

# EVOLUCIÓN DEL DIÁMETRO DE TRAZAS NUCLEARES EN MICA A NIVEL SUBMICROSCÓPICO

O.A. Bernaola<sup>1</sup>, G. Saint-Martin<sup>1</sup>, I. Nemirovsky<sup>1</sup>, P.J. Meoli<sup>2</sup> y G. Olivera<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Comisión Nacional de Energía Atómica.  
Av. del Libertador 8250. (1429) Buenos Aires.  
*e-mail: bernaola@cnea.edu.ar*

<sup>2</sup> Instituto Alexander Fleming. Buenos Aires.

<sup>3</sup> Universidad Nacional de Rosario.

Se analiza la evolución del diámetro de trazas nucleares de iones de <sup>35</sup>Cl de 49 MeV en mica en función del tiempo de ataque químico, mediante su observación en TEM con una resolución de 10 Å. Se observa un tiempo de inducción de 20 segundos para el material tratado con una solución de ácido fluorhídrico al 40 % y una temperatura de 24 C. Las curvas de evolución, tanto para el eje mayor como para el menor, indican una alta velocidad de ataque para la región cercana al eje de incidencia del proyectil. Esta velocidad va disminuyendo a radios mayores y se aproxima a la velocidad correspondiente al material no dañado. Sin embargo, antes de llegar a esta última zona, la velocidad alcanza valores menores que los correspondientes a la zona no dañada. Para interpretar este efecto se sugiere la formación de una región de baja velocidad de ataque químico en la región intermedia entre la zona central amorfa y la zona correspondiente a la red cristalina no perturbada.

Nuclear track diameter evolution of 49 MeV <sup>35</sup>Cl ions in mica is analysed, as a function of the etching time. Track diameters are observed by TEM with 10 Å resolution. An induction time of 20 s. is observed in the etching conditions employed, that is 40% HF at 24 C. A high attack velocity near the ion incidence axis can be inferred from the evolution curves of both the major and minor axis of the tracks. The velocity diminishes for larger radii and finally approaches the bulk velocity. However, before reaching the bulk zone, the velocity exhibits a smaller value than for undamaged material. The existence of a low etching velocity zone in the intermediate zone between the central amorphous area and the undisturbed crystalline material is suggested to explain the effect.

## I. INTRODUCCIÓN

Price y Walker<sup>(1)</sup> describieron la técnica de ataque químico para la observación de trazas en varios tipos de micas. Analizando la evolución del diámetro de las trazas en función del tiempo de ataque químico en mica muscovita, reportaron la existencia de un tiempo de incubación y de un límite inferior para el diámetro de las trazas del orden de 25 Å. Recién en 1970 Bean<sup>(2)</sup> y colaboradores realizaron una evaluación cuantitativa de la evolución de los diámetros de las trazas en función del tiempo de ataque químico, aplicando el método de electroconductividad. Utilizaron fragmentos de fisión como fuente de irradiación e infirieron un tamaño inicial del diámetro de las trazas del orden de 20 a 50 Å en mica muscovita. Este tamaño corresponde al promedio de la contribución colectiva de trazas en flujos del orden de  $3.0 \times 10^5$  trazas/cm<sup>2</sup>. Sin embargo, hasta el presente no se había realizado un análisis cuidadoso de la evolución temporal del diámetro de las trazas a partir de la observación individual de las mismas para iones monoenergéticos. En el presente trabajo se evalúa la evolución del diámetro de las trazas en función del tiempo de ataque químico utilizando mica muscovita e iones monoenergéticos.

## II. MATERIALES Y MÉTODOS

Se utilizaron folias de mica muscovita de 200 µm de espesor que fueron irradiadas con un haz de iones de

<sup>35</sup>Cl de 49 MeV con incidencia normal en el acelerador Tandem de Buenos Aires. Posteriormente las folias fueron tratadas químicamente con una solución de ácido fluorhídrico al 40% a 24 C. Las folias fueron procesadas durante diferentes tiempos de ataque químico (20, 30, 45 segundos y 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 4, y 5 minutos) con la finalidad de evaluar la evolución del diámetro de las trazas. Se utilizaron folias no procesadas químicamente como control. Posteriormente las folias fueron metalizadas con C-Pt hasta formar un depósito del orden de los 200 Å de espesor, con el objeto de obtener réplicas. Para la remoción de las réplicas las muestras fueron sumergidas lentamente en agua destilada en ángulos de 45°. Las réplicas flotantes fueron montadas en grillas de microscopía electrónica y observadas en un microscopio de transmisión Philips 300 con una resolución de 10 Å.

## III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se determinó un tiempo de inducción de 20 s. aplicando el criterio sugerido por Bernaola y col.<sup>(3)</sup>. Este tiempo está de acuerdo con el reportado por Meoli y col.<sup>(4)</sup>.

No se observaron trazas en las folias no procesadas químicamente, así como en las de 20 s. de proceso. En las de 30 s., algunas trazas comienzan a ser netamente reconocibles como tales, pero su número es

menor que el esperado de acuerdo con el flujo del haz. Para mayores tiempos todas las trazas son observables.

