\beta)^5 E}{\pi^4 c^3 v^2}\sum_{\lambda}\left|\int dQ \frac{\lambda_k\cdot(Q+Q_\alpha)\,e^{iQ\cdot b}}{\left(\alpha^2+Q^2+Q_\alpha^2\right)^2\left(\beta^2+Q^2+Q_\beta^2\right)^2}\right|^2 , \quad (4.28)$$

non Q_α eta Q_β direlakoak ondokoak diren:

$$Q_\alpha = \frac{1}{v^2}\left[-E_f + E_i - \frac{1}{2}v^2 - E(1 - v\cos\theta/c)\right]v \quad (4.29)$$

eta

$$Q_\beta = \frac{1}{v^2}\left[- E_f + E_i + \frac{1}{2} v^2 - E\,(1 - v \cos\theta / c)\right] \boldsymbol{v} \,. \qquad (4.30)$$

Bereziki, projektil-sortaren norabide berean igorritako erradiazioaren kasuan, hauxe dugu:

$$\left(\frac{d^3\gamma}{dE\,d\Omega}\right)_b (\theta = 0) = \frac{2^8 (\alpha\beta)^5 E}{\pi^2 c^3 v^2} \left| \int_0^\infty dQ \frac{Q^2 J_0(Q b)}{\left(\alpha^2 + Q^2 + Q_\alpha^2\right)^2 \left(\beta^2 + Q^2 + Q_\beta^2\right)^2} \right|^2 , \qquad (4.31)$$

non θ delakoa $\boldsymbol{k}$ eta $\boldsymbol{v}$ bektoreek osotzen duten angelua den, eta J_0, Bessel-en zero ordenako funtzioa[27]. $\theta >> 1$ denean, ostera, (4.24) adierazpeneko integrakizunaren lehen batugaiaren ekarpena arbuiagarria da, bigarren batugaiaren ekarpenarekin konparaturik, $Q \neq 0$ deneko balioetarako integrala oso txikia bilakatzen bait da; ondorioz, hauxe idatz daiteke:

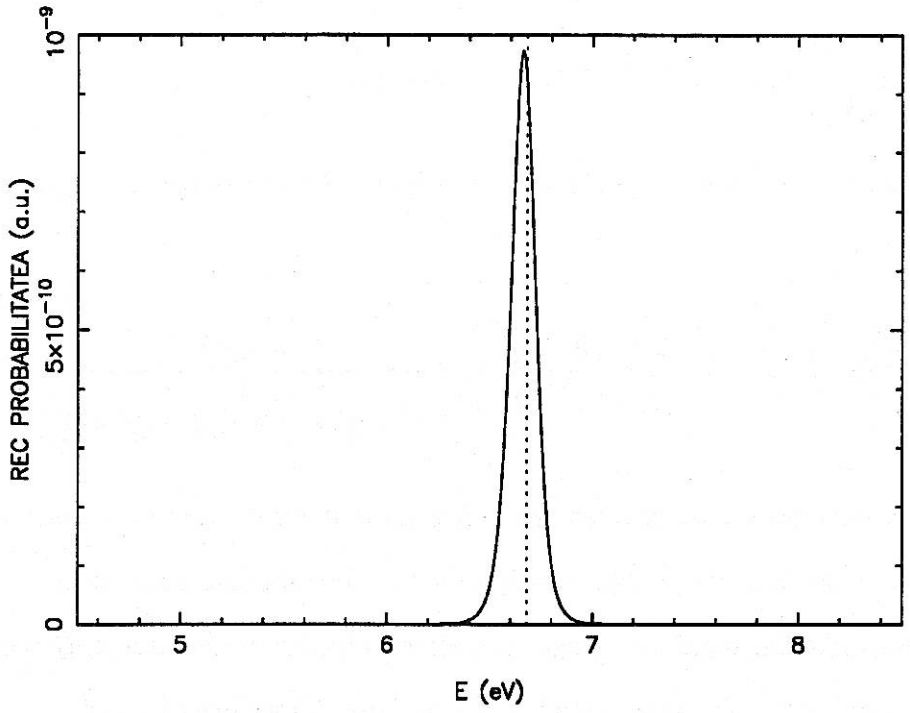
$$\left(\frac{d^3\gamma}{dE\,d\Omega}\right)_b (\theta >> 1) \approx \frac{2^8 (\alpha\beta)^5 E \sin^2\theta}{\pi^2 c^3} \left| \int_0^\infty dQ \frac{Q J_0(Q b)}{\left(\alpha^2 + Q^2 + Q_\alpha^2\right)^2 \left(\beta^2 + Q^2 + Q_\beta^2\right)^2} \right|^2 . \qquad (4.32)$$

4.2 irudian, (4.32) ekuazioaren bidez kalkulaturiko REC espektroa erakusten da, zurikoa b = 1.5Å-etako talka-parametroaz zeharkatzen duten 160MeV-tako sufrezko ioi biluzien kasuan, θ = 46.5° denean; elektroi harrapatuaren bukaerako egoera egonkorraren energia (4.17) adierazpenekoa dela kontsideratu da, silizioaren elektroi-dentsitate osoak kanalaren zentrualdean ($b \approx$ 1.5Å) duen balioari dagokion r_s parametrorako ($r_s \approx$ 2.15a.u.).

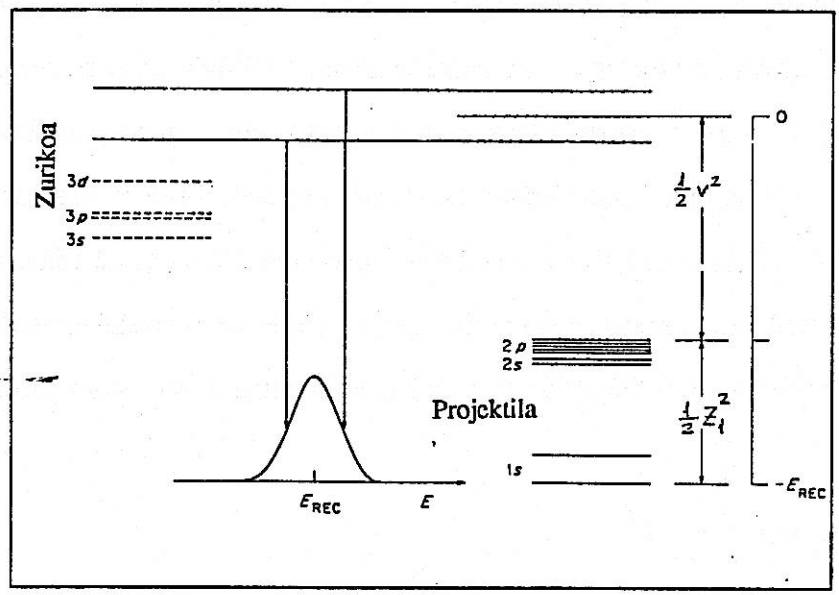
Hutsaren mailaren energiaren eta zurikoaren elektroienaren arteko ezberdintasuna nahiz ingurunearen polarizazioari dagokion E_f energiaren handipena arbuiatuz gero, REC energia ondokoa dugu:

$$E_{REC} = \frac{1}{2} v^2 + \frac{1}{2} Z_1^2 \,, \qquad (4.33)$$

4.3 irudiak erakusten duen legez. 4.2 irudiko REC espektroaren gailur-energia, bada, (4.33) adierazpeneko REC energia baino txikixeagoa da, ingurunearen polarizazioak ioiaren egoera hidrogenoideen energiaren gainean duen eraginagatik. Bestalde, REC energiaren berdinak ez diren energia handiago nahiz txikiagotarako ere izango ditugu emisio-probabilitate ez-nuluak, zurikoaren elektroien momentu-banaketaren eraginez.



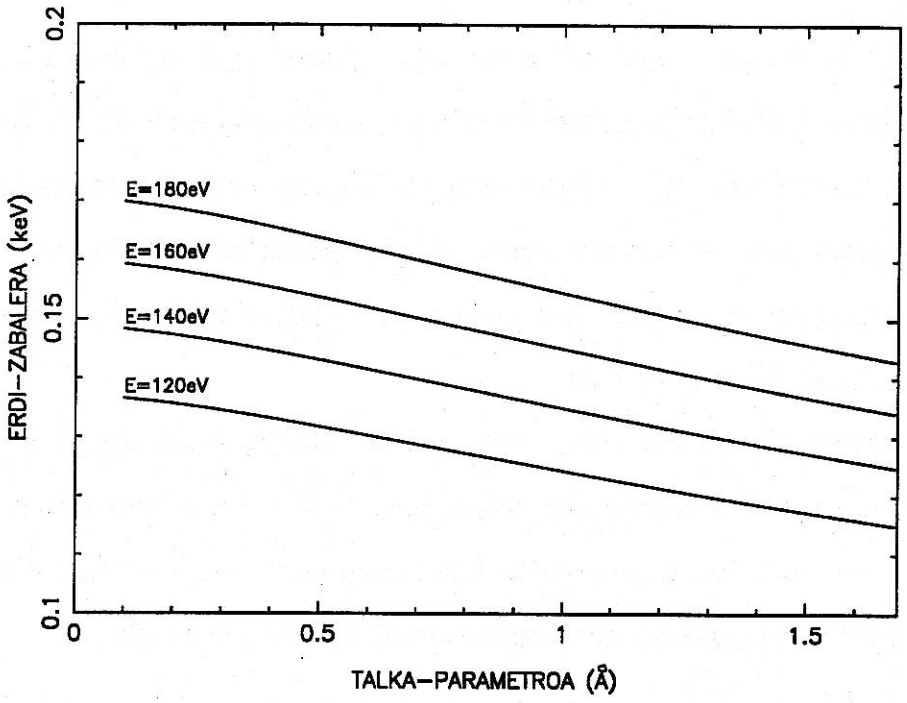
4.2 irudia. (4.32) ekuazioaren bidez kalkulaturiko energi eta angelu solido unitateko REC probabilitateak, igorritako erradiazioaren energiaren funtzioan, jaurtikitako 160MeV-tako sufrezko ioi biluzien kasuan. $b = 1.5$Å, $\theta = 46.5°$ eta $r_s = 2.15$a.u.. Lerro bertikalak (4.33) adierazpeneko REC energia adierazten du.



