Comportamiento de un átomo de impureza cerca de una dislocación de borde

Valery Gashevskiy*

Resumen

£J1 objetivo del presente trabajo es analizar el movimiento del átomo de impureza en el campo de las tensiones elásticas de la dislocación de borde en dos aproximaciones: a) aproximación clásica b) aproximación de oscilador armónico bidimensional anisótropo. Se presentan las gráfi cas bidimensionales de las funciones espaciales del potencial de la interacción del átomo con la dislocación y las gráfi cas de las componentes de las fuerzas que actúan en el sistema átomo-dislocación. Se trazan las trayectorias de fase de las ecuaciones diferenciales del movimiento del átomo. El análisis de las ecuaciones muestra la posibilidad del movimiento oscilatorio del átomo.

También se calcula el espectro de energías del átomo usando la aproximación de oscilador armónico bidimensional. Por último, se realiza la estimación numérica de los niveles de energía de un átomo de Boro en la red cristalina de Cilicio.

Palabras claves:

Dislocaciones, impureza, oscilaciones y espectros.

^{*} Ph.D, Profesor asistente, TC, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, adscrito a la Facultad Tecnológica. Correo electrónico: vgachevski@udistrital.edu.co

Abstract

The objective of the present work is to analyze the movement of the atom of impurity in the fi eld of the elastic tensions of the dislocation of edge in two approximations: a) classic approximation b) approximation of anisotropic two-dimensional harmonic oscillator.

They present the two-dimensional graphs of the spatial functions of the potential of the atom interaction with the dislocation and the graphs of the components of the forces that actuate in the atom (dislocation system). There are planned the phase trajectories of the differential equations of the atom movement. The analysis of the equations shows the possibility of the oscillatory movement of the atom. Also there is calculated the spectrum of energies of the atom using the harmonic twodimensional oscillator approximation. The numerical estimation of the levels of energy of a boron atom is made in the crystalline silicon network.

Keywords

Dislocations, impurity, oscillations and spectrum.

1. Introducción

Anteriormente las investigaciones en interacción de los átomos de impureza con dislocaciones se realizaron en los problemas relacionados con propiedades mecánicas de materiales. Como se sabe los átomos de impureza introducidos en la red cristalina infl uyen en la movilidad de dislocaciones siendo sus retenes y cambiando características de deformación y de destrucción de un material.

La teoría de elasticidad recién desarrollada (en inglés *gradient elasticity*), descrita y usada en varios artículos [4 y 2] evita las singularidades de las funciones de las tensiones elásticas en las líneas de dislocaciones que tienen lugar en la teoría de elasticidad tradicional. Según esta nueva teoría, la función de potencial de la interacción del átomo de impureza con dislocación es la función fi nita en todo el espacio, que permite resolver los problemas en las regiones cercanas a las dislocaciones incluyendo las líneas de dislocaciones. Desde el punto de vista de la *gradient elasticity*, la interacción de un átomo de impureza con una dislocación de borde analizado fue descrita en el artículo *Fiz. Tverd. Tela* [18]. Los resultados del análisis teórico realizado en este artículo se usan para describir el proceso de sujeción de una dislocación en el espacio por el átomo de impureza.

El presente trabajo difi ere del artículo [18] anteriormente nombrado- y presenta la solución del problema de interacción de un átomo con dislocación en el caso bidimensional. Además, los resultados se relacionan no con la situación estática, sino con el análisis del carácter del movimiento relativo del átomo y de la dislocación. El trabajo encabeza una serie de artículos publicados anteriormente [19 y 27], con el objetivo común de formar, fi nalmente, una base teórica del análisis de infl uencia de dislocaciones en el proceso de emisión de la luz.