Para trazas nacientes, es decir las que corresponden a muy cortos tiempos de procesado, se observan trazas de forma circular. Esta forma circular indica una zona de material amorfo en la región cercana al eje de incidencia del proyectil y puede ser atribuida al alto daño producido en dicha región. Para mayores tiempos de procesado, y a medida que el ataque químico accede a regiones más alejadas del eje de incidencia, las trazas van adquiriendo una forma oval. Este tipo de trazas indicaría que el procesado químico se encuentra en una región de transición, y que el mismo gradualmente va tendiendo a la región de estructura cristalina del material virgen. Finalmente para los tiempos de ataque químico más largos, éste ya ha alcanzado la región no dañada lo que puede observarse en la estructura romboidal de las trazas. De esta forma el proyectil genera una región amorfizada en la zona cercana al eje de incidencia del ion y esta zona evoluciona radialmente hacia la región no dañada de estructura cristalina.

De todas maneras el aspecto observado más relevante es que no se evidencia un decrecimiento monótono de la velocidad radial de ataque químico, tanto para el eje mayor como para el menor, del diámetro de las trazas. En la Figura 1 a) y b), se puede observar un desarrollo rápido del diámetro de las trazas, inmediatamente después del tiempo de inducción, es decir cuando la acción del agente químico está limitada a la zona vecina al eje de la trayectoria del ion. Al aumentar el tiempo de procesado la velocidad radial disminuye, pero no en forma asintótica hacia la región virgen. Antes de alcanzar la zona cristalina, el ataque químico alcanza previamente una región de transición donde la velocidad de procesado es menor a la correspondiente a la zona de material no dañado. Finalmente cuando el ataque químico alcanza la región no dañada se observa una velocidad constante de procesado. Estos datos parecerían indicar la presencia de una zona de ataque químico más lenta ubicada en la región intermedia entre la zona central amorfizada y la región cristalina o no perturbada de la mica.

Un efecto similar fue observado por primera vez en nuestro Laboratorio para materiales orgánicos y el mismo fue interpretado como efecto de cross-linking molecular. Posteriormente esta observación fue corroborada por otros autores. Sin embargo, para el caso de un material inorgánico como la mica, esta hipótesis no es aplicable y se requerirá de un análisis posterior para su interpretación.

En forma adicional, los datos presentados no están de acuerdo con el tamaño mínimo de los diámetros de trazas ni con las características de su evolución temporal reportados por Bean. Sin embargo conviene recordar que los datos de este autor no corresponden a un efecto individual sino colectivo. Creemos que tanto para la comprobación del efecto observado así como para dilucidar la discrepancia con lo reportado por Bean, sería

razonable utilizar la otra técnica existente para este tipo de evaluaciones: la electroconductividad. Esta técnica está fuera de las posibilidades de nuestro laboratorio pero en particular el método de electroconductividad reportado por Apel y Ovchinnikov<sup>(5)</sup> y por Petersen y Enge<sup>(6)</sup> para el análisis de trazas individuales sería el más adecuado para realizar este tipo de análisis.

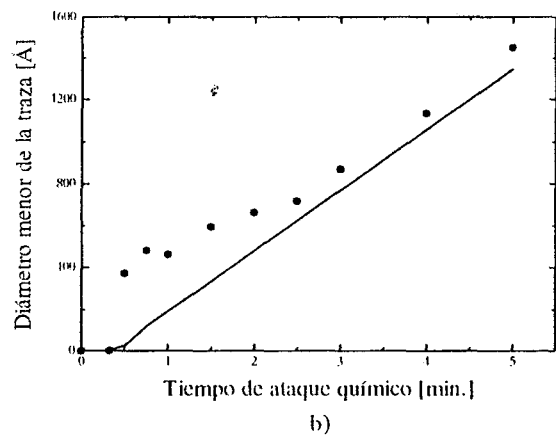
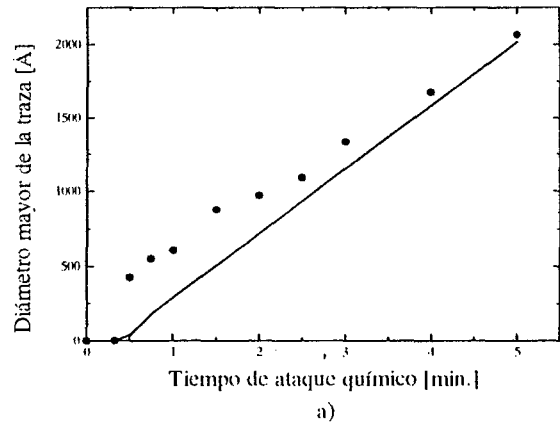


Figura. 1: Diámetro de trazas vs. tiempo de procesado químico. a) Diámetro mayor, b) Diámetro menor. ● Valores medidos. Cada punto corresponde al valor promedio de alrededor de 60 trazas medidas individualmente. La línea llena se dibuja como referencia y corresponde a un hipotético diámetro de traza que ha evolucionado con velocidad de ataque químico constante.

#### Referencias

- 1.- Price P.B. and Walker R.M. J. App. Phys. 33, 12, 3407-3412. (1962).
- 2.- Bean C.P., Doyle M.V. and Entine G. J. App. Phys. 41, 4, 1454-1459. (1970).
- 3.- Bernaola O.A., Mazzei R., Saint-Martin G. and Grasso J.C. Nucl. Tracks Radiat. Meas. 15, 1-4, 141-144. (1988).
- 4.- Meoli P., Mazzei R. and Bernaola O.A. J. Phys. Cond. Matt. 5-A33, 311-312. (1993).
- 5.- Apel P.Yu and Ovchinnikov. Rad. Eff. Def. Sol. 126, 217-220. (1993).
- 6.- Petersen F. and Enge W. Rad. Meas. 25, 1-4, 43-46. (1995).