4.3 irudia. Erradiazio-emisioaren bidezko elektroi-harrapaketa, ioiarekin batera doan erreferentzialarekiko. 12 erreferentziatik hartua.

4.4 irudian, (4.32) ekuazioaren bidez kalkulaturiko REC erdi-zabalerak, hots, REC probabilitatea beronen balio maximoaren erdia deneko energiaren balioen arteko kendurak

erakusten dira, talka-parametroaren funtzioan, ioi erasotzaileen zenbait energiatarako.



4.4 irudia. (4.32) ekuazioaren bidez kalkulaturiko REC erdi-zabalerak, talka-parametroaren funtzioan, ioi erasotzaileen zenbait energiatarako. $\theta = 46.5°$.

Irudi honek igorritako erradiazioaren energi banaketa zabaldu egiten dela erakusten du, talka-parametroa txikiagotu egitean; diogun, bestalde, emaitza hau dentsitate lokaleko hurbilketa egitearekin bateragarria dela, zeren, hurbilketa honetan, harrapatuak izan daitezkeen zurikoaren elektroien momentu-banaketa talka-parametro txikitarako talka-parametro handitarako baino zabalagoa izanen bait litzateke.

4.3. Dentsitate lokaleko hurbilketa

REC experimentuetan erabili ohi diren solido kristalinoen egitura elektronikoak korapilatsuak dira eta kalkulatzeko zailak. Are gehiago, egitura elektronikoak zehaztasun osoz ezaguturik ere, aurreko atalean kontsideraturiko orbitalaren erako egoera elektronikoen uhin-funtzioak adieraztea eta berauek erabiliz REC probabilitateak konputatzea zaila eta luzeegia izango litzateke. Horrelatan, bada, atal honetan, REC kalkuluak burutu ahal izateko, dentsitate lokaleko hurbilketa egiten dugu.

Dentsitate lokaleko hurbilketan, ioiek zurikoa zeharkatzean topo egiten duten bolumen-elementu bakoitza elektroi-gas independentea bait litzen kontsideratzen dugu, elektroi-gas honen dentsitatea bolumen-elementu horretako elektroi-dentsitate osoa izanik. Horrela, bada, zurikoaren $r_s(r)$ eta $E_F(r)$ parametro lokalak definitzen ditugu:

$$r_s(r) = \left[\frac{3}{4\,\pi\, n(r)} \right]^{1/3} , \tag{4.34}$$

non $n(r)$ delakoa r posizio-bektoreko puntuan elektroi-dentsitate osoak duen balioa den, eta

$$E_F(r) = \frac{(9\,\pi/4)^{2/3}}{2\,r_s^2(r)} \approx \frac{1.84}{r_s^2(r)} . \tag{4.35}$$

Ondoren, hurbilketa honetan lorturiko REC probabilitateen batezbesteko estatistikoa burutzen dugu, ioi kanalizatuaren ibilbide posible guztietarako integraturik. Talka-parametroaren balio bakoitzeko REC probabilitatea kalkulatzeko orduan, bestalde, harrapatuak izan daitezkeen elektroien hasierako uhin-funtziotzat uhin launak kontsideratuko ditugu lehenengo, eta Coulomb-en uhinak, ondoren.

Uhin launak

Dentsitate lokaleko hurbilketan definituriko elektroi-gas lokala osotzen duten uhin-funtzioak kalkulatzeko orduan ioiaren potentzial elektrikoa arbuiatuz gero, harrapatua izan daitekeen elektroiaren hasierako uhin-funtzioa uhin launa dugu:

$$\varphi_i(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i q . r} , \tag{4.36}$$

non q delakoa elektroiak laborategiko erreferentzialarekiko duen momentua den, q, ondokoa izanik:

$$q = \left[2 (E_i + E_F)\right]^{1/2} , \tag{4.37}$$

E_i delakoa elektroiak hutsaren mailarekiko duen energia delarik, lan-funtzioa arbuiatuz gero, eta E_F, (4.35) adierazpeneko Fermi-ren energia lokala.

(4.36) uhin-funtzioaren Fourier-en transformatua ondokoa dugu:

$$\varphi_i(q') = \frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{V}} \delta(q' - q) ; \tag{4.38}$$

beraz, (4.20) eta (4.38) direlakoak (4.10)-era eramanez eta (4.10) anplitudea (4.9)-ra eramanez, ondokoa lortzen dugu, behin igorritako erradiazioaren polarizazio-bektoreetarako nahiz elektroi-harrapatuaren hasierako egoeretarako batu ondoren:

$$\frac{d^3\gamma}{dE\, d\Omega} = \frac{2^5 \alpha^5 E T}{c^3 V} \sum_i \frac{|k \wedge (q - v)|^2 / k^2}{\left[\alpha^2 + (q - v - k)^2\right]^4} \delta(\omega + q . v) , \tag{4.39}$$

non T delakoa elkarrekintza-denbora den, eta energiaren kontserbazioaren berri ematen duen Dirac-en delta funtzioaren argumentua, ondokoa:

$$\omega + q . v = E + E_f + E_F - \frac{1}{2} (q - v)^2 . \tag{4.40}$$

(4.39) adierazpena, elektroiaren ioiarekiko hasierako uhin funtzioa, hots,

$$\varphi_i(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i (q - v) . r} \tag{4.41}$$

eta (4.13) delakoa (4.11)-ra eramanez ere lortzen da, behin polarizazio-bektoreetarako zein elektroi-harrapatuaren hasierako egoeretarako batu ondoren.

Atomoetatik hurbil dauden puntuetan definituriko Fermi-ren energia lokala, urrun dauden puntuetan baino handiagoa da; hortaz, elektroien solidoarekiko lotura-energiak handiagoak ditugu eta igorritako erradiazioaren energia, berriz, txikiagoa, elektroi-harrapaketa atomoetatik hurbil dauden puntuetan gertatzen denean, (4.40) adierazpenak erakusten duen erara.

Energi eta angelu solido unitateko DIMFPa, orduan, honela lor dezakegu:

$$\frac{d\mu}{dE\,d\Omega}=\frac{2^5\,\alpha^5\,E}{c^3\,v\,V}\sum_i\frac{|k\wedge(q-v)|^2/k^2}{\left[\alpha^2+(q-v-k)^2\right]^4}\,\delta(\omega+q\,.\,v)\;. \tag{4.42}$$

Elektroien hasierako uhin-bektoreak izan dezakeen balio bakoitzari k-espazioan dagokion bolumena, $\Delta k = (2\pi)^3/V$ da; hortaz, bada, $V\to\infty$ deneko limitean batukariaren ordez elektroi-gasaren Fermi-ren esferara hedaturiko integrala eginez, (4.42) adierazpena honako era honetara berridatz daiteke, behin laborategiko erreferentzialera transformatu ondoren[19]:

$$\frac{d\mu}{dE\,d\Omega}=\frac{\alpha^5\,E}{2\pi^3\,c^3\,v^2}\int_{q_{min}}^{q_{max}}dq\,q\int_0^{2\pi}d\varphi\,\frac{\left[(q\,\mu-v)\sin\theta-q\,v\cos\theta\cos\varphi\right]^2+v^2\,q^2\sin^2\varphi}{\left[E_F+E'\left(1-\frac{q}{c}\rho+\frac{v}{c}\cos\theta+\frac{E'}{2c^2}\right)\right]^4}\;, \tag{4.43}$$

ondoko baldintza betetzen denean,

$$E_1-E_f-2\sqrt{E_1E_F}\le E'\le E_1-E_f+2\sqrt{E_1E_F}\;, \tag{4.44}$$

eta zero, bestela, E_1 delakoa ondokoa izanik:

$$E_1=\frac{1}{2}v^2\;. \tag{4.45}$$

(4.43) adierazpenean, bestalde, q_{min}, q_{max}, μ, ν, ρ eta E' direlakoak ondokoak ditugu:

$$q_{min}=\sqrt{2\,(E_f+E_F+E')}-\sqrt{2E_1}\;, \tag{4.46}$$

$$q_{max}=\min\left(\sqrt{2E_F}\,,\sqrt{2(E_f+E_F+E')}+\sqrt{2E_1}\right), \tag{4.47}$$

$$\mu=\frac{1}{q\,v}\left[\frac{1}{2}q^2-(E_f+E_F+E')+E_1\right], \tag{4.48}$$

$$\nu=(1-\mu^2)^{1/2}\;, \tag{4.49}$$

$$\rho=\mu\cos\theta+\nu\sin\theta\cos\varphi \tag{4.50}$$

eta

$$E'=E\,(1-v\,\cos\theta/c)\;. \tag{4.51}$$

Hurbilketa dipolarra eginez gero, (4.43) adierazpena ondoko erara berridatz daiteke:

$$\frac{d\mu}{dE\,d\Omega}=\frac{\alpha^5\,E}{4\pi^2\,c^3}\,\frac{C_1\,(E_{max}-E_{min})+C_2\,(E_{max}^2-E_{min}^2)+C_3\,(E_{max}^3-E_{min}^3)}{E_1\,(E_F+E')^4}\;, \tag{4.52}$$

non C_1, C_2, C_3, E_{min} eta E_{max} direlakoak ondokoak diren:

$$C_1 = \frac{(E_f + E_F + E' - E_1)^2}{2E_1}(\sin^2\theta - 2\cos^2\theta) + 4(E_f + E_F + E')\sin^2\theta \ , \qquad (4.53)$$

$$C_2 = -\frac{E_f + E_F + E' + E_1}{2E_1}(\sin^2\theta - 2\cos^2\theta) \ , \qquad (4.54)$$

$$C_3 = \frac{1}{6E_1}(\sin^2\theta - 2\cos^2\theta) \ , \qquad (4.55)$$

$$E_{min} = \frac{1}{2}q_{min}^2 \qquad (4.56)$$

eta

$$E_{max} = \frac{1}{2}q_{max}^2 \ . \qquad (4.57)$$

(4.43) DIMFPa igorritako erradiazioaren emisio-norabide guztietarako integratuz gero, honako hau lortzen dugu:

$$\frac{d\mu}{dE} = \frac{2^4 \alpha^5 E}{3\pi c^3 v^2} \frac{(E_f + E_F + E)(E_{max} - E_{min})}{(E_F + E)^4} \ . \qquad (4.58)$$

Bereziki, (4.39) adierazpeneko bigarren ataleko batukarian $q = 0$ deneko hasierako egoera soilik kontsideraturik eta Fermi-ren energiaren balioa arbuiaturik, birkonbinaketa-prozesuari dagokion sekzio eraginkor osoa lor daiteke, behin igorritako erradiazioaren energietarako nahiz emisio-norabideetarako integratuz gero, hau da,

$$\sigma = \frac{2^6}{3}\frac{1}{c^2}\frac{2\pi}{c}\frac{(-v_f)^{5/2}(v + v_f)^{1/2}}{v^3} \ , \qquad (4.59)$$

non v_f eta v direlakoak elektroi harrapatuaren bukaerako maiztasuna eta igorritako erradiazioaren maiztasuna diren, hurrenez hurren, $1/c^2$, elektroiaren erradio klasikoa, eta $2\pi/c$, elektroiaren Compton-en uhin-luzera.