2. Defi nición del problema

Suponemos que una dislocación de borde aislada se encuentra en el material homogéneo. La línea de dislocación pasa por el origen del sistema de coordenadas cartesiano y coincide con el eje z. El plano extra de la dislocación coincide con la mitad positiva del plano yz. El átomo de impureza se encuentra al frente del plano extra de la dislocación. Según la teoría de elasticidad [9], la energía de deformación producida por un átomo de impureza en un material se describe de la siguiente forma:

1

En la que δv es el cambio del volumen del material producido por el átomo, c_{ijkl} son componentes del tensor de elasticidad y *e*.. son componentes del tensor de la deformación.

La fórmula del potencial fue descrita en el artículo *Fiz. Tverd. Tela* [18] y tiene la siguiente forma:

(2)



M-^{es e}l módulo

de deslizamiento; b es la longitud del vector de Burgers; v es la razón de Poisson; dves el cambio del volumen del material por inserción de un átomo de impureza; K_I es la función modifi cada de Bessel del segundo genero del primer orden; c = a; a es la constante de la red cristalina; es la coordenada polar adimensional, r y R = r son Ve

las coordenadas del sistema polar cuando su origen coincide con el origen del sistema cartesiano mencionado anteriormente. La energía potencial adimensional del átomo de impureza es igual al trabajo necesario para desplazar el átomo desde la posición de equilibrio. La fórmula de la energía potencial es la siguiente:

 $W^* = V''(R, e) - V''(R_0, e_0) = (-^{+} K, (R) \setminus ene -i - ^{+} K, (R_0)) (3)$ En la que R₀ = 1.1144 y 90 = 3 Π/2.

La línea de la dislocación no menciona el eje cartesiano z, sino sólo indica la posición de la dislocación. En la figura 1 se muestra la gráfi ca de la energía potencial adimensional W* alrededor del punto de equilibrio





Figura 2.

Función del potencial adimensional de la interacción del átomo de impureza con la dislocación de borde en la región de atracción del átomo en coordenadas polares adimensionales

del átomo. Asimismo, en ésta se puede ver claramente el poso potencial en el que se encuentra el átomo de impureza; entonces, el movimiento oscilatorio del átomo es realizable.

El plano horizontal corresponde a las coordenadas R y 0. El eje vertical corresponde a los valores de la energía adimensional W*.

La figura 2 muestra en las coordenadas polares adimensionales el comportamiento de la energía potencial adimensional W* de la interacción del átomo de impureza con la dislocación de borde en la región con dilatación positiva, cuando la inserción del átomo de impureza causa el aumento del volumen del cristal.

El movimiento oscilatorio se realiza alrededor de las posiciones de equilibrio estable, en las que la energía potencial del sistema alcanza su mínimo. En estos puntos la primera derivada de la función de potencial W*(R,0) (3) debe ser igual a cero. El cálculo de la derivada nos da la siguiente ecuación:

 $\cos (4) R$

Cuando $R^> 00_{o} R^> 0$ la función (3) W* -» 0 y no tiene extremos. Pero en los puntos (1.1144,1]y(1.1144, —1 si hay extremos de la función de la energía potencial W*.

Para defi nir los tipos de estos extremos debemos analizar el signo de la segunda derivada de la energía potencial (3). Esta derivada se describe en la siguiente forma:

El análisis de los signos de la segunda derivada (5) de la función (3) muestra que el punto i-ii44,1 es la posición de equilibrio inestable para el sistema del átomo con dis-

La ecuación (4) se convierte en igualdad algebraica cuando R-» $^{\circ\circ}$, cuando R-» 0 y también en los puntos (0,0),(0, π) (1.1144, ^1 y

locación. En el punto 11144, y se encuentra la posición de equilibrio estable de dicho sistema. Cerca de este punto el átomo de impureza realiza su movimiento oscilatorio.