# ESTUDIO DE LAS RELAJACIONES ALREDEDOR DE IMPUREZAS SUSTITUCIONALES EN SEMICONDUCTORES MEDIANTE EL MODELO ANARMÓNICO DE KEATING.

R.A. Casali y M.A. Mroginski \*

Dto. de Física .Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura -Universidad Nacional del Nordeste  
Av. Libertad 5600 – 3400 Corrientes – Argentina  
e-mail.: rac@exa.unne.edu.ar

Se presenta un estudio de las propiedades estáticas y dinámicas del Si semiconductor de estructura diamante cuando se dopa con impurezas sustitucionales del grupo IV. Se emplea para tal fin clusters de 71 a 281 átomos interactuando mediante constantes de fuerza de dos y tres cuerpos definidas en el modelo anarmónico de Keating. Con esta aproximación se presentan cálculos de las constantes de resorte de varios modos locales relevantes de vibración de la red cristalina. Se analizan las relajaciones radiales de las distintas capas que rodean al defecto y las variaciones de energía elástica experimentadas por la red inducida por la impureza.

Static and dynamic properties of Si have been studied when doped with substitutional impurities from group IV. Calculations were made using clusters of 71 to 281 atoms interacting with each other by means of two and three body force constants defined according to the anharmonic Keating model. With this approximation, elastic constants of several important local lattice vibrational modes were calculated. Radial relaxations of shells surrounding the defect and impurity induced elastic energy changes experimented by the crystal lattice were analyzed.

## I. INTRODUCCIÓN

La gran demanda de nuevos materiales por parte de la industria, ha llevado al desarrollo de numerosos métodos que describan la estructura interna de la materia.

Uno de los primeros métodos que surgieron para el estudio de las propiedades dinámicas y elásticas de redes cristalinas con estructura diamante fue el método de las Ondas Largas de M.Born y K.Huang<sup>(1)</sup>. Años más tarde este método fue corregido y mejorado por Musgrave y Pople<sup>(2)</sup>, por medio de potenciales de interacción interatómicos correspondientes a distorsiones stretching, bending y una combinación de éstas. P.N.Keating<sup>(3)</sup>, imponiendo condiciones de invariancia sobre la energía elástica del cristal ante operaciones de simetría en el mismo, redujo el número de constantes del modelo de Musgrave y Pople de cinco a dos. Estos métodos son también conocidos como Valence Force Field (VFF). Otras contribuciones a la dinámica de red se debe a las aproximaciones desarrolladas por W.Cochran<sup>(4)</sup>, y por J. C.Phillips<sup>(5)</sup>. Posteriormente, W.Weber<sup>(6)</sup> desarrolló el modelo denominado Bond-Charge Model, que reunía características de distintas aproximaciones desarrolladas hasta ese momento. Este modelo describe muy bien las curvas de dispersión de los fonones acústicos de cristales tipo diamante, pero requiere de un mayor número de parámetros que deben ser ajustados, comparado con los que se necesitan en otros métodos. Entre todos los modelos mencionados, el modelo de Keating obtuvo una gran popularidad entre los solidistas dedicados al estudio de propiedades dinámicas y estructurales de semiconductores estructura diamante y zinc-blenda, por su transparencia, simpleza y contenido físico<sup>(7)</sup>. Muy

recientemente, H. Rücker y M Methfessel<sup>(8)</sup> modificaron exitosamente el modelo clásico de Keating, renormalizando las constantes del modelo con los parámetro de red, con el fin de poder describir grandes compresiones hidrostáticas en el bulk. Esta aproximación se aplicó luego al estudio de distorsiones y propiedades dinámicas de aleaciones semiconductoras compensadas construídas a partir de elementos con propiedades tan disímiles como el carbono, silicio y germanio. Sin embargo, un estudio de las características de propagación de distorsiones inducidos por impurezas no ha sido aún dado a conocer.

En el presente trabajo hemos utilizado este método para estudiar las propiedades mecánicas de la red y su propagación cuando un defecto es insertado en la misma. Este desarrollo es posible gracias a la relativa simplicidad de este modelo, que a partir de unos pocos parámetros renormalizables con las distancias interatómicas y con relativamente poco esfuerzo computacional permite el estudio de sistemas del orden de la centena de átomos.

En la actualidad, existen métodos mecánico-cuánticos *ab initio* (de primeros principios) con los cuales se puede reproducir con mucha precisión las propiedades dinámicas y elásticas de cristales perfectos y con defectos<sup>(9)</sup>. Sin embargo, al ganar precisión en la determinación teórica de constantes físicas, se reduce el número de átomos que entran en el sistema en cuestión o el esfuerzo computacional crece en forma geométrica como  $N^2$  en memoria de CPU y  $N^3$  en tiempo de ejecución, donde  $N$  es el número de átomos. Estas condiciones restringen su aplicación a sistemas de pocos átomos. Es justamente en esos casos en que estudios realizados con el modelo de

Keating, en conjunción con los más exigentes computacionalmente ab-initio, cobran gran importancia.