Uhin coulombiarrak

Harrapatuak izan daitezkeen zurikoaren elektroiek ioiaren Coulomb-en potentziala dutela

kontsideraturik, elektroien hasierako uhin-funtzioa potentzial honi dagokion Schrödinger-en ekuazioaren energia positiboko uhin-funtzioa dugu, uhin coulombiarra alegia. Berau uhin partzialetan heda daiteke[28] (ikus Eranskina):

$$\varphi_i(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{q\,r} \sum_{l=0}^{\infty} (2\,l+1)\, \mathrm{i}^{\,l}\, \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\,\delta_l} F_l(q\,,r)\, P_l(\cos\theta)\ , \tag{4.60}$$

edo, ioiarekin batera doan erreferentzialarekiko adierazirik,

$$\varphi_i(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{q'\,r} \sum_{l=0}^{\infty} (2\,l+1)\, \mathrm{i}^{\,l}\, \mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\,\delta_l} F_l(q',r)\, P_l(\cos\theta')\ , \tag{4.61}$$

non δ_l direlakoak Coulomb-en fase-lerrakuntzak diren, F_l, Coulomb-en funtzio esferiko erregularrak, P_l, Legendre-ren polinomioak, θ eta θ', q eta q' bektoreek r-rekin osotzen duten angelua, eta

$$q' = q - v\ . \tag{4.62}$$

Hurbilketa dipolarra eginik eta hurbilketa honetan (4.61) garapenaren $l \neq 1$ momentu angeluarreko uhin partzialek emisio-probabilitatean duten ekarpena nulua dela kontutan izanik, ondoko era honetara lor dezakegu energi eta angelu solido unitateko emisio-probabilitatea, behin igorritako erradiazioaren polarizazio-bektoreetarako nahiz elektroi-harrapatuaren hasierako egoeretarako batu ondoren (ikus Eranskina):

$$\frac{\mathrm{d}^3\gamma}{\mathrm{d}E\,\mathrm{d}\Omega} = \frac{2^6\,\pi\,\alpha^6\,E\,T}{c^3\,V} \sum_i \frac{|k \wedge (q-v)|^2\, f\left(\sqrt{-E_f/(E_f+E_F+E)}\right)/k^2}{(q-v)^3\left[\alpha^2+(q-v)^2\right]^3}\ \delta(\omega'), \tag{4.63}$$

non ω' delakoa (4.12) adierazpenekoa den, eta

$$f(x) = \frac{\mathrm{e}^{-4\,x\,\tan^{-1}(1/x)}}{1-\mathrm{e}^{-2\,\pi\,x}}\ . \tag{4.64}$$

Horrelatan, bada, DIMFPa ondoko modu honetara lor daiteke, behin laborategiko erreferentzialera transformatu ondoren[19]:

$$\frac{\mathrm{d}\mu}{\mathrm{d}E\,\mathrm{d}\Omega} = \frac{\alpha^6\,E}{2^{3/2}\,\pi\,c^3} \frac{C_1(E_{max}-E_{min}) + C_2(E_{max}^2-E_{min}^2) + C_3(E_{max}^3-E_{min}^3)}{E_1(E_f+E_F+E')^{3/2}(E_F+E)^3} f\left(\sqrt{-E_f/(E_f+E_F+E')}\right), \tag{4.65}$$

non C_1, C_2, C_3, E_{min} eta E_{max} direlakoak (4.53), (4.54), (4.55), (4.56) eta (4.57) ekuazioetan emandakoak diren, hurrenez hurren, eta E', hots, igorritako erradiazioaren ioiaren

erreferentzialarekiko energia, (4.51) adierazpenak emandakoa.

(4.65) adierazpeneko energi eta angelu-solido unitateko DIMFPa igorritako erradiazioaren emisio-norabide guztietarako integratuz, bestalde, honela lortzen dugu energi unitateko DIMFPa:

$$\frac{d\mu}{dE}=\frac{2^{7/2}\,\alpha^6\,E}{3\,c^3}\,\frac{(E_{max}-E_{min})\,f\left(\sqrt{-E_f/(E_f+E_F+E)}\right)}{E_1\,(E_f+E_F+E)^{1/2}\,(E_F+E)^3}\,. \qquad (4.66)$$

Bereziki, (4.63) adierazpeneko bigarren ataleko batukarian $q = 0$ deneko hasierako egoera soilik kontsideraturik eta Fermi-ren energiaren balioa arbuiaturik, Bethe-Salpeter-en sekzio eraginkorra lortzen da, behin igorritako erradiazioaren energietarako nahiz emisio-norabideetarako integratuz gero, hau da[29,30],

$$\sigma=\frac{2^7\,\pi}{3}\,\frac{1}{c^2}\,\frac{2\,\pi}{c}\,\frac{(-\nu_f)^3}{(\nu+\nu_f)\,\nu^2}\,f\left(\sqrt{-\nu_f/(\nu+\nu_f)}\right)\,, \qquad (4.67)$$

non ν_f eta ν direlakoak elektroi harrapatuaren bukaerako maiztasuna eta igorritako erradiazioaren maiztasuna diren, hurrenez hurren.

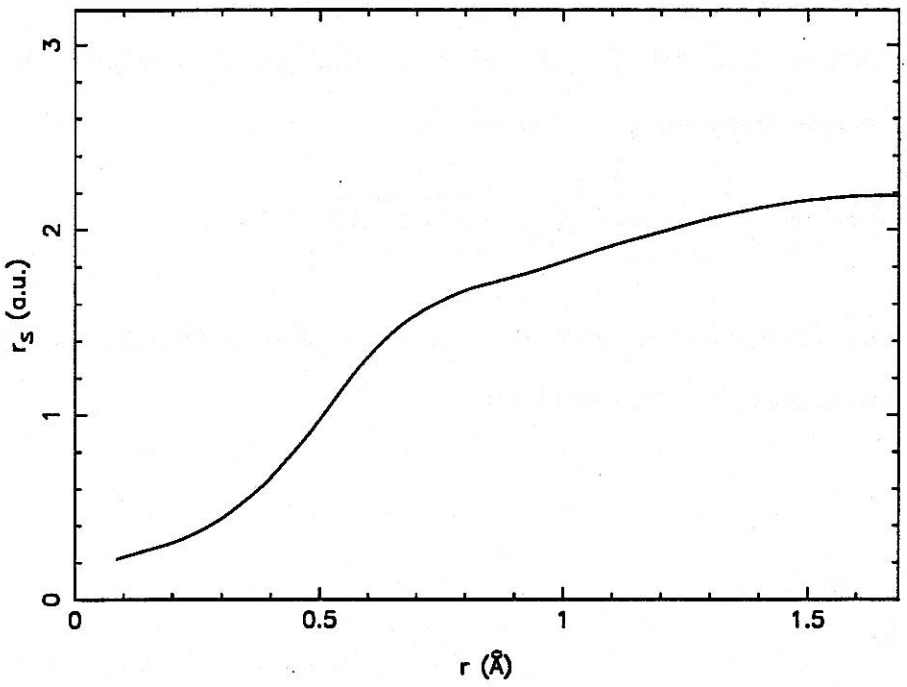
Batezbesteko estatistikoa

Emaitza experimentalen interpretazioa emateko asmotan, REC probabilitateek igorritako erradiazioaren energiarekiko duten menpekotasuna aztertu beharra daukagu, behin emisioaren norabidea finkatuz gero. Hortaz, bada, energi eta angelu solido unitateko DIMFPak kalkulatuko ditugu. Hauek (4.43), (4.52) eta (4.65) adierazpenen bidez kalkula ditzakegu, solidoaren bolumen-elementu bakoitzeko, dentsitate lokaleko hurbilketan.

Kanalizaturiko ioiaren DIMFP lokalaren batezbesteko estatistikoa, orduan, ondoko erara lortuko dugu, behin ioiak b_{min} baino handiagoak diren talka-parametro guztiei dagozkien ibilbide zuzenetan barrena higitzeko probabilitate berbera duelako hipotesia eginez gero[12,18,19]:

$$\left\langle \frac{d\mu}{dE\,d\Omega} \right\rangle = \frac{3}{r_{ws}^3} \int_{b_{min}}^{r_{ws}} dr\, r\,(r-b_{min})\,\frac{d\mu}{dE\,d\Omega}\left[E_F(r)\right]\,, \qquad (4.68)$$

non r_{ws} delakoa zurikoaren Wigner-Seitz-en esferaren erradioa den, eta integrakizunean azaltzen den DIMFP lokala, (4.43), (4.52) edo (4.65) ekuazioaren bidez lorturikoa, $E_F(r)$ delakoa (4.35) adierazpenean definituriko Fermi-ren energia lokala izanik. Honetarako, bestalde, zurikoaren atomo batekiko r distantziaren arauerako elektroi-dentsitate osoa kalkulatu da lehenengo, Wigner-Seitz-en muga baldintzak erabilirik eta Hartree-Fock-en programa erlatibista batetaz baliaturik[31], ondoren r_s eta E_F parametro lokalak lortzeko. 4.5 irudian honela kalkulaturiko r_s parametro lokala erakusten da, r-ren funtzioan, siliziozko zurikoaren kasuan.