3. Fuerza de interacción del átomo con la dislocación

Las componentes de la fuerza adimensional F^* de la interacción del átomo de impureza con la dislocación se calcula en el sistema polar en la siguiente forma:



VALERY GASHEVSKIY

Teniendo en cuenta las fórmulas de transformación de los siste<u>mas de c</u>oordenadas adimensionales $R = x^2 + y^2 y 9 = arctgl$ — las componentes de la fuerza F* en las coordenadas cartesianas se calculan con las siguientes fórmulas:

$$F_{X*} = -\frac{dW}{dW} \frac{dW}{dR} \frac{dW}{dR} \frac{dW}{dR} \frac{dW}{dR} \frac{dR}{dR}$$

$$\frac{\mathbf{i} \quad \mathbf{i} \quad \mathbf{122} \quad {}^{K} \backslash U^{X} + \mathbf{y2})}{\sqrt{x + y} \quad \mathbf{2}^{K} \langle iU^{x} \quad ^{+}y \rangle - \frac{i}{\sqrt{x + y}} , \text{ sen } \langle \mathbf{j} \mathbf{4}^{x} + \mathbf{y} \rangle }$$

$$\langle \mathbf{1}_{\frac{2}{2}} - \frac{1}{\sqrt{x + y}} \mathbf{4}^{K} \langle iU^{2} + y^{2} \rangle \exp \operatorname{arctgl} X \quad ^{7} \mathbf{y}^{\frac{2}{3}} + y^{2} \qquad) \quad \mathbf{I} \quad ^{X} \rangle \overset{x}{x} + \mathbf{y}$$

$$F_{\mathbf{j}} = -\frac{d}{W'} \frac{dW'}{dR} \quad \frac{dW'}{dR}$$

Las fi guras 3 y 4 muestran las funciones de las componentes F_x^* y F_y^* de la fuerza adimensional F*de interacción del átomo con la dislocación en coordenadas cartesianas adimensionales.

La forma de las gráfi cas de las componentes de la fuerza F^* es bastante sofi sticada, pero es posible observar las posiciones del equilibrio estable y las regiones donde el átomo puede realizar movimiento oscilatorio. El compartimiento de las componentes de la fuerza es diferente. La componente F^* no permite al átomo que se mueve a lo largo del eje y salir del poso potencia. Pero la componente F_x^* en cierta región aleja el átomo de la posición de equilibrio.



4. Análisis del movimiento. Modelo clásico

La única posición de equilibrio estable del átomo de impureza en el campo de las tensiones elásticas de la dislocación de borde se encuentra en el punto (0, -1.1144) del sistema cartesiano de coordenadas adimensionales, donde la energía potencial adimensional del átomo alcanza su valor mínimo -0.399.

A lo largo de las coordenadas adimensionales, las ecuaciones de movimiento del átomo se deducen usando la segunda ley de Newton

 $a = \mathbf{i}_m$

(10)

Donde las componentes de las coordenadas adimensionales i = R, ? para el sistema polar y i = x, y para el sistema cartesiano m es la masa relativa del átomo.

4.1 Descripción del movimiento del átomo en el sistema polar de coordenadas adimensionales

Reescribimos las ecuaciones del movimiento (10) de forma detallada:

La solución numérica de las ecuaciones (11) y (12) nos da las trayectorias de fase mostradas en las fi guras 5 y 6.





VALERY GASHEVSKIY

Cada uno de los campos vectoriales representados en las fi guras 5 y 6 tienen el único punto singular que es también el punto de reposo del sistema. Por su parte, la figura 5 muestra la estabilidad de las soluciones de las ecuaciones diferenciales (11) y (12) respecto a la variación de los segundos miembros de las ecuaciones, pero el movimiento no es armónico.

Ε

4.2 El sistema cartesiano de coordenadas adimensionales

Reescribimos las ecuaciones del movimiento (10) de la siguiente forma:

x) $\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}$ [ÍOJ $-K_{,}(Jx^2+y^2)$ losíarctg^ |x

$$\begin{array}{c} \overset{i'y = 1}{\overset{-J = \ldots \kappa}{\sim}} & \overset{i = \underbrace{-g_{\cdot}(V_{1}^{2}+J^{2})I}}{\overset{r}{\sim}} & \overset{r}{y} & \underbrace{y}{\overset{y}{\sim}} & \underbrace{jx_{+}^{2}y^{2}}_{+y^{2}} & f^{o}V^{**}n^{*'} + \overset{y}{\sim} & [14] \end{array}$$

La integración de las ecuaciones (13) y (14) nos da las trayectorias de fase mostradas en las figuras 7 y 8.