## II. DESCRIPCIÓN DEL MODELO TEÓRICO

El modelo de Keating es un modelo sencillo fenomenológico empleado en el estudio de la dinámica de red y cálculo de la energía elástica de cristales semiconductores con estructura diamante y zinc blenda. Según este modelo la energía elástica del cristal se obtiene desarrollando la misma con respecto a pequeños desplazamientos atómicos relativos a los correspondientes sitios de la red del cristal perfecto. Los coeficientes del desarrollo constituyen las constantes de fuerza de dos y tres cuerpos ( $\alpha$  y  $\beta$ ), cuyos valores se ajustan a partir de datos experimentales provenientes de la teoría de la elasticidad o cálculos de estructura electrónica de primeros principios<sup>(10)</sup>. Las expresiones que relacionan los parámetros de fuerza definidos en este modelo con las constantes elásticas del cristal son las siguientes:

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^4 \left\{ \frac{3}{16 |\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0|^2} \alpha^i \left[ (\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0)^2 - (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)^2 \right]^2 + \sum_k \frac{3}{16 |\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0| |\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_k^0|} \beta_{ijk}^i \left[ (\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0)(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_k^0) - (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k) \right]^2 \right\}$$

donde  $\mathbf{R}_i^0$  son las posiciones de equilibrio de los átomos, mientras que las  $\mathbf{R}_i$  representan las posiciones de los átomos desplazados; y las  $\alpha^i$  y las  $\beta_{ijk}^i$  constituyen respectivamente los llamados parámetros de *bond-stretching* (constantes de fuerza de dos cuerpos) y *bond-bending* (constantes de fuerza de tres cuerpos).

Este modelo armónico describe aceptablemente la energía elástica de cristales con las estructuras mencionadas, como por ejemplo el Silicio. En el caso de estructuras diamante y zinc blenda las  $\alpha^i$  y las  $\beta_{ijk}^i$  se reducen a dos parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  respectivamente.

En las modificaciones introducidas por H.Rücker y M.Methfessel (RM)<sup>(8)</sup>, que constituyen el aquí denominado *Modelo anarmónico de Keating* para semiconductores formados a partir de átomos del grupo IV (C, Si, Sn, Ge, SiC, GeC, GeSi, SnC, SnSi, SnGe), se consideran parámetros de fuerza que dependen explícitamente de la geometría local. Se incluyen los términos de orden superior en la formulación de la energía elástica del cristal. RM encontraron que las constantes de fuerza se redefinen mediante una ley de potencia que depende de la distancia interatómica según las siguientes expresiones:

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij}^0 \left( \frac{r_{ij}^0}{r_{ij}} \right)^4 ;$$

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) = \frac{1}{a_0} \left( \alpha + \frac{1}{3} \beta \right)$$

$$C_{11} - C_{12} = \frac{4}{a_0} \beta ; \quad C_{44} = \frac{4}{a_0} \frac{\alpha \beta}{\alpha + \beta}$$

$$m\omega_0^2 = 8(\alpha + \beta)$$

donde B es el módulo de Bulk,  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  y  $C_{44}$  son las constantes de rigidez elásticas y  $\omega_0$  es la frecuencia de vibración del modo normal TO( $\Gamma$ ) (Transversal Optico en  $\Gamma$ ). Este modelo armónico tiene restricciones que lo hacen válido en el límite de pequeñas distorsiones. Por otra parte el número limitado de parámetros de interacción restringe su aplicación a la determinación de las curvas de dispersión de fonones, exceptuando las ramas acústicas. Para una completa descripción de estas curvas es necesario agregar otras tres constantes de interacción de tres ( $\gamma$ ,  $\tau$ ) y cuatro cuerpos (k). La expresión de la energía elástica es la siguiente:

$$\beta_{ijk} = \beta_{ijk}^0 \left( \frac{r_{ij}^0}{r_{ij}} \right)^{7/2} \left( \frac{r_{ik}^0}{r_{ik}} \right)^{7/2}$$

donde  $r_{ij}$  y  $r_{ij}^0$  son las longitudes de los enlaces en la red distorsionada y no distorsionada respectivamente.

Con esta aproximación se obtiene una muy buena descripción de las propiedades no lineales de la variación de la energía elástica con el volumen en Si.

## III. RESULTADOS

Se aplicó el modelo anarmónico de Keating a la determinación de la propagación radial de deformaciones y al cálculo de las constantes de fuerza  $k_Q$  de distintos modos locales de vibración de la red cristalina de Si. Los modos locales de vibración estudiados son modos cuasimoleculares que se originan al introducir un defecto en Si puro. Obviamente estos modos afectan principalmente al entorno más cercano al defecto

La relación entre las  $k_Q$  y la variación de la energía elástica para un determinado modo puede ser expresada, para pequeñas oscilaciones, mediante la siguiente fórmula:

$$\Delta E = \frac{1}{2} k_Q u_Q^2$$

donde  $u_Q$  es la amplitud de oscilación del modo local normal Q.

A partir de esta relación se han calculado las constantes de fuerza de los modos locales de vibración para cristales de Silicio dopados con impurezas del grupo IV. Los resultados obtenidos se muestran en las tablas I y III. En la tabla I podemos verificar el buen acuerdo, de las constantes de fuerza para el modo breathing con simetría  $T_d$  (Fig. 2<sup>a</sup>), que existe entre nuestra determinación con los resultados provenientes de cálculos *ab-initio* con superceldas de 16 (FP-LMTO)<sup>(11)</sup> y 54 (pseudopotenciales y ondas planas)<sup>(10)</sup> átomos. En la tabla III, se verifica que los corrimientos de las constantes de fuerza del host de los modos locales cuasimoleculares de oscilación, dá origen a desplazamientos de frecuencias relativo,  $\Delta\Omega_Q^r$ , como se define a continuación. Sea

$$\Delta\Omega_Q^r = (\omega_{Q,1} - \omega_Q^0) / \omega_Q^0$$

el corrimiento de frecuencia para el modo Q.