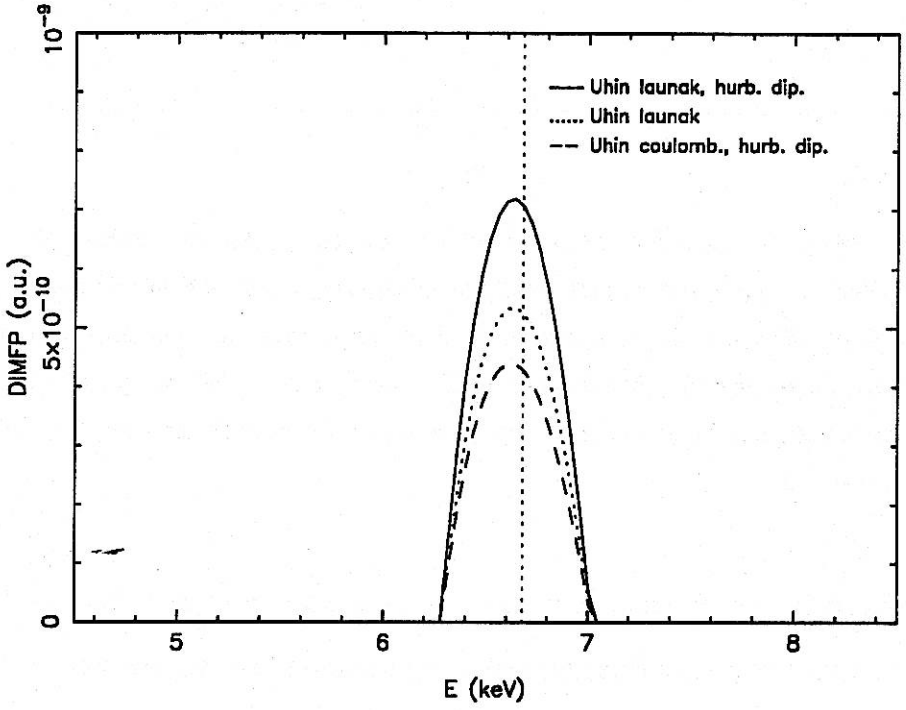


4.5 irudia. Elektroiaren erradio baliokide lokala, Wigner-Seitz-en gelaska barruko posizioaren funtzioan, silizioaren kasuan.

Ondoren, 100-200MeV-tako energia duten sufrezko ioi biluziak siliziozko zurikoak kanalizatzean igorritako elektroi-harrapaketaren bidezko erradiazioaren espektroak, gailur-energiak, erdi-zabalerak eta sekzio eraginkorrak kalkulatzen dira, projektil-sortaren norabidearekin 46.5°-tako angelua osotzen duen norabidean igorria den erradiazioaren kasuan. Honela lorturiko emaitza teorikoak 16 erreferentziaren emaitza experimentalekin konparatzen ditugu.

REC gailur-energiak: energiaren defizita

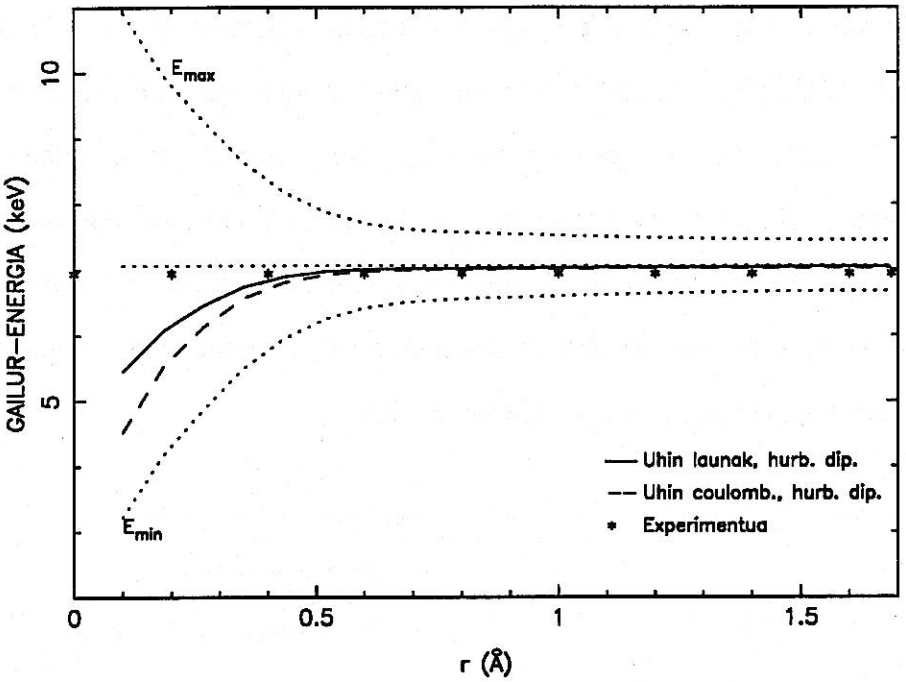
4.6 irudian (4.43), (4.52) eta (4.65) adierazpenetako DIMFP lokalak erakusten dira, igorritako erradiazioaren energiaren funtzioan, jaurtikitako projektilak 160MeV-takoak direnean eta berauek atomoetatik 1.5Å-etako distantziara higitzen direnean. Irudi honek, hurbilketa dipolarra erabiltzeak REC probabilitateen energiaren gaineko menpekotasunean eragiten ez duela erakusten du, probabilitateen magnitudea pixka bat aldatzen bada ere. Bestalde, energia txikitarako, hasierako uhin elektronikoak uhin coulombiarrak direla kontsideratuz gero lorturiko REC probabilitateak uhin launak kontsideratz lorturikoak baino erlatiboki handiagoak dira, hau oso efektu txikia dela ere; diogun, ordea, talka-parametro txikiagotarako efektu hau garrantzitsuagoa bilakatzen dela.



4.6 irudia. (4.43) (puntukako lerroa), (4.52) (lerro jarraia) eta (4.65) (zatikako lerroa) adierazpenetako DIMFP lokala, igorritako erradiazioaren energiaren funtzioan, projektilen energia 160MeV-takoa denean. Kalkulu hauetan r = 1.5Å delako distantziari dagokion 3.5 irudiko r_s parametro lokala kontsideratu da, Fermi-ren energia eta (4.17) adierazpeneko bukaerako energia kalkulatzeko orduan. Puntukako lerro bertikalak (4.33) adierazpeneko REC energia adierazten du.

Halaber, uhin coulombiarren kasuan gailur-energiak uhin launen kasuan baino

txikixeagoak dira, 4.7 irudiak ere erakusten duen bezalaxe. Irudi honetan gailur-energien eboluzioa erakusten da, r distantziaren funtzioan, igorritako erradiazioaren energiak izan ditzakeen balio maximo eta minimoen eboluzioarekin batera.

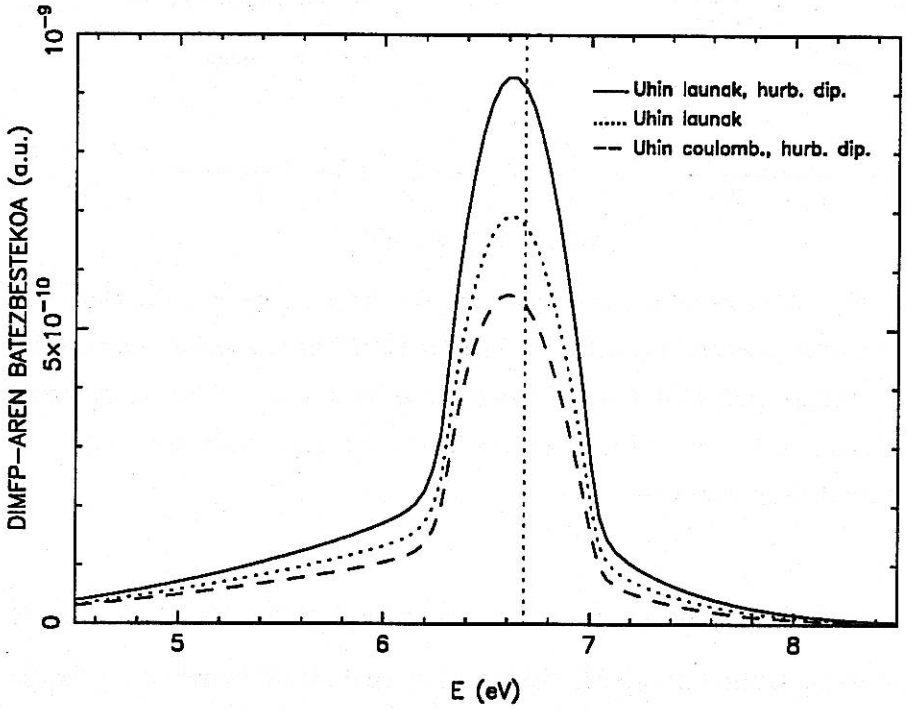


4.7 irudia. (4.52) (lerro jarraia) eta (4.65) (zatikako lerroa) adierazpenen bidez kalkulaturiko REC espektroen gailur-energien eboluzioa, r distantziaren funtzioan, projektilen energia 160MeV-takoa denean. r-ren balio bakoitzeko 3.5 irudiko r_s parametro lokala kontsideratu da, Fermi-ren energia eta elektroiaren bukaerako energia kalkulatzeko orduan. Puntukako lerro horizontalak (4.33) adierazpeneko REC energia adierazten du, eta puntukako lerro kurbatuek, igorritako erradiazioaren energiaren balio maximo eta minimoa, eta izartxoek, gailur-energia experimentala.