Los campos vectoriales mostrados en las figuras 7 y 8 también tienen el único punto singular que, igualmente es el punto de reposo del sistema. Este punto se encuentra sobre el eje y en la misma distancia, desde del origen del sistema de coordenadas que mostró el campo vectorial de la figura 5 y su coordenada coincide con la posición del mínimo de la función de la energía potencial W* (3). Todos los campos vectoriales mues-



46





tran la estabilidad de las soluciones de las ecuaciones diferenciales correspondientes con respecto a la variación de los segundos miembros de las ecuaciones. Pero el movimiento no es armónico, sino es supremamente no lineal por una diferencia signifi cativa en los valores de velocidades y también en los periodos de movimientos a lo largo de los ejes x y y . Es exactamente lo que nos muestra la figura 9, en la que se presenta una de las trayectorias posibles y(x).

La gráfi ca presentada en la figura 9 muestra que el movimiento del átomo de impureza en el campo de las tensiones elásticas de la dislocación de borde es periódico, cuando analizamos este movimiento por coordenadas x y y aparte, pero, es prácticamente caótico en el plano xy.

5. Aproximación de oscilador armónico bidimensional asimétrico. El espectro de energía

La estimación del espectro de energía del átomo se realiza aproximando la función de la energía potencial W* (3) cerca de la posición de equilibrio del átomo con la función de la energía potencial de un oscilador armónico bidimensional asimétrico $-k;(xj+-k''_y(y))^2$ en el cual x y y son coordenadas espaciales no dimensionales. $k_x * y k *$ tienen el papel de constantes "de elasticidad" no dimensionales. y_0 es la posición de equilibrio del átomo en el campo de las tensiones elásticas de la dislocación de borde. Según el cálculo realizado en la parte de análisis de la ecuación (3), es igual a -1.1144.

Estimamos las frecuencias de oscilaciones \ddot{u}_x y (*O* usando las fórmulas de aproximación de oscilador armónico bidimensional:

(15)

en el cual m es la masa del átomo de impureza. Las "constantes de elasticidad" k_x y k corresponden a las constantes no dimensionales k * y k *.

Suponemos que los estados estacionarios del átomo corresponden a las "trayectorias" periódicas del paquete ondulatorio cuántico, cuando se cumple la siguiente condición:

q (16)

en la cual p y q son números enteros. En este caso el movimiento clásico es periódico y el paquete cuántico ondulatorio puede re-

47

VALERY GASHEVSKIY

producir las "fi guras de Lissajous" clásicas. Los niveles de energía de estos estados son:

$$E = E_{m,n} = E_{m+E_{n}} + E_{n} (17)$$

Donde:

$$El = y + 1$$

,
$$l = m$$
, n ; $i = x$, y . (18)

La estimación numérica realizada para niveles de energía de un átomo de Boro en un cristal de silicio con una dislocación de borde nos da los siguientes valores para los parámetros mencionados anteriormente: según las tablas publicadas en el libro Theory of Dislocations [9], el módulo de deslizamiento de Silicio es $::=6.81 \times 10^{10} \text{Pa},$ la constante de la red cristalina a y el módulo del vector de Burgers b son a = b $= 3 \cdot 84 \times 10^{-10}$ m; la razón de Poisson es v = 0.218. El cambio de volumen producido por el átomo de Boro insertado en la red cristalina de Silicio se estima -según Phys. Stat. Sol [19]- con la resta de volúmenes de átomos de Si y de B ^vsi ^vB calculados, a través de valores de volúmenes atómicos de estos elementos publicados en la Enciclopedia de los elementos químicos, disponible en http://dl. softporta.com/load/Mendeleev. exe y es igual a $dv = .294 \times 10^{28} \text{ m}^3$.