Se puede demostrar que

$$\Delta\Omega_Q^r = \left( \sqrt{\frac{k_{Q,1}}{k_Q^0}} - 1 \right)$$

donde  $k_{Q,1}$  es la constante de fuerza del modo Q del host debido a la presencia de la impureza y  $k_Q^0$  la constante de fuerza del mismo modo sin la impureza. Se halló que estos corrimientos  $\Delta\Omega_Q^r$  para el C como impureza son: 0.146 ( $T_d$ ), 0.112 ( $D_{2d}$ ) y 0.131 ( $C_{2v}$ ). Para el Ge -0.027 ( $T_d$ ), -0.008 ( $D_{2d}$ ) y -0.015 ( $C_{2v}$ ) mientras que para el Sn se obtuvo -0.075 ( $T_d$ ), -0.039 ( $D_{2d}$ ) y -0.055 ( $C_{2v}$ ). Esto indica que las mayores perturbaciones dinámicas producidas son debidas al C, con corrimientos de frecuencias positivas que llegan al 14.6%, y corrimientos negativos para los átomos mayores que los del host.

La introducción de un defecto en la red genera un campo de tensiones que se propaga en la misma hasta el infinito. Este campo de tensiones, en el caso de defectos sustitucionales con simetría tetrahédrica, induce distorsiones de relajación que dependerán de las diferencias químicas entre el defecto y el sustrato (host). Este proceso de relajación fue simulado hallando el mínimo de energía del sistema desplazando radialmente los átomos de la primera capa, segunda y subsiguientes para volver nuevamente a la primera capa, en un proceso iterativo. El proceso se detiene cuando se obtiene una convergencia en la energía del orden de  $10^{-6}$  eV. Este mínimo se alcanza con alrededor de 8 a 12 iteraciones. Se trabajó con clusters de 71 a 281 átomos colocando la impureza en el centro de coordenadas y relajando hasta la 16ta. capa inclusive. La convergencia de energía con este número de capas es de 10 meV (Si:C), 0.1 eV (Si:Sn) y 0.01 eV (Si:Ge). Los valores obtenidos hasta la 5ta. capa se muestran en la tabla IV. Los gráficos de la amplitud radial de las distorsiones de átomos del host en función de la distancia a la impureza son mostrados en las figuras 3a-3c, para impurezas de C, Sn, Ge en Si.

#### IV. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

En este trabajo se ha presentado un estudio de las propiedades estructurales y dinámicas locales de compuestos semiconductores con estructura tipo diamante. En particular se han estudiado las relajaciones experimentadas por una red de Si al doparla con impurezas sustitucionales del grupo IV y la variación de la energía elástica experimentada por la red durante dicho proceso, empleando para ello el modelo de Keating modificado por H.Rücker y M.Methfessel. Los patrones de distorsión obtenidos en este trabajo concuerdan con los encontrados por M. Scheffer y J.Dabrowski<sup>(10)</sup> para el Si:As<sup>+</sup> ya que las amplitudes de las relajaciones decrecen paulatinamente a medida que aumenta la distancia a la impureza, produciéndose un brusco aumento principalmente en las capas 1, 5, 8 y 11. Las amplitudes decrecen en con una envolvente que no se podría ajustar a términos individuales de potencias del tipo  $r^{-n}$ , tal como se sugiere en la literatura clásica de defectos. Por ejemplo, la amplitud de relajación radial de la capa 5ta. Es aprox. 1/10 de la amplitud de distorsión de la primera capa, normalmente considerada como la más importante. En ningún caso la relajación de la capa 5ta. supera el 1,2% de la distancia al defecto.

Se verificó (Tabla IV) que la incorporación del Carbono en sitio sustitucional dá lugar a importantes variaciones de la energía elástica y distorsiones inward mucho mayores a las observadas cuando las impurezas son de mayor tamaño al átomo de Silicio, como ser Germanio y Estaño (relajaciones outward). La variación de energía elástica que experimenta la red, inducida por el C en Si, (-1.43 eV) es mayor en aprox. un factor 2.2 a la inducida por Sn (-0.64 eV) y un factor 89 en el caso del Ge (-0.016 eV).

Comparando nuestros resultados de relajación a 1eros. vecinos para Ge sustitucional en Si, con confiables valores medidos con la técnica de rayos X, EXAFS<sup>(12)</sup>, vemos que el modelo anarmónico de Keating predice relajaciones inducidas similares del Ge y As. La distancia a primeros vecinos,  $d_{Si-As}=2.41$  Å (EXAFS) es muy cercana a la  $d_{Si-Ge}=2.375$  Å aquí hallada. Por otra parte, análogo comportamiento es observado entre el Sn y el Sb, este último medido con espectroscopía y reportados por Bechstedt-Harrison<sup>(13)</sup>, donde  $d_{Si-Sb}=2.48$  Å, mientras que  $d_{Si-Sn}=2.49$  Å.