Igorritako erradiazioaren energiaren balio maximo eta minimoa, zurikoaren Fermi-ren elektroi baten harrpaketaren ondorioz igorritako erradiazioaren energia maximo eta minimoa ditugu; Fermi-ren elektroien harrapaketari dagozkion REC probabilitateak, bestalde, elektroien hasierako momentuaren norabide guztietarako integraturik, REC probabilitatea (4.33) adierazpeneko energiarako izango genuke maximoa, ioiaren lorratz-potentzialaren eragina arbuiatuz gero. Alabaina, energia txikiagoko elektroien harrapaketari dagokion REC probabilitatearen gailur-energia txikiagoa izango da, eta honen eragina r txikitarako egingo da nabaria, 4.7 irudian ikusten den bezala, distantzia txikitarako Fermi-ren energia lokala handiagoa bilakatzen bait da. Ioiaren lorratz-potentzialaren eraginez, bestalde, igorritako

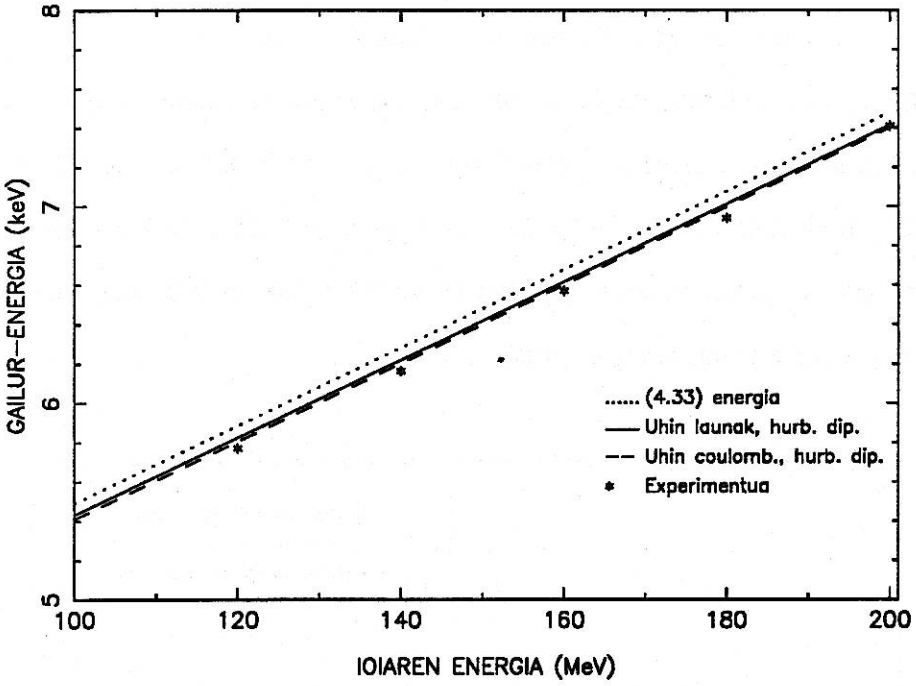
erradiazioaren energia ere txikiagoa bilakatzen da, r txikitarako bereziki.

4.8 irudian (4.68) adierazpeneko DIMFParen batezbesteko estatistikoa erakusten da, igorritako erradiazioaren energiaren funtzioan, b_{min} = 0.1Å denean eta silizioan zehar kanalizaturiko projektilak 160MeV-tako sufrezko ioiak direnean; (4.68) kalkulatzean 4.5 irudian adierazitako r_s parametroei dagozkien DIMFP lokalak erabili dira, berauek (4.43), (4.52) edo (4.65) adierazpenen bidez lorturik.



4.8 irudia. (4.68) adierazpeneko DIMFParen batezbesteko estatistikoa, igorritako erradiazioaren energiaren funtzioan, projektilen energia 160MeV-takoa denean; b_{min} = 0.1Å. (4.68) adierazpeneko integralaren integrakizuna (4.43) (puntukako lerroa), (4.52) (lerro jarraia) eta (4.65) (zatikako lerroa) adierazpenen bidez kalkulatu da, behin r bakoitzeko 4.5 irudiko r_s parametro lokala kontsideratuz gero. Puntukako lerro bertikalak, (4.33) adierazpeneko REC energia adierazten du, 4.6 irudian bezala.

4.8 irudiko espektroen gailur-energiak 4.6 irudiko espektroenak baino txikixeagoak dira; hau, r txikitarako gerta daitekeen elektroi-harrapaketaren eraginaren ondorioa da, $r <$ 1.5Å-etako distantzietarako gailur-energiak txikiagotu egiten bait dira, 4.7 irudian erakutsi den legez. 4.9 irudian, (4.68) adierazpeneko DIMFParen gailur-energien eboluzioa adierazten da, jaurtikitako projektilen energiaren funtzioan, talka-parametro minimoa 0.1Å-etakoa deneko kasurako, gailur-energia experimentalen eboluzioarekin batera.

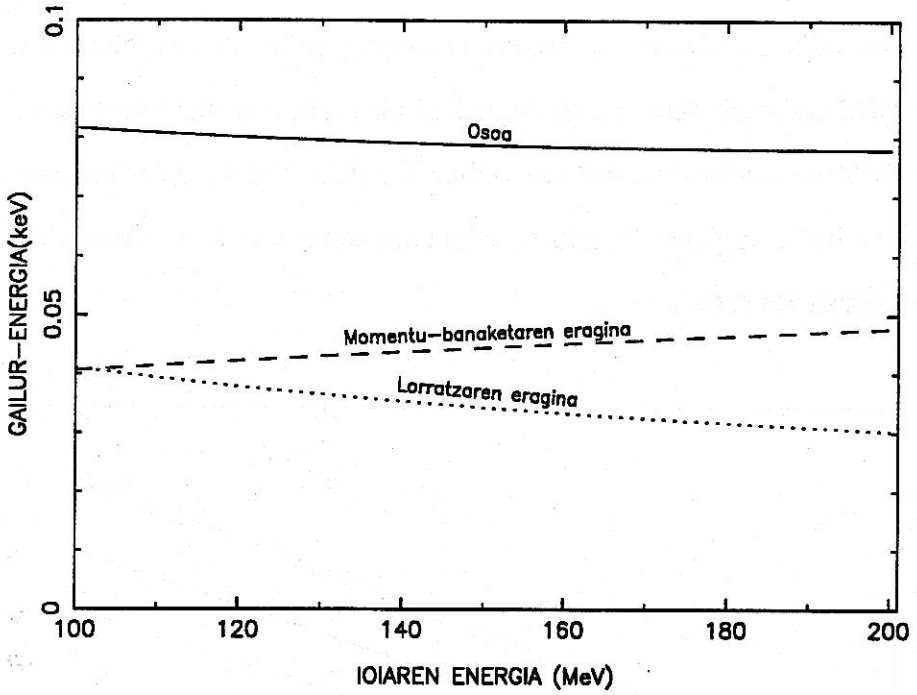


4.9 irudia. (4.68) adierazpenaren bidez kalkulaturiko REC espektroen gailur-energien eboluzioa, projektilen energiaren funtzioan, talka-parametroaren zenbait baliotarako. DIMFP lokalak kalkulatzeko orduan (4.52) (lerro jarraia) eta (4.65) (zatikako lerroa) erabili dira, r-ren balio bakoitzeko 3.5 irudiko r_s parametro lokala kontsideraturik. Puntukako lerroak (4.33) adierazpeneko REC energia adierazten du, eta gailur-energia experimentala izartxoen bidez adierazten da.

Era honetara kalkulaturiko gailur-energiak projektilen energia guztietarako (4.33) adierazpeneko energia baino txikiagoak direla erakusten du irudi honek; are gehiago, lorturiko gailur-energien eta (4.33) energien arteko ezberdintasuna 80eV-takoa da, gutxi gorabehera, eta hau experimentalki aurkituriko defizitarekin batera dator, defizit experimentala pixka bat handixeagoa bada ere. Diogun, hurbilketa dipolarra erabiltzeak ez duela emaitza hauetan inongo eraginik; uhin funtzio coulombiarrak erabiliz gero, bestalde, gailur-energiaren defizita uhin launak erabiliz lorturikoa baino handixeagoa da, 4.9 irudian ikus daitekeen bezala.

Dentsitate lokaleko hurbilketan aurkituriko REC energiaren defizitaren jatorria, bada, bikoitza dugu. Alde batetik, kanalizaturiko ioien talka-parametro txikitarako gertatzen den elektroi-harrapaketaren eraginez gailur-energiak txikiagoak bilakatzen dira, r txikitarako momentu-banaketak zabalagoak bait dira; bestetik, elektroi harrapatuaren bukaerako lotura-energiak handiagoak bilakatzen dira, ioiaren lorratz-potentzialaren eraginez, talka-parametro txikitarako bereziki. 4.10 irudian bi ekarpen hauek bereizturik erakusten dira,

ioien energiaren funtzioan, $b_{min} = 0.1$Å deneko kasuan.



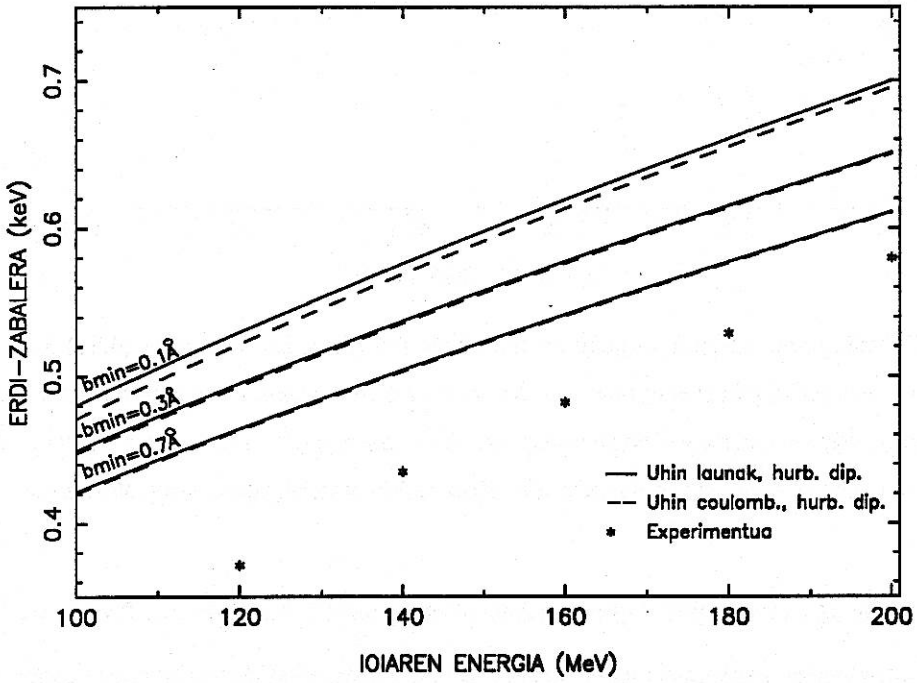
4.10 irudia. REC energiaren defizita, projektilen energiaren funtzioan. Lerro jarraiak (4.33) REC energiaren eta 4.9b irudian erakutsitako gailur-energia teorikoen arteko ezberdintasuna adierazten du, puntukako lerroak, ingurunearen polarizazioaren eraginez elektroi harrapatuaren lotura-energiak jasaten duen aldakuntza, eta zatikako lerroak, *r* txikitara dauden elektroien harrapaketaren eraginez gailur-energiak jasaten duen aldakuntza.