El módulo del valor mínimo de la energía potencial adimensional (3) es $|W^*| = 0.399$ y la profundidad del pozo cuántico se estima con 3.30 eV. La aproximación de las constantes de "elasticidad" nos da los valores siguientes: kx=57.6 Nnr¹ y ky=7.15 Nnr¹. Para las frecuencias de modos fundamentales tenemos (W_x=0.566x 1014s-¹ y (iu 0.200X 10¹⁴s-1. En el caso de movimiento periódico su frecuencia debe coincidir con las frecuencias de modos n y 1 de oscilaciones, a lo largo de los ejes de coor-

La energía del estado de base es ${}^{E}O_{,O} = {}^{E}O_{x} + {}^{E}O_{y} = 0.^{1}$ 17eV + 0.0413eVeV = 0.158eV y la del estado siguiente es: E_{0,0}=0.241eV Los valores máximos de la energía de los estados que corresponden al movimiento, a lo largo del eje x es E1_{3,0}=3.21eV y para el movimiento, a lo largo del eje y es E3_{8,0}=3.23eV. El número máximo de modos de oscilaciones a lo largo del eje x es 13, entonces el movimiento periódico en sentido clásico no es realizable. Este resultado coincide con las conclusiones del análisis con base en el modelo clásico

Conclusiones

El análisis del movimiento del átomo de impureza en el campo de las tensiones elásticas de la dislocación de borde realizado con base en el modelo clásico muestra un carácter oscilatorio de los movimientos, a lo largo de cada uno de los ejes del sistema de coordenadas: estos movimientos tienen un carácter estable y el sistema tiene los puntos de reposo, pero el intervalo del tiempo mínimo entre dos instantes de repetición de la posición y de la velocidad del átomo de impureza es muy largo, en comparación con los periodos de oscilaciones por coordenadas. Con el tiempo se cambian componentes de desplazamiento máximo del átomo o, en otras palabras, se cambian amplitudes de oscilaciones a lo largo de los ejes del sistema de coordenadas. Se puede decir que a lo largo de los ejes las oscilaciones intercambian la energía entre sí y el movimiento es prácticamente estocástico.

El cálculo realizado con base en el formalismo cuántico del oscilador armónico bidimensional asimétrico nos da los niveles de energías del átomo en el poso potencial formado por las tensiones elásticas de una dislocación de borde. Por ejemplo,

48

razón ^ x —
denadas
$$(O = \ddot{u})_{nx} = \ddot{u}_l$$
 que corresponde a la
 $\leq n^{-\text{ff}35}$

en el estado base el átomo tiene energía $E_{0,0} = E_{0x} + E_{0y} = 0.158$ eV y la energía del estado siguiente es $E_a = 0.24$ iev. Pero con esta aproximación también debemos concluir que el movimiento periódico del átomo, en el sentido de física clásica, es irrealizable. Esta conclusión coincide con las conclusiones descritas anteriormente.

Referencias bibliográfi cas

- Acharya, A., Bassani, J. L., Beaudoin, A. (2002). Geometrically-Necessary Dislocations, Hardening, and a Simple Gradient Theory of crystal Plasticity, Scripta Materialia. Disponible en: http://www. me.upenn.edu/faculty/bassani.html.
- [2] Unger D.J., Aifantis, E.C. (2000). "Strain Gradient Elasticity Theory for Antiplane Shear Cracks". Part I: Oscillatory Displacements. Theor. Appl. Fract. Mech. 34, 243-252.
- [3] Douglas J. Bammann. (s.d.) A Gradient Model of Dislocation Based Plasticity. http://www.me.gatech.edu/me/events/ seminars/B ammann.htm.
- [4] Gutkin M. Yu., Aipantis E.C. (s.d.). "Dislocations and Disclinations in Gradient Elasticity" *Phys. Stat.* Sol. 214, 245
- [5] Aifantis E.C. (2003). Update on a Class of Gradient Theories. Mechanics of Materials. 35, 259-280.
- [6] George, Z. Voyiadjis, Robert J. Dorgan. (2004). Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 193, 167.
- [7] Zbib, H. M., Aifantis, E.C. (2003). "Size Effects and Length Scales in Gradient Plasticity and Dislocation Dynamics". *Scripta Mat.* 48, 155-160.
- [8] Askes, H., Aifantis, E.C. (2002). "Numerical Modeling of size Effects with Gradient Elasticity. Part I: Formulation, Mes-