Los resultados obtenidos aquí nos han permitido demostrar la gran efectividad y la sencillez del modelo anarmónico de Keating en la descripción de las distorsiones inducidas por un defecto en la red cristalina, y en la determinación cuantitativa de las amplitudes de relajación, como así también en el estudio de las variaciones de la energía elástica del cristal. En este trabajo apenas se exploraron unas pocas de las muchas propiedades físicas que se pueden estudiar con este modelo. Mediante este trabajo se obtuvo experiencia para estudiar en un corto plazo la estabilidad, propiedades elásticas y vibracionales de clusters de defectos y en el mediano plazo, aleaciones<sup>(14)</sup>.

## REFERENCIAS

- 1- M.Born y K.Huang , *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, (Oxford University Press, New York) (1954)
- 2- M.J.P.Musgrave and J.A.Pople, Proc. Roy. Soc., A268, 474 (1962)
- 3- P.N. Keating , Phys Rev , 145, 637 (1966)
- 4- W.Cochran , Proc. R. Soc. A 253 , 260 (1959)
- 5- J.C.Phillips, Phys. Rev. 168, 905 (1968)
- 6- W.Weber , Phys.Rev. B, 15,4789 (1977)
- 7- R.Martin, Phys. Rev. B, 1, 4005 (1970)
- 8- R. Rucker , M.Methfessel , Phys Rev . B,52,11059 (1995).
- 9- R.A.Casali, M.A.Caravaca and C.O.Rodriguez, Phys. Rev. B 54, 16701, (1996)
- 10- M. Scheffer y J. Dadbrowski , Philosophical Magazine A. 58 , Nro 1 (1988)
- 11- R.A.Casali y M.A.Caravaca , no publicado
- 12- A.Erbil, W.Weber, G.S.Cargill III and R.F.Bohme, Phys. Rev. B 34, 1392 (1986).
- 13- Bechstedt y W.Harrison, Phys. Rev. B 39, 5041 (1989)
- 14- M.A.Berding , M. van Schilfgaarde, y A. Sher . Phys.Rev. B, 50, 1519 , (1994)

**TABLAS**

**TABLA I :** Constantes de fuerza  $k_Q$  [ $\text{ev}/\text{\AA}^2$ ] de modos locales en Silicio puro (Si:Si).  $U=0.01 \text{ \AA}$

Modos	$K^c$ sin corrección	RM <sup>d</sup> sin corrección	RM con corrección	Si <sub>8</sub>	Si <sub>16</sub>	Otros
T <sub>d</sub>	66.5075	62.4266	62.9447	64 <sup>b</sup>	62.5 <sup>b</sup>	61 <sup>a</sup>
C <sub>2v</sub>	67.374	63.2579	63.2595			
D <sub>2d</sub>	68.1978	64.048	64.1105			
C <sub>3v(i)</sub>	16.4135	15.4017	15.5221			
C <sub>2v(i)</sub>	16.4135	15.4017	15.4014	12.6 <sup>b</sup>		

a) M.Scheffler y J. Dabrowski<sup>(10)</sup>

b) Resultados del LMTO.<sup>(11)</sup>

c) Resultados obtenidos del cálculo empleando los parámetros de fuerza extraído del artículo de P.N.Keating ( $\alpha_{\text{Si}} = 3.027 \text{ ev}/\text{\AA}^2$ ,  $\beta_{\text{Si}} = 0.861 \text{ ev}/\text{\AA}^2$ )<sup>(3)</sup>

d) Resultados obtenidos del cálculo empleando los parámetros de fuerza extraídos del artículo de H.Rücker y M. Methfessel ( $\alpha_{\text{Si}} = 2.818 \text{ ev}/\text{\AA}^2$ ,  $\beta_{\text{Si}} = 0.8259 \text{ eV}/\text{\AA}^2$ )<sup>(8)</sup>

**Tabla II:** Parámetros de fuerza de dos ( $\alpha_{ij}$ ) y tres cuerpos ( $\beta_{ijk}$ ) en  $\text{eV}/\text{\AA}^2$  extraídos del artículo de H.Rücker y M. Methfessel<sup>(8)</sup> y empleados en el cálculo de la energía elástica de la red de Si.

$\alpha_{\text{Si-Si}}$	2.818	$\beta_{\text{Si-Si-Si}}$	0.8259
$\alpha_{\text{Si-C}}$	4.2755	$\beta_{\text{Si-Si-C}} = \beta_{\text{Si-C-Si}}$	1.7491
$\alpha_{\text{Si-Ge}}$	2.575	$\beta_{\text{Si-Si-Ge}} = \beta_{\text{Si-Ge-Si}}$	0.8259
$\alpha_{\text{Si-Sn}}$	2.1864	$\beta_{\text{Si-Si-Sn}} = \beta_{\text{Si-Sn-Si}}$	0.583

**TABLA III :** Constantes de fuerza calculadas  $k_Q$  [ $\text{ev}/\text{\AA}^2$ ] de modos locales en Si. dopado con impurezas del grupo IV con parámetros de RM.  $U = 0.01 \text{ \AA}$

Imp. \ Modo	T <sub>d</sub>	C <sub>2v</sub>	D <sub>2d</sub>	C <sub>3v(i)</sub>	C <sub>2v(i)</sub>
C	82.7007	80.8776	79.3282	27.1906	27.1906
Ge	59.6244	61.3679	63.1121	14.3895	14.3895
Sn	53.8495	56.4864	59.1382	11.5069	11.5069

**TABLA IV :** Resultado de las distorsiones radiales alrededor del defecto y variación de la energía elástica en la red de Si al doparla con Ge, C y Sn .