Ioiaren lorratz-potentzialari dagokion ekarpena abiadura handitarako txikiagoa bilakatzen da, (4.17) adierazpenak erakusten duen legez, eta *r* txikiko elektroien harrapaketari dagokion ekarpenak, berriz, ez du, izatez, ioiaren abiadurarekiko menpekotasunik. Alabaina, Doppler efektuaren eraginez energia guztiak bilakatzen dira handiaxegoak, ioiaren abiadura handitarako, bai eta, beraz, energiaren defizita ere.

Diogun, bestalde, sekzio eraginkorrak igorritako erradiazioaren energia txikitarako energia handitarako baino handiagoak direla, beherago ikusiko den legez, hasierako uhin coulombiarren kasuan, bereziki, eta honen eraginez gailur-energiak txikiagoak bilaka daitezke, ekarpen hau oso txikia delarik ere.

Erdi-zabalerak eta sekzio eraginkor diferentzialak

Zenbat eta talka-parametro minimoa txikiagoa izan, (4.68) ekuazioaren bidez kalkulaturiko REC gailurrak gero eta zabalagoak direla aurkitzen da, espero zitekeen bezala. 4.11 irudian REC gailurren maximoaren erdian kalkulaturiko zabalera osoaren balioak erakusten dira, ioiaren energiaren funtzioan, talka-parametro minimoaren zenbait baliotarako, emaitza experimentalekin batera.

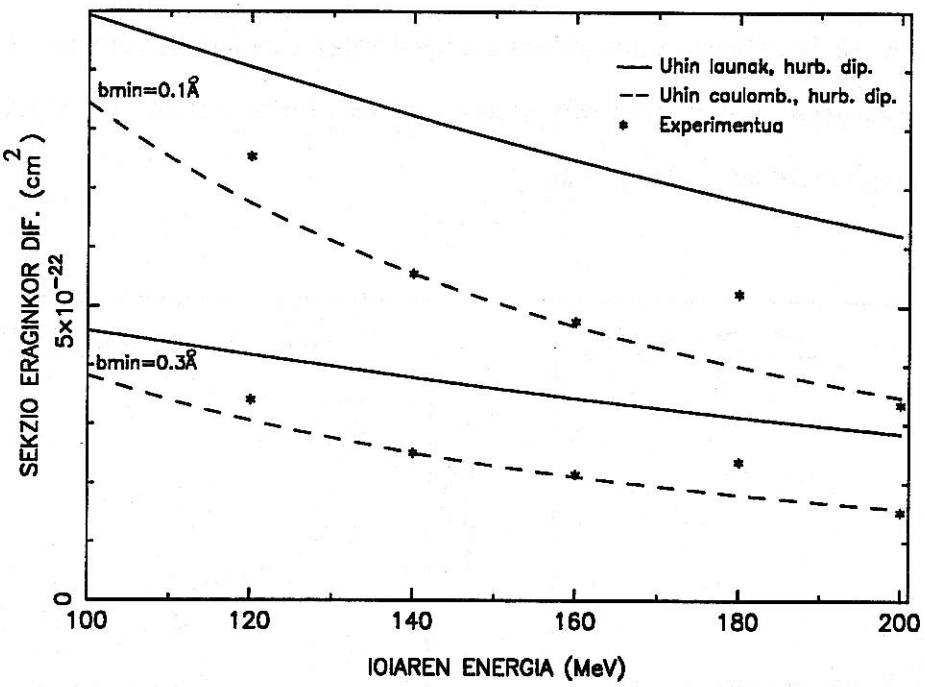


4.11 irudia. (4.68) adierazpenaren bidez kalkulaturiko REC espektroen gailurren erdi-zabalerak, projektilen energiaren funtzioan (4.11b irudia), talka-parametroaren zenbait baliotarako. DIMFP lokalak kalkulatzeko orduan (4.52) (lerro jarraia) eta (4.65) (zatikako lerroa) erabili dira, r-ren balio bakoitzeko 3.5 irudiko r_s parametro lokala kontsideraturik. Emaitza experimentalak izartxoen bidez adierazten dira.

Honela lorturiko erdi-zabalera teorikoak erdi-zabalera experimentalak baino handiagoak dira; prokektilen energiarekiko erakusten duten menpekotasuna, ordea, erdi-zabalera experimentalek erakutsitakoaren antzekoa da, talka-parametro txikitarako bereziki. Diogun, bestalde, hasierako uhinak launak zein coulombiarrak direla kontsideraturik emaitza berdintsuak lortzen direla.

Azkenik, (4.68) adierazpeneko DIMFParen eta zurikoaren atomo-dentsitatearen arteko

zatidura eginez eta igorritako erradiazioaren energietarako numerikoki integratuz, atomoko sekzio eraginkor diferentziala kalkulatu dugu. 4.12 irudian silizioan zehar sufrezko ioi biluziak kanalizatzean sorterazitako erradiazioaren intentsitatearen neurketa experimentalak[16] erakusten dira, projektilen energiaren funtzioan, guk kalkulaturiko atomoko sekzio eraginkor diferentzialekin batera.

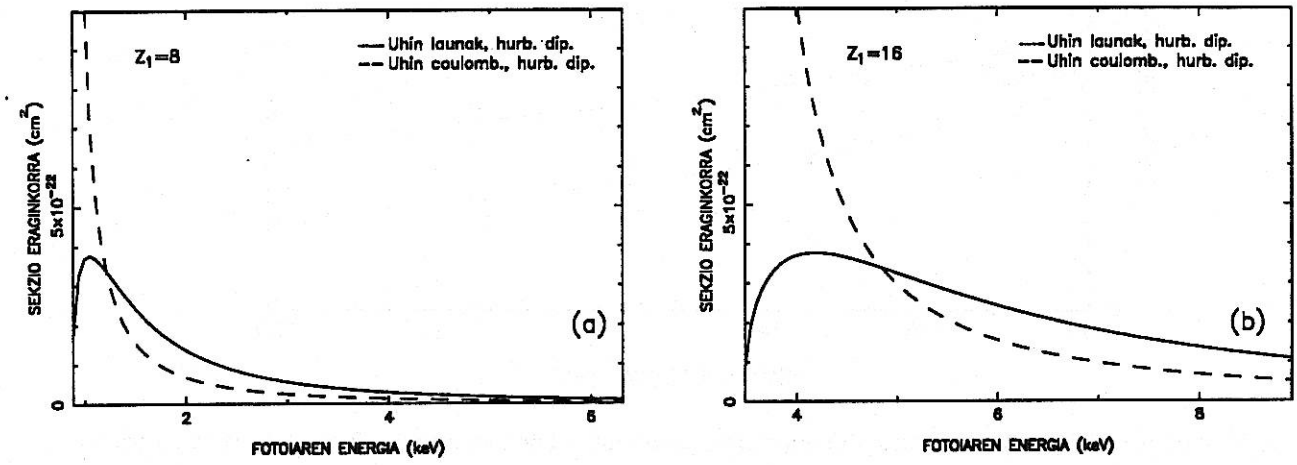


4.12 irudia. REC sekzio eraginkor diferentzialak, jaurtikitako ioien energiaren funtzioan, talka-parametro minimoaren zenbait baliotarako. DIMFP lokalak kalkulatzeko orduan (4.52) (lerro jarraia) eta (4.65) (zatikako lerroa) erabili dira, r-ren balio bakoitzeko 3.5 irudiko r_s parametro lokala kontsideraturik. Emaitza experimentalak izartxoen bidez adierazten dira; hauek projektilen energiaren 140MeV-tako baliorako izan dira normalizatuak.

Agerian dago, bada, sekzio eraginkor diferentziala energia txikitarako energia handitarako baino handiagoa dela, goian aurreratu dugun bezala; hortaz, REC espektroa ez da guztiz simetrikoa izango eta honek eragina izango du, orduan, gailur-energiak duen balioaren gainean. Are gehiago, hasierako uhin elektronikoak uhin coulombiarrak direla kontsideratuz lorturiko sekzio eraginkorra, uhin launen kasuan lorturikoa baino arinago aldatzen da energiarekin eta, ondorioz, sekzio eraginkorraren energiarekiko menpekotasunak REC gailur-energiak aldaraztean duen ekarpena, uhin coulombiarren kasuan uhin launen kasuan

baino garrantzitsuagoa bilakatzen da. Hau, bada, goian lorturiko emaitzekin bateragarria dugu.

Uhin launak eta uhin coulombiarrak erabiliz aurkituriko sekzio eraginkor diferentzialen arteko ezberdintasun hau birkonbinaketa-prozesuari dagozkion (4.59) eta (4.67) sekzio eraginkor osoen artean ere azaltzen da, 4.13 irudietan erakusten den bezala. Energia handitarako, zurikoaren elektroiak askeak direla eta hasierako uhin-funtzioak, beraz, uhin launak direla eman daiteke; energia txikiagotarako, aldiz, ioiaren Coulomb-en potentzialak eragin nabaria du sekzio eraginkorraren gainean, ioiaren karga handitarako bereziki, eta sekzio eraginkorrak energiarekiko duen menpekotasuna ere aldatu egiten da, Coulomb-en potentzialaren eraginez, goian azaldu den bezala.



4.13 irudia. (4.59) eta (4.67) adierazpenetako sekzio eraginkor osoak, igorritako erradiazioaren energiaren funtzioan, $Z_1 = 8$ denean (4.13a irudia) eta $Z_1 = 16$ denean (4.13b irudia).

