

Lenķiski izšķirtu elektronu ar mazu enerģijas zudumu spektru analīze BaTiO₃ dielektriķim

Reinis Ignatāns¹, Liam Spillane², Vasiliki Tileli³

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Gatan Inc., Pleasanton, California 94588, United States*

³*Institute of Materials, École Polytechnique Fédérale de Lausanne,*

Elektronu enerģijas zudumu spektroskopija (EELS) mazu enerģijas zudumu diapazonā zondē kolektīvus valences elektronu ierosinājumus, kuri ataino enerģētisko zonu struktūru, kā arī tā var tikt pielietota, lai iegūtu materiāla komplekso dielektrisko funkciju. Līdz ar to, tā ir atbilstoša metode, lai pētītu lokālu lādiņu efektus, kuri ir saistīti ar segnetoelektriskajām domēnu sienām. Tomēr, segnetoelektrisku perovskitu oksīdu lieliskās dielektriskās īpašības, kuras izpaužas arī caur lielu gaismas laušanas koeficientu, rada izaicinājumus kvantitatīvam EELS eksperimentālam mērījumam, jo zondējošie elektroni lido cauri materiālam ar lielāku ātrumu nekā gaismas ātrums ($v_e > c/n$), kas inducē papildus enerģijas zudumus saistītus ar Čerenkova starojuma emisiju. Šeit mēs demonstrējam divas stratēģijas, kādā veidā iegūt Čerenkova starojuma korektētus spektrus. Viens piegājiens ļauj precīzi nomērīt aizliegtās zonas platumu, bet otrs dod iespēju iegūt materiāla komplekso dielektrisko funkciju. Eksperimentālā kompleksā dielektriskā funkcija ir salīdzināta ar teorētisko, kas aprēķināta ar no laika atkarīgu blīvuma funkcionāla teoriju (TDDFT), un uzrāda lielisku sakrītību. TDDFT EELS aprēķins defektīvam BaTiO₃ (skābekļa vakance) norāda uz iespējamu spektrālu iezīmi, kuru varētu izmantot, lai kvantitatīvi kartētu defektus segnetoelektriskajos perovskita oksīdos.

Analysis of angle resolved low-loss electron energy-loss spectra of the dielectric BaTiO₃

Reinis Ignatāns¹, Liam Spillane², Vasiliki Tileli³

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Gatan Inc., Pleasanton, California 94588, United States*

³*Institute of Materials, École Polytechnique Fédérale de Lausanne*

Low-loss electron energy loss spectra (EELS) probes information on the collective excitations of valence electrons reflecting band structure and can be used to retrieve complex dielectric functions of the material in a wide energy range. Therefore, it is a relevant method to study local charge effects associated with the ferroelectric domain walls. However, excellent dielectric properties of ferroelectric perovskite oxides, which are reflected in the high refractive indices, poses a challenge for quantitative interpretation of the low-loss EELS experimental measurements as the probing electrons pass through the material with speed greater than speed of light (i.e. $v_e > c/n$) inducing additional energy losses associated with Cherenkov light emission.

Here, we demonstrate two strategies to retrieve Cherenkov loss corrected spectra. One approach allows precise bandgap determination, but the other permits retrieval of dielectric functions. Experimental complex dielectric function is compared with theoretical one calculated by time dependent density functional theory (TDDFT) approach and shows excellent match. Additionally, TDDFT calculation of oxygen vacancy affected BaTiO₃ EELS shows promising spectral feature, which could be used to quantitatively map defects in the ferroelectric perovskite oxide materials.