hless Discretization and Examples". *Int. J. Fracture.* 117, 347-358.

- [9] Hirth J.P., Lothe J. (1999). Theory of Dislocations. Malabar, Florida: Second edition. Krieger Publishing Company.
- [10] Tsagrakis, I., Aifantis, E.C. (2002). "Recent Developments in Gradient Plasticity. Part I: Formulation and Size Effects". J. *Eng. Mat.* Tech. 124, 352-357.
- [11] Mikaelyan, K. N., Gutkin, M. Yu., Aifantis, E.C. (2000). Edge Dislocations near Phase Boundaries in the Gradient Theory of Elasticity Physics of the Solid State. Septiembre, Vol. 42, Issue 9, 1659-1667.
- [12] Teneketzis Tenek, L., Aifantis, E.C. (2002). "A two-Dimensional Finite Element Implementation of a Special Form of Gradient Elasticity". *Comp. Modeling in Eng.* Sciences. 3, 731-741.
- [13] <u>. (2001).</u> "On Some Applications of Gradient Elasticity to Composite Materials". J. *Comp. Struct.* 53, 189-197.
- [14] Ponce, A.D.P. (1997). *Nature*, v. 386, 351-359.
- [15] Forest, S., Sievert, R., Aifantis, E.C. (2002). "Strain Gradient Plasticity: Thermomechanical Formulations and Applications". J. Mech. Beh. Mat. 13, 219-232.
- [16] Malmberg, T., Tsagrakis, I., Eleftheriadis, I., Aifantis, E.C. (2001). "On the Gradient Plasticity Approach to size Effects, Part I: Reviews". *Forschungszentrum Karlsruhe, Scientifi c Report* FZKA 6321, Karlsruhe.
- [17] _____. (2001). "On the gradient plasticity approach to size effects, Part II:

Applications". *Forschungszentrum Karlsruhe, Scientifi c Report FZKA* 6322, Karlsruhe.

- [18] Vlasov N. M. (2001). *Fiz. Tverd.* Tela, 43, 1999.
- [19] Gachevski, V. (2000). *Phys. Stat. Sol.(b)*, V. 220, N1, 765-768.
- [20] <u>. (2001). XIX Congreso Nacio-</u> nal de Física, Manizales, septiembre.
- [21] ______. Hugo Aya Baquero. (2003).XX *Congreso Nacional de Física*, Armenia, septiembre.
- [22] _____.(2003). III Congreso Internacional Micromecanismos de plasticidad, ruptura y los fenómenos acompañantes (MPFP), Tambov, Rusia, junio.

- [23] <u>. (2003).</u> *Revista de la Universi*dad de *Tambov*. Serie Las ciencias naturales y técnicas. Vol. 8, N° 4.
- [24] _____. (2004). III Congreso Internacional Transformaciones de fase y rigidez de cristales, Chernogolovka, Rusia, septiembre.
- [25] <u>. (2004). XLIII Congreso Inter-</u> nacional Problemas actuales de rigidez, Vitebsk, Belarusia, octubre.
- [26] _____. (2005). II International Conference Physics of Electronics Materials. Section Structure, Defects and Related Phenomena. Kaluga, Russia, mayo.
- [27] _____. (2005). VII International Conference Opto-, Nanoelectrónica, Nanotechnologies and Microsystems; Ulianovsk, Russia, junio.