



**MODELIZACIÓN DE LA EVOLUCIÓN DE DEFECTOS EN Al_2O_3 BAJO
IRRADIACIÓN**

MODELING OF DEFECT EVOLUTION IN Al_2O_3 UNDER IRRADIATION

Autor: Francisco José Niebla Castaño
franciscojose.niebla@ciemat.es

Director: Christophe Ortiz
christophe.ortiz@ciemat.es

ÍNDICE

Introducción.....	1
Descripción del modelo.....	3
Ecuaciones de difusión.....	3
Breve reseña sobre DFT.....	5
Discusión.....	7
Conclusiones.....	9
Referencias.....	10

Spanish Abstract

En el presente trabajo se ha realizado un estudio de la difusión de los defectos generados en Al_2O_3 bajo irradiación mediante simulaciones. Este material aislante se considera un buen candidato como parte funcional en los futuros reactores de fusión debido a sus diferentes propiedades. El trabajo se centra principalmente en la evolución de las vacantes de oxígeno neutras (conocidas como centros F), así como sus correspondientes con carga neta positiva (conocidas como centros F^+), con y sin presencia de campo eléctrico. Para llevar a cabo este trabajo, nos hemos basado en la teoría cinética de las reacciones que permite desarrollar modelos de difusión que han resultado ser muy eficientes desde el punto de vista numérico. Debido a que estos modelos necesitan parámetros de entrada, como por ejemplo la energía de formación de los defectos, de manera complementaria se han realizado cálculos *ab-initio* basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT por sus siglas en inglés, Density Functional Theory) con el objetivo de hallar las energías de formación de los defectos considerados. Se ha comparado la evolución temporal de estos defectos en un ancho rango de temperaturas (50-300 °C) y, siempre que ha sido posible, se han comparado los resultados de simulación obtenidos con los datos experimentales disponibles.

English Abstract

In the present work we have developed a diffusion model to investigate the evolution of defects in Al_2O_3 under irradiation, insulator material which is a candidate to be used as a functional part in the future fusion reactors. The work is mainly dedicated to neutral oxygen vacancies (the so called F centers), and also to the corresponding positive charged ones (F^+ centers). We compare the time evolution of these defects under irradiation with experimental data in a wide range of temperatures (from 50 °C to 300 °C) with and without electrical field. The developed model is based on the so-called kinetic theory of reactions which has shown to be very efficient for the numerical simulation of diffusion phenomena. This methodology can be used to design a set of coupled partial differential equations from some assumptions about possible reactions between intrinsic point defects and impurities, if present. Some of the input parameters of the model, such as the formation energy of some defects, were not known and had to be calculated *ab initio*. To do so, we used the well-known Density Functional Theory, in particular to calculate the formation energy of F-related defects. When it was possible, we compared our theoretical results with experimental data available.

INTRODUCCIÓN

La fusión nuclear por confinamiento magnético se presenta como una de las soluciones a largo plazo al problema energético al que se enfrenta actualmente nuestra sociedad. Una de las mayores ventajas que ofrece esta fuente de energía es su bajo impacto ambiental debido a que los residuos generados son materiales de baja activación que no representan en principio un grave problema radiológico, frente a los residuos radiactivos generados por los actuales reactores de fisión cuyo impacto ambiental es bien conocido. A esto se suma el problema de seguridad que llevan aparejados estos últimos, como hemos tenido oportunidad de comprobar recientemente con el accidente ocurrido en Fukujima (Japón), o el acaecido en los años 80 en la central de Chernobil.

En el diseño de un reactor de fusión juega un papel muy importante el estudio de los materiales a utilizar. Éstos pueden dividirse en dos clases dependiendo de la misión que tengan encomendada: materiales estructurales, que constituyen aproximadamente el 95% del reactor, en su mayoría aceros de diferentes tipos; y los funcionales, que constituyen casi el 5% restante, constituidos fundamentalmente por aislantes eléctricos como, por ejemplo, SiO_2 y Al_2O_3 . No hay que pensar que debido a que son utilizados en una mínima proporción, los materiales funcionales son poco relevantes, ya que su papel es de extrema importancia puesto que en definitiva un reactor de fusión (en el cual

el plasma viaja en su interior) puede ser considerado como una máquina eléctrica. De aquí que sea sumamente importante conocer el comportamiento de los materiales aislantes bajo las condiciones de presión, temperatura e irradiación a las que estarán expuestos una vez el reactor esté operativo. El papel de estos materiales funcionales puede ser muy diverso, ya que pueden localizarse en lugares muy variados, aunque normalmente suelen dividirse en tres grandes grupos dependiendo de su función: sistemas de diagnósticos, sistemas de calentamiento del plasma, y mantenimiento remoto del reactor.