	Si : Ge <sup>a</sup>	Si : C <sup>b</sup>	Si : Sn <sup>a</sup>
Dist. a 1 <sup>eros</sup> vecinos [ $\text{\AA}$ ]	2.375	2.05	2.493
Distorsión de la 1 <sup>ra</sup> capa	1,05 %	-12.8 %	6.1 %
Distorsión de la 2 <sup>da</sup> capa	0.2%	-2,7 %	1%
Distorsión de la 3 <sup>ra</sup> capa	0.02%	-0,2%	0.1%
Distorsión de la 4 <sup>ta</sup> capa	0. %	-0.09%	0%
Distorsión de la 5 <sup>ta</sup> capa	0.1%	-1,2%	0,5%
$\Delta$ Energía elástica (eV)	-0.016	-1.43	-0.64

a) distorsiones hacia afuera

b) distorsiones hacia adentro

FIGURAS

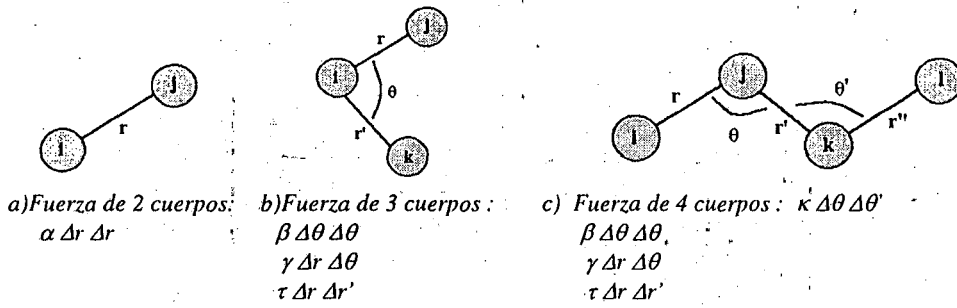


Fig 1 : Esquema de las fuerzas entre dos (a), tres (b), y cuatro (c) cuerpos.

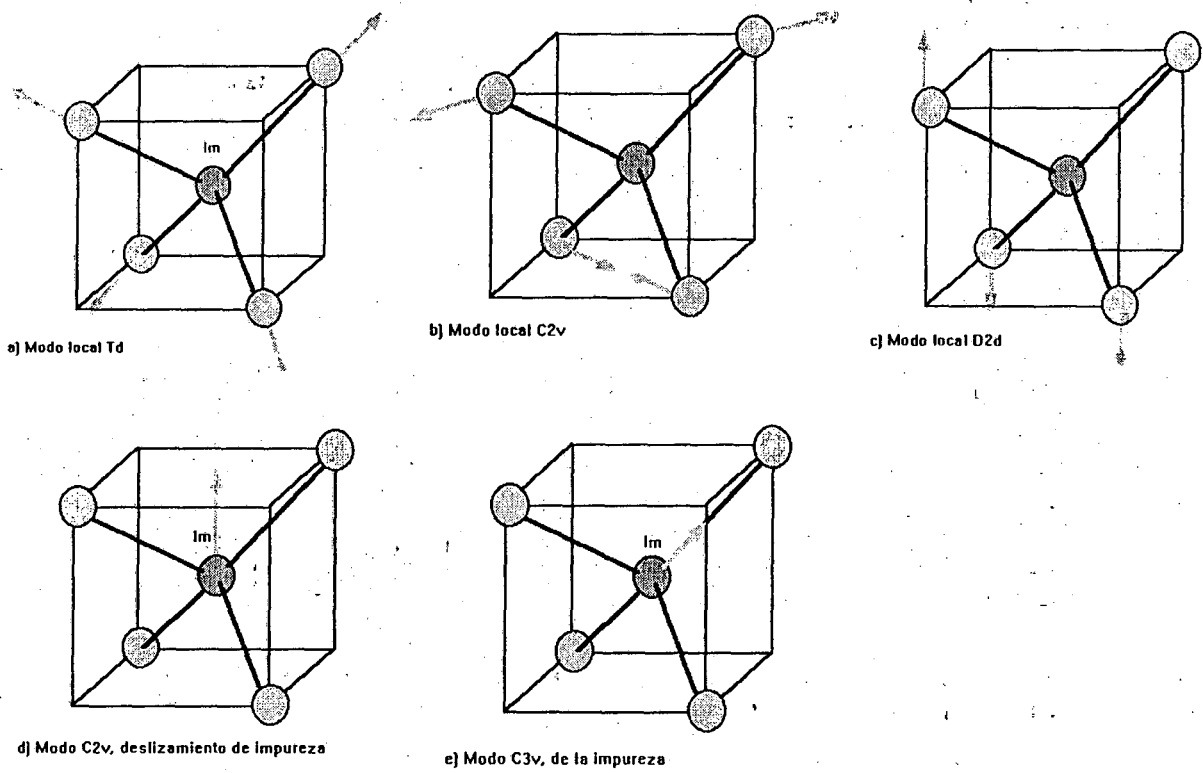


Fig 2: Modos normales locales de vibración de una red cristalina. a) Td, b) C2v, c) D2d, d) C2v de la impureza, y e) C3v de la impureza.