Eranskina: (4.60) eta (4.63) adierazpenen eratorpena

Coulomb-en potentzialaren eraginpeko q momentudun elektroiaren Scrödinger-en ekuazioaren soluzioa uhin partzialetan heda daiteke:

$$\varphi_i(r) = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} C_l(q)\, F_l(q\,,r)\, P_l(\cos\theta) \;, \tag{E4.1}$$

non P_l direlakoak Legendre-ren polinomioak diren, θ, q eta r bektoreek osotzen duten angelua, C_l direlakoak, normalizazio-konstanteak, eta F_l direlakoak, Schrödinger-en ekuazio erradialaren soluzioak diren Coulomb-en funtzio esferiko erregularrak:

$$F_l(q\,,r) = \frac{2^l e^{-\pi\gamma/2} |\Gamma(l+1+i\gamma)|}{(2l+1)!} e^{iqr} (qr)^{l+1} {}_1F_1(l+1+i\gamma; 2l+2; -2iqr) \;, \tag{E4.2}$$

bertan, γ delakoa ondokoa izanik,

$$\gamma = -\alpha/q \;, \tag{E4.3}$$

α, (4.14) adierazpenekoa, eta ${}_1F_1$, Kummer-Laplace-ren ekuazio diferentzialaren soluzio erregularra den funtzio hipergeometriko konfluentea.

Normalizatuz gero, hauxe aurkitzen da[28]:

$$C_l = \frac{1}{\sqrt{V}} q^{-1} (2l+1)\, i^l e^{i\delta_l} \frac{2^l e^{-\pi\gamma/2} |\Gamma(l+1-i\gamma)|}{(2l+1)!} \;. \tag{E4.4}$$

non δ_l direlakoak Coulomb-en fase-lerrakuntzak diren,

$$\delta_l = \arg \Gamma(l+1+i\gamma) \;, \tag{E4.5}$$

eta Γ, gamma funtzioa. Horrelatan, bada, (E4.4) adierazpena (E4.1)-ra eramanez, (4.60) lortzen da.

Hurbilketa dipolarrean, bestalde, (4.11) adierazpeneko bigarren ataleko integrala ondoko era honetara adieraz daiteke:

$$\int dr\, \varphi_f^*(r)\, \lambda_k \,.\, \nabla\, \varphi_i(r) = 2\pi (E_i - E_f)\, (\lambda_k \,.\, \hat{q}) \int_0^{\infty} dr \int_0^{\pi} d\theta\, r^3 \sin\theta \cos\theta\, \varphi_f^*(r)\, \varphi_i(r) \;, \tag{E4.6}$$

ondoko berdintza betetzen bait da[32]:

$$\langle f | \boldsymbol{p} | i \rangle = i (E_f - E_i) \langle f | \boldsymbol{r} | i \rangle \;. \tag{E4.7}$$

(4.13) adierazpeneko $\varphi_f(r)$ uhin-funtzioak, bada, r aldagai eskalarrarekiko menpekotasuna baino ez duenez, bukaerako egoera elektronikoaren uhin-funtzioa (4.13) adierazpenekoa denean, (4.60) hasierako uhin-funtzioaren garapenaren $l = 1$ deneko gaia da (E4.6) integralean ekarpen ez-nulua duen gai bakarra. Ondorioz, hauxe idatz dezakegu:

$$\int dr\, \varphi_f^*(r)\, \lambda_k \,.\, \nabla\, \varphi_i(r) = 2\,\pi\,(E_i - E_f)\,(\lambda_k \,.\, \hat{q})\,\frac{1}{\sqrt{V}}\,\frac{2ie^{i\delta_1}}{qr}\int_0^\infty dr\, r^3\, \varphi_f^*(r)\, F_1(q\,,\,r)\,. \quad \text{(E4.8)}$$

(E4.2) adierazpenean azaltzen den gamma funtzioaren modulua ondoko erara adieraz daiteke[33]:

$$|\Gamma(l+1+i\,\gamma)| = \sqrt{-\pi\gamma}\; e^{\pi\gamma/2}\sqrt{2/\left(1-e^{2\pi\gamma}\right)}\;\prod_{s=1}^{l}\sqrt{s^2+\gamma^2}\quad , \qquad \text{(E4.9)}$$

$l \geq 1$ denean, eta, bestetik, funtzio hipergeometriko konfluentearen adierazpen integrala ondokoa dugu[34]:

$${}_1F_1(a\,;b\,;z) = \frac{(b-1)!}{2\,\pi i}\int_C d\xi\,(1-z/\xi)^{-a}\,e^{\xi}\,\xi^{-b}\quad , \qquad \text{(E4.10)}$$

non C delakoa plano konplexuaren jatorria nahiz $\xi = z$ puntua inguratzen dituen ibilbide itxia den. (E4.10) adierazpeneko bigarren ataleko integralean $\xi = 2\,i\,q\,r\,(t + 1/2)$ delako aldagai-aldaketa egin ondoren, bada, ondokoa idatz dezakegu:

$${}_1F_1(l+1+i\,\gamma;\,2\,l+2\,;-2\,i\,q\,r) = \frac{(2\,l+1)!}{2\,\pi i}\,(-2\,i\,q\,r)^{-2l-1}\,e^{-iqr}$$

$$\times\int_C dt\,(t-1/2)^{-i\gamma-l-1}\,(t+1/2)^{i\gamma-l-1}\,e^{-2iqrt}\,. \quad \text{(E4.11)}$$

Ondoren, (E4.9) eta (E4.11) direlako adierazpenak (E4.2)-ra eramanez, hauxe aurkitzen dugu:

$$F_1(q\,,\,r) = \frac{\sqrt{-2\,\pi\gamma}}{\sqrt{1-e^{2\pi\gamma}}}\,\frac{\sqrt{1+\gamma^2}}{8\,\pi q\,r}\int_C dt\,(t+1/2)^{-i\gamma-2}\,(t-1/2)^{i\gamma-2}\,e^{2iqrt}\,. \quad \text{(E4.12)}$$

Azkenik, (E4.12) adierazpena (4.60)-ra eramanez, eta (4.13) nahiz (4.60) direlakoak (E4.6)-ra eramanez, honako hau idatz dezakegu, integralak burutzeko orduan hondarren teoremaz baliatu ondoren:

$$\int dr\, \varphi_f^*(r)\, \lambda_k \cdot \nabla\, \varphi_i(r) = \frac{-i}{\sqrt{V}} (E_i - E_f)\, (\lambda_k \cdot \hat{q})\, (\alpha^3\ \pi)^{1/2} \frac{\sqrt{-2\pi\gamma}}{\sqrt{1-e^{2\pi\gamma}}} \frac{2^4\, \gamma (1+\gamma^2)^{-5/2}}{q^4}$$

$$\times \left(\frac{-i\gamma - 1}{-i\gamma + 1} \right)^{-i\gamma} e^{i\delta_l} \quad . \tag{E4.13}$$

Bestalde, zera idatz dezakegu,

$$\left(\frac{-i\gamma - 1}{-i\gamma + 1} \right)^{-i\gamma} = e^{2\gamma \tan^{-1}(-1/\gamma)} \quad , \tag{E4.14}$$

eta ondorioz, (E4.13) delako adierazpena (E4.11)-ra eramanez, (4.63) lortzen da, behin q-ren ordez (4.62) adierazpeneko q' delakoa ordezkatu ondoren.

Bibliografia

1. H. Betz, *Charge states and charge-changing cross sections of fast heavy ions penetrating through gaseous and solid media*, Rev. Mod. Phys. **44** 465 (1972).
2. R. Shakeshaft & L. Spruch, *Mechamisms for charge transfer (or for capture of any light particle) at asymptotically high impact velocities*, Rev. Mod. Phys. **51** 369 (1979).
3. D. Belkic, R. Gayet & A. Salin, *Electron capture in high-energy ion-atom collisions*, Phys. Rep. **56** 279 (1979).
4. J.S. Briggs & K. Dettman, *Radiative charge transfer from H atoms by fast ions*, Phys. Rev. Lett., **33** 1123 (1974).
5. H.W. Schnopper, H.D. Betz, J.P. Delvaille, K. Kalata, A. R. Sohual, K.W. Jones & M.E. Wesner, *Evidence for aadiative electron capture by fast highly stripped heavy ions*. Phys. Rev. Lett. **29** 898 (1972).
6. P. Kienle, M. Klaber, B. Pouh, R.M. Diamond, F.S. Stevens, E. Grosse, M.R. Moier & B. Proctel, *Radiative capture and bremsstrahlung of bound electrons induced by heavy ions*, Phys. Rev. Lett. **31** 1099 (1973).
7. H.W. Schnopper, J.P. Delvaille, K. Kalata, A.R. Solival, M. Abdulwahab, K.W. Jones & H.E. Wegner, *X-ray fast measurements of bremsstrahlung and electron capture by fast positive ions*. Phys. Lett. A **47** 61 (1974).
8. H.W. Shnopper, H.D. Betz & J.P. Delvaille, *Radiative electron capture and bremsstrahlung*, in Atomic Collisions in Solids, edited by S. Datz, B.R. Appleton & C.D. Moak (Plenum, New York, 1975) Vol. II, 481 orr..
9. J.E. Miraglia, *Radiative electron capture in proton-hydrogen collision*, Phys. Rev. A. **32** 2702 (1985).
10. B.R. Appleton, T.S. Noggle, C.D. Moak, J.A. Biggerstaff, S. Datz, H.F. Krause, & M.D. Brown, *Radiative electron capture by channeled ions*, ikus ref. 8, 499 orr.
11. B.R. Appleton, R.H. Ritchie, J.A. Biggerstaff, T.S. Noggle, S. Datz, C.D. Moak & H.Verbeek, *Investigations of radiative electron capture by ion channeling techniques*, J. Nucl. Mater. **63** 513 (1976).

12. B.R. Appleton, R.H. Ritchie, J.A. Biggerstaff, T.S. Noggle, S. Datz, C.D. Moak, H. Verbeek, & V.N. Neelavathi, *Radiative electron capture by oxygen ions in single-crystal channels: Experiment and theory*, Phys. Rev. B**19** 4347 (1979).