El daño por radiación proviene de varias fuentes, siendo la más relevante la provocada por los neutrones generados por la reacción de fusión:



entre el deuterio y el tritio. Estos neutrones y otras partículas energéticas secundarias (como electrones y fotones de alta energía) pueden desplazar los átomos de su posición natural en la estructura cristalina del material, generando una gran cantidad de defectos. Estos desplazamientos pueden provocar que el material termine perdiendo sus propiedades aislantes. Ello se debe principalmente a que la presencia de estos defectos añade estados disponibles en la banda prohibida de energía que se halla entre el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción

del material. Estos estados pueden ser ocupados por electrones que saltan desde la banda de valencia, modificando de esta forma las propiedades aislantes de dicho material. Una de las consecuencias que produce este daño por radiación, sobre todo en los óxidos como MgO y Al₂O₃, es un incremento inmediato en la conductividad eléctrica del material (efecto conocido como RIC por sus siglas en inglés, “Radiation Induced Conductivity”). Sin embargo, si el daño se prolonga en el tiempo puede dar lugar a una degradación permanente del material que afecta de forma crítica a sus propiedades eléctricas (el conocido como efecto RIED, “Radiation Induced Electrical Degradation”). Ambos efectos se muestran esquemáticamente en la Figura 1. En ella se representa la variación cualitativa de la resistencia eléctrica en función del tiempo de irradiación. Una de las motivaciones del presente trabajo es intentar comprender por qué se produce este fenómeno, y qué papel juega en el mismo los defectos en la red del material.

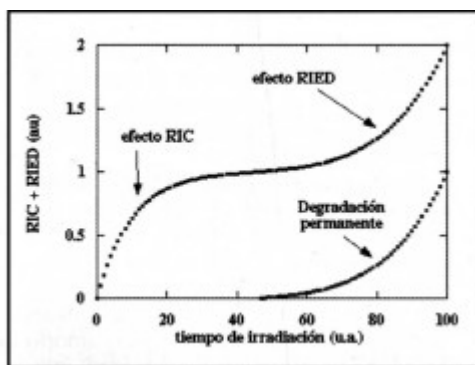


Figura 1. Los efectos RIC y RIED.

Los defectos intrínsecos principales que pueden darse en un material son básicamente dos: los intersticiales y las vacantes. Las vacantes son lugares de la red que no están ocupados por sus átomos correspondientes. Los intersticiales son átomos adicionales que se colocan en lugares bien definidos pero que no son puntos de la red (véase la Figura 2). La alúmina está constituida por dos tipos atómicos diferentes (Al y O) por lo que sus defectos puntuales podrán ser vacantes de aluminio u oxígeno, o bien intersticiales de aluminio u oxígeno. Por analogía con los haluros alcalinos a la vacante aniónica neutra respecto de la red se le suele denominar centro F. En el caso de la alúmina el centro F se corresponde con una vacante de oxígeno en la cual se han acomodado dos electrones. Si por algún motivo este centro F pierde un electrón tendríamos entonces lo que se denomina centro F⁺. En ocasiones las vacantes suelen agruparse por parejas, o incluso en grupos más complejos, lo que da lugar a la generación de aglomerados [véase b) en Figura 2].

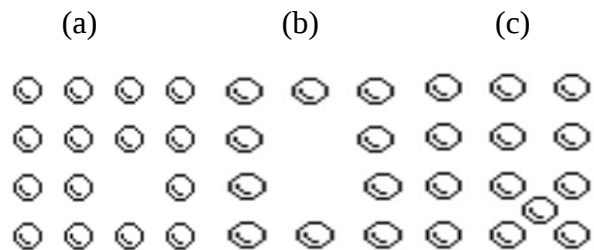
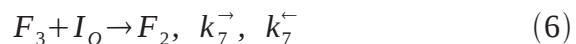
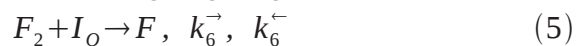
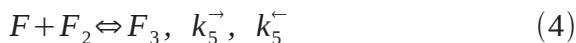
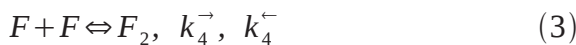
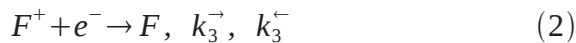


Figura 2. a) Vacante; b) divacante; c) intersticial. Figura esquemática de una red cristalina general.