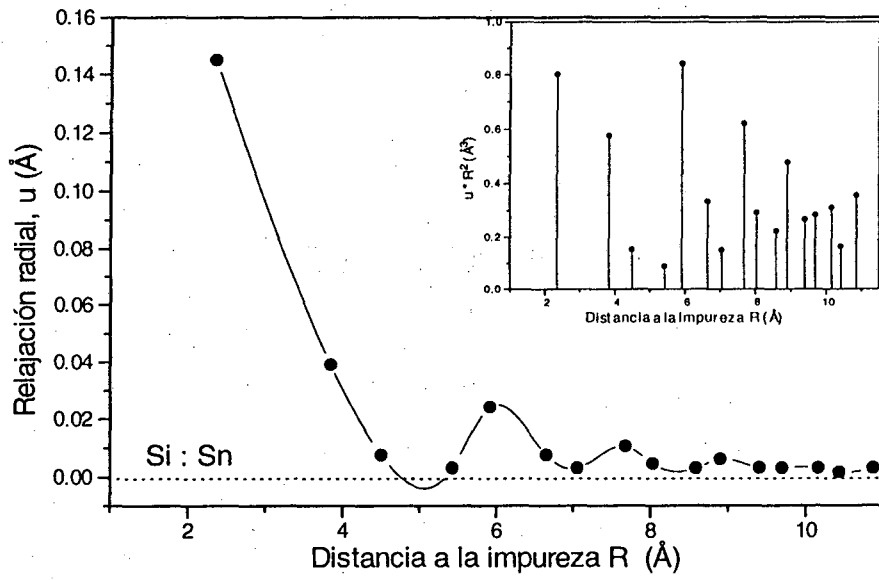


Fig. 3a

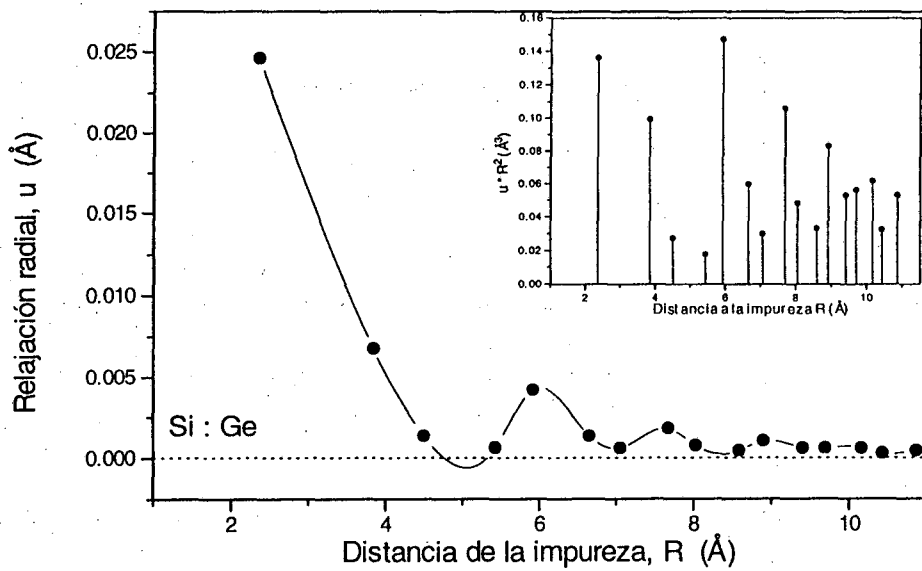
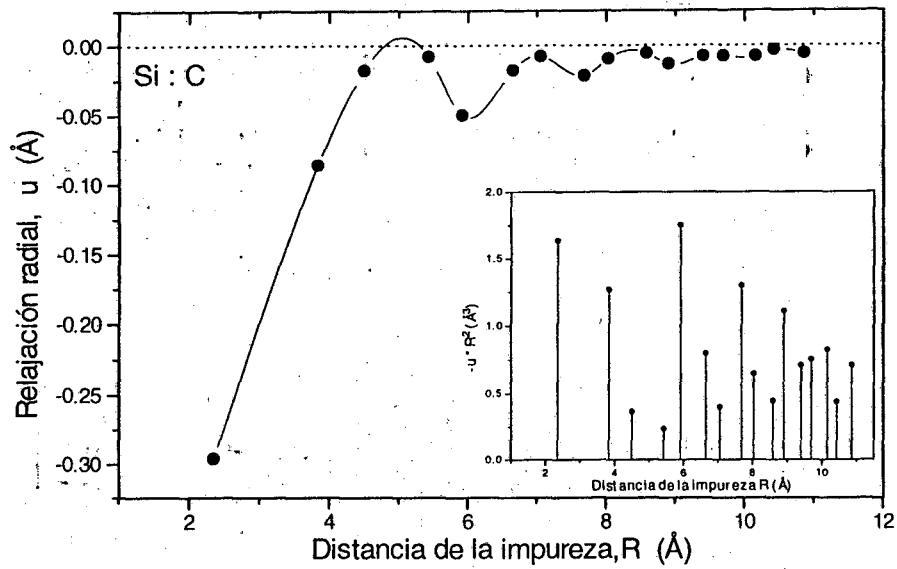


Fig. 3b



**Fig. 3c**

*Fig 3: Amplitudes de relajación de la red de Si al introducir una impureza sustitucional a) de Sn , b) de Ge y c) de C. En las ordenadas de las figuras insertadas se representan las amplitudes multiplicadas por  $R^2$  siendo  $R$  la distancia de la capa respectiva a la impureza.*