13. M.T. Robinson & O.S. Oen, Appl. Phys. Lett. **2** 30 (1963).

14. J.K. Lindhard, K. Dans. Vidensk. Selsk. Mat.-fys. Medd. **34** no.14 (1965). Ikus bedi ere D.S. Gemmell, *Channeling and related effects in the motion of charged particles t hrough crystals*, Rev. Mod. Phys. **46** 129 (1974).

15. Andriamonje S., Chevallier M., Cohen C., Dural J., Gaillard M.J., Genre R., Hage Ali M., Kirsch R., L'Hoir A., Mazuy B., Mory J., Moulin J., Poizat J.C., Remillieux J., Schamaus D. & Toulemonde M., *Observation of radiative electron capture into K,L,M shells of 25-MeV/u Xe^{53+} ions channeled in silicon*, Phys. Rev. Lett., **59** 2271 (1987).

16. C.R. Vane, S. Datz, P. Dittner, J. Giese, J. Gómez del campo, N.Jones, H. Krause, P.D. Miker, H. Schone & M. Schulz, *Radiative electron capture* , Proceedings of the 11th Werner Brandt Workshop on Penetration Phenomena of Charged Particles in Matter, Oak Ridge, Tennessee, April 14-15, 1988.

17. J.E. Miraglia, R. Gayet & A. Salin, *Radiative electron capture by ions channeled in crystals*, Europhys. Lett., **6** 397 (1988).

18. J.M. Pitarke & R.H. Ritchie, *Radiative electron capture by channeled ions*, Proceeding of the 12th Werner Brandt Workshop on Penetration Phenomena of Charges Particles in Matter, Donostia, Basque Country, September 4-7 (1989).

19. J.M. Pitarke, R.H. Ritchie & P.M. Echenique, *Radiative electron capture by channeled ions* (Phys. Rev. B delako aldizkarian onartua).

20. R. Shakeshaft & L. Spruch, *Radiative capture and galilean inuariance*, Phys. Rev. Lett. **38** 175 (1977).

21. P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (Clarendon, Oxford), 4th edition, 10. atala.

22. J. C. Inkson, *Many-body theory of solids: An introduction*, (Plenium Press-New York and London 1984), 81. orr.

23. L.I. Shiff, *Quantum Mechanics*, (Mc Graw-Hill, New York, 1968), 4. atala.

24. R.H. Ritchie, W. Brandt & P.M. Echenique,*Wake potential of swift ions in solids*, Phys. Rev. B **14** 4808 (1976).

25. P.M. Echenique, R.H. Ritchie & W. Brandt, *Spatial excitation patterns induced by swift ions in condensed matter*, Phys. Rev. B **20** 2567 (1979).

26. L.D. Landau & E.M. Lifshitz. *Course of Theoretical Physics: Quantum Electrodynamics*, (Pergamon Press, 1982) Vol. 4, 165 orr.

27. M. Abramonitz & I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1965).

28. C.J. Joachain, *Quantum collision theory* (North-Holland publishing company, Amsterdam, Oxfordd, 1975), 6. atala.

29. H.A. Bethe & E.E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one-and two-electron atoms* (Academic, New York, 1957), 322 orr.

30. Ikus 26, 211. orr.

31. T.C. Tucker, L.D. Roberts, C. W. Nestor, T.A. Carlson & F.B. Malik, R*elativistic self-consistent-field calculation of the wave functions, eigenvalnes, isotope shifts, and the 6s Hyperfine-structure coupling constants as a function of pressure for metallic gold in the Wigner-Seitz Model,* Phys. Rev. **178**, 998 (1965).

32. Ikus 23, 404. orr.

33. L.D. Landau & E.M. Lifshitz. *Course of Theoretical Physics: Quantum Mechanics*, (Pergamon Press, 1982) Vol. 3, 122 orr.

34. N.F. Mott & H.S.W. Massey, *The theory of atomic collisions* (3rd edition, Oxford University, London, 1965), p. 58. Ikus bedi ere 33, 657 orr.

5. LABURPEN ETA ONDORIOAK

Lan honetan, higitzen ari diren partikula kargatuen eta solidoen barruko nahiz gainazaleko elektroien arteko elkarrekintzarekin erlazionaturiko zenbait arlo aztertu da.

1. Bigarren atalean, tunel mikroskopioaz baliaturik neurtu diren tunel-korronte konstantedun separazioa-tentsioa, s–V_a, eta konduktantzia-tentsioa, dI/dV_a–V_a, ezaugarrien kalkulu teorikoa burutu da, lehenengo eta behin, emaitza experimentalen interpretazioa emanez. Honetarako, trukatze- eta koerlazio-efektu lokal nahiz ez-lokalak eta efektu dinamikoak barnehartzen dituen potentzial-langa parametrizatu unidimentsionala proposatu da, eta tunel-ezaugarri experimentalak doierazteak tunel-elektroiek jasaten duten potentzial-langa eraginkorraren eitearen berri ematen digula aurkitu dugu, eremu-emisiozko erregimenean ematen den erresonantzi fenomenoari esker. Ondoren, eredu tridimentsionala garatu da, punta esferikoaren kasua kontsideratuz; tentsio handitarako (V_a > 10V) sistemaren geometria tridimentsionala kontsideratzea beharrezkoa dela erakutsi da eta tunel-ezaugarri experimentalak doierazteak puntaren erradioaren berri ematen digula aurkitu da.

2. Bigarren atalean ere, experimentalki neur daitekeen itxurazko potentzial-langaren azterketa teorikoa burutu da, ondoren. Alde batetik, WKB hurbilketak erabili ditugu separazio handitarako (s > 10Å) baliagarriak diren itxurazko potentzial-langaren adierazpen analitikoak lortzeko, beste ikerlarik oraintsu buruturiko lan teorikoen arteko ez-adostasunaren jatorria argitu da, irudi-potentzialak itxurazko potentzial-langaren neurketaren gainean eragina baduela ondorioztatu da eta separazio handitarako (s > 10Å) itxurazko potentzial-langa elektrodoen lan-funtzioen batezbestekoaren berdintsua delako ondorioa atera da. Beste aldetik, itxurazko potentzial-langaren kalkulu zehatza burutu da, goian proposaturiko potentzial-langa parametrizatua zeharkatzen duten elektroien Schrödinger-en ekuazioa askatuz. Elektrodoen arteko separazio txikitarako lorturiko itxurazko potentzial-langa Lang-ek efektu ez-lokalak arbuiatuz lorturikoarekin bat datorrela aurkitu da; elektrodoen arteko separazio handiagotarako, ordea, guk lorturiko itxurazko potentzial-langak efektu ez-lokalen eraginaren berri ematen du eta emaitza experimentalekin bat dator.

3. Hirugarren atalean, xafla mehetan zehar ioi-bikote azkarrak pasaraztean igorritako kolisio-elektroien kopuruak ioi-bikoteen orientazioarekiko duen menpekotasunaren azterketa teorikoa burutu da, berau ioi azkarrek materia zeharkatzean sorterazten dituzten elektroi-dentsitatearen fluktuazioekin erlazionatuz. Ioi-bikoteen sortaren norabide berean igorritako kolisio-elektroien sekzio eraginkorrak kalkulatu dira, bikoteen orientazioaren funtzioan, eta sekzio eraginkor hauek bikoteen orientazioarekiko menpekotasun nabaria dutela erakutsi da: bikotea osotzen duten ioien arteko distantziaren eta abiaduraren arauerako oszilazioak egon daitezke, alde batetik, eta, bestetik, bikoteak bikote-sortarekin lerrokaturik daudenean sekzio eraginkorrak handiagoak direla aurkitu da, sakabanaketa anizkoitzaren eraginez. Sakabanaketa anizkoitza barnehartzeko asmotan, bigarren ordenako perturbazioen teoriaz baliatu gara lehenengo, eta ioi bakar bati dagokion sakabanaketa-anplitudea era zehatzean kontsideratu beharra dagoela aurkitu da; oso handiak ez diren abiaduretarako ($v <$ 2.5a.u.), bestalde, energia txikiko elektroi-difrakziozko teorian garaturiko metodoak erabil daitezkeela erakutsi da. Era honetako experimentuak jaurtikitako ioi-bikoteen karga eta abiadura ezberdinetarako burutzea teoria linealen nahiz elektroi-harrapaketaren eta elektroi-galeraren teorien baliagarritasuna ikertzeko oso lagungarriak suertatuko lirateke, bai eta elektroi-dentsitatearen fluktuazioen berri jasotzeko ere.

4. Laugarren atalean, ioi azkarrak materian zehar kanaliza eraztean sorterazten den erradiazio-emisioaren bidezko elektroi-harrapaketa delako prozesuari dagozkion probabilitateak eta sekzio eraginkorrak kalkulatu dira, talka-parametroaren funtzioan. Honetarako, dentsitate lokaleko hurbilketaz baliatu gara eta kanalizaturiko ioien batezbesteko bide aske alderantzizkoaren diferentzialaren batezbesteko estatistikoa definitu da, hasierako uhin elektroniko launak nahiz coulombiarrak kontsideraturik. Era honetara lorturiko emisio-probabilitateen gailur-energiak solidoaren balentzi bandaren eta ioiaren egoera hidrogenoideen arteko trantsizioari dagozkionak baino txikiagoak direla aurkitu da, experimentalki neurturiko energiak bezala. Energiaren defizit honen jatorria bikoitza dela erakutsi da:

(i) Talka-parametro txikitarako zurikoaren momentu-banaketak zabalagoak bilakatzen dira eta,

honen eraginez, igorritako erradiazioaren energiak txikiagotu egiten dira.

(ii) Ioi azkarrek materia zeharkatzean sorterazitako elektroi-dentsitatearen fluktuazioen eraginez, hots, lorratz-potentzialaren eraginez ioi biluziaren egoera hidrogenoideen lotura-energiak txikiagotu egiten dira, eta zurikoaren elektroia harrapatzean igorritako fotoiaren energia ere txikiagotu egingo da, talka-parametro txikitarako bereziki.

Hasierako uhin-funtzio coulombiarrak erabiltzeak gure emaitza teorikoen eta emaitza experimentalen arteko adostasuna hobatu egiten duela ere erakutsi da.