DESCRIPCIÓN DEL MODELO

Para establecer el conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas que simulan nuestro problema primero debemos decidir cuáles son las reacciones más importantes que tienen lugar entre los distintos tipos de defectos. Nos basamos fundamentalmente en los defectos de oxígeno ya que sus bandas de radioluminiscencia y absorción óptica se observan más fácilmente que las de los defectos de aluminio. Para las condiciones experimentales que queremos reproducir, pensamos que nuestro sistema puede ser correctamente representado por las siguientes reacciones:



donde el símbolo I_O representa un intersticial de oxígeno, F_2 un aglomerado de dos centros F , y F_3 el correspondiente aglomerado de tres centros F . La primera reacción representa la recombinación de una vacante de oxígeno con un intersticial mediante la cual el intersticial vuelve a un lugar de la red. La segunda reacción constituye la neutralización de un centro F cargado positivamente con un electrón. En las dos últimas reacciones también se contempla la

posibilidad de que un intersticial de oxígeno se recombine con los aglomerados F_n , reduciendo su tamaño. Las constantes k_i que aparecen a la derecha de las reacciones son las denominadas constantes de reacción, cuyo cometido se explica en la siguiente sección.

ECUACIONES DE DIFUSIÓN

El formalismo seguido aquí para establecer el sistema de ecuaciones diferenciales acopladas ha sido utilizado ya con éxito por otros autores [1], [2]. En este formalismo se supone que las reacciones que tienen lugar son binarias, como las mostradas en la sección anterior, asociándose a cada reacción dos constantes: k^{\rightarrow} y k^{\leftarrow} . k^{\rightarrow} define el número de reacciones que ocurren por unidad de volumen y de tiempo mientras que k^{\leftarrow} describe la frecuencia con la que se disocia el complejo formado. De esta forma el término de generación-recombinación para una reacción del tipo $A + B \rightleftharpoons C$ quedaría de la siguiente forma:

$$GR = k^{\rightarrow} C_A C_B - k^{\leftarrow} C_C$$

Si además suponemos que algunos defectos son móviles (poseen un coeficiente de difusión no nulo), entonces la conservación de la masa da lugar a la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C) - GR$$

donde C representa la concentración del defecto,

y D su correspondiente coeficiente de difusión. Sólo nos queda por determinar la forma que adquieren las constantes de reacción k^{\rightarrow} y k^{\leftarrow} . Puede demostrarse (véanse las Refs. [2] y [3]) que estas constantes para una reacción del tipo $A + B \leftrightarrow C$ se escriben de la siguiente manera:

$$k^{\rightarrow} = 4\pi r_{AB}(D_A + D_B)$$

$$k^{\leftarrow} = k^{\rightarrow} \cdot N_s \cdot \exp\left(-\frac{G_A^f + G_B^f - G_C^f}{k_B T}\right)$$

donde r_{AB} representa el denominado radio de captura entre las especies A y B (da una idea de la distancia máxima a la cual ambas especies pueden recombinarse, y su valor es del orden del nanómetro), G_A^f , G_B^f y G_C^f son las energías de formación de las distintas especies, y N_s es el número de lugares disponibles en la red. Las energías de formación están relacionadas con la energía de ligadura (binding, en inglés) por la siguiente expresión: $E_b = G_A^f + G_B^f - G_C^f$. Con todo esto ya estamos en condiciones de exponer las ecuaciones diferenciales a las que obedecen las concentraciones de las diferentes especies, teniendo en cuenta las reacciones (1)-(6) anteriores. Éstas son:

$$\frac{\partial [F]}{\partial t} = D_F \frac{\partial^2 [F]}{\partial x^2} - k_2^{\rightarrow} ([F][I_O] - [F]_{eq}[I_O]_{eq})$$

$$+ k_3^{\rightarrow} [F^+] n - 2k_4^{\rightarrow} [F]^2 + 2k_4^{\leftarrow} [F_2] - k_5^{\rightarrow} [F][F_2]$$

$$+ k_5^{\leftarrow} [F_3] + k_6^{\rightarrow} [F_2][I_O] + \gamma_1^{rad} - \gamma_2^{rad}$$

$$\frac{\partial [I_O]}{\partial t} = D_{I_O} \frac{\partial^2 [I_O]}{\partial x^2} - k_6^{\rightarrow} [F_2][I_O]$$

$$- k_7^{\rightarrow} [F_3][I_O] - k_2^{\leftarrow} ([F][I_O] - [F]_{eq}[I_O]_{eq})$$

$$+ \gamma_1^{rad}$$

$$\frac{\partial [F^+]}{\partial t} = D_{F^+} \frac{\partial^2 [F^+]}{\partial x^2} - k_3^{\rightarrow} [F^+] n$$

$$+ \gamma_2^{rad}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_{e^-} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - k_3^{\rightarrow} [F^+] n + \gamma_2^{rad}$$

$$\frac{\partial [F_2]}{\partial t} = k_4^{\rightarrow} [F]^2 - k_4^{\leftarrow} [F_2] - k_5^{\rightarrow} [F][F_2]$$

$$+ k_5^{\leftarrow} [F_3] - k_6^{\rightarrow} [F_2][I_O] + k_7^{\rightarrow} [F_3][I_O]$$

$$\frac{\partial [F_3]}{\partial t} = k_5^{\rightarrow} [F][F_2] - k_5^{\leftarrow} [F_3] - k_7^{\rightarrow} [F_3][I_O]$$

En las ecuaciones anteriores los términos γ_1^{rad} y γ_2^{rad} son términos constantes incluidos para tener en cuenta los defectos generados por la propia radiación. Estos términos son iguales para cada par de ecuaciones, es decir, cada vez que se crea una vacante de oxígeno se crea el correspondiente intersticial de oxígeno, y además cada vez que se crea un centro F^+ se crea a su vez un electrón como demanda la condición de neutralidad eléctrica. Estos términos fueron calculados con el código MARLOWE que permite calcular el daño generado en materiales bajo irradiación. Véase la referencia [8] para una descripción de este código.

Estas ecuaciones son válidas en ausencia de un campo eléctrico aplicado. Cuando se aplica un campo eléctrico aparece un término adicional que afecta a los defectos cargados. De esta forma, en presencia de dicho campo las

ecuaciones de evolución para los centros F^+ y para los electrones se escriben como:

$$\begin{aligned}\frac{\partial [F^+]}{\partial t} &= D_{F^+} \frac{\partial^2 [F^+]}{\partial x^2} - D_{F^+} \frac{qE}{k_B T} \frac{\partial [F^+]}{\partial x} \\ &\quad - k_3^- [F^+] n + \gamma_2^{rad} \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= D_{e^-} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + D_{e^-} \frac{qE}{k_B T} \frac{\partial n}{\partial x} - k_3^- [F^+] n \\ &\quad + \gamma_2^{rad}\end{aligned}$$

En estas ecuaciones q representa la carga elemental, E el campo eléctrico aplicado (en nuestro caso es de 200 kV/m), k_B la constante de Boltzmann, y T la temperatura absoluta. Como vemos, estos términos de flujo adicionales son proporcionales a la movilidad de los defectos ($\mu = Dq/k_B T$, relación de Einstein).

BREVE RESEÑA SOBRE DFT

La moderna teoría del funcional de la densidad (más conocida como DFT por sus siglas en inglés) se ha convertido en una herramienta muy utilizada tanto en el campo de la física como en la química, sobre todo en el área de la estructura de la materia y nanotecnología. En nuestro caso ha sido utilizada para calcular las energías de formación de algunos defectos intrínsecos en la alúmina, cómo la del centro F y los aglomerados F_2 y F_3 . Aquí se presenta una breve introducción, por lo demás informal, de sus características principales.

El hamiltoniano que describe un conjunto de átomos con sus electrones es el siguiente:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{-\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \\ &\quad - \sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|}\end{aligned}$$

donde los electrones son denotados con letras minúsculas y los núcleos, con carga eZ_I y masa M_I , son denotados con letras mayúsculas. Si como primera aproximación suponemos que la masa de los núcleos es infinita, podemos ignorar la energía cinética de éstos. Es lo que se conoce como aproximación de Born-Oppenheimer o adiabática, la cual es una excelente aproximación para muchos propósitos. Resolver la ecuación de Schrödinger con este hamiltoniano es un problema sumamente complicado, aunque hasta la fecha se han elaborado métodos muy sofisticados para su resolución, siendo el más simple de todos ellos el método de Hartree-Fock. Aquí es donde la DFT propone un método alternativo y en principio más simple.

La teoría DFT está basada fundamentalmente [4] en los teoremas de Hohenberg y Kohn. Estos teoremas se enuncian de la siguiente forma:

- **Teorema I:** Para cualquier sistema de partículas interactuantes en un potencial externo $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, el potencial $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ está determinado únicamente, salvo por una constante, por la densidad de partículas en el estado fundamental $n_0(\mathbf{r})$.
- **Teorema II:** Es posible definir un

funcional general para la energía $E[n]$ en términos de la densidad $n(\mathbf{r})$, válido para cualquier potencial externo $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$. Para un potencial $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ particular, la energía del estado fundamental del sistema es el valor mínimo de este funcional, y la densidad $n(\mathbf{r})$ que minimiza este funcional es la densidad del estado fundamental $n_0(\mathbf{r})$.

A partir de aquí la estrategia básica consiste en sustituir los términos de interacción electrón-electrón por otros que involucren sólo interacciones de una única partícula, y conservar toda la información sobre las interacciones de múltiples electrones en un único potencial auxiliar que suele recibir el nombre de potencial de intercambio y correlación en el mundo de la DFT. Entonces el nuevo hamiltoniano lo escribimos en la forma

$$H = T + V_{\text{KS}}$$

$$V_{\text{KS}} = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + \int \frac{e^2 n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' + V_{\text{XC}}[n(\vec{r})]$$

En la última expresión el primer término hace referencia al potencial externo en el cual se mueven los electrones (que es fijo en la aproximación adiabática puesto que los núcleos están quietos), el segundo da cuenta de la repulsión electrostática de los electrones (que suele denominarse término de Hartree), y el último término es el mencionado potencial de intercambio-correlación. Como puede comprobarse además hemos escrito estos

términos como funcionales de la densidad de partículas en base a los teoremas citados más arriba. De esta forma la ecuación de Schrödinger se escribe

$$[T + V_{\text{KS}}]\Psi_i = \epsilon_i \Psi_i$$

y la densidad de partículas tiene la expresión

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\Psi_i|^2$$

Para resolver numéricamente un problema mediante DFT, primero se postula una densidad de partículas inicial que se supone no estará muy alejada de la realidad. Con esta densidad inicial se halla el potencial efectivo que aquí hemos denotado como $V_{\text{KS}}[n]$, se resuelve a continuación la ecuación de Schrödinger, lo que proporciona las Ψ_i , que a su vez permite hallar una nueva $n(\mathbf{r})$, y el proceso se repite una y otra vez hasta hallar la convergencia. Es lo que suele denominarse resolver el problema de forma auto-consistente. A las tres ecuaciones anteriores se les suele denominar ecuaciones de Kohn-Sham.

Este método -la DFT- puede ser utilizado para hallar la energía total del sistema en consideración, y a partir de ella la energía de formación de diversos defectos. Para ello hemos utilizado la siguiente fórmula [7]:

$$H_f = E_T(\text{con defecto}) - \{E_T(\text{perfecta}) + n_0 \mu_0\}$$

donde E_T (*con defecto*) representa la energía total de una supercelda con defectos, E_T (*perfecta*) es la energía total de la misma supercelda sin defectos, μ_o designa el potencial químico del oxígeno, y n_o es el número de átomos de oxígeno añadidos o suprimidos de la correspondiente red perfecta. Utilizando la expresión anterior hemos calculado las energías de formación de los defectos que aparecen en nuestro modelo, a saber, de los centros F, de los aglomerados F_2 y F_3 , así como la energía correspondiente a los intersticiales de oxígeno. En la Tabla I se muestran los valores obtenidos.

DISCUSIÓN

Nuestras simulaciones intentan reproducir los resultados experimentales obtenidos al irradiar el material alúmina con un haz de $1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ de electrones de 1,8 MeV de energía, en el rango de temperaturas que va desde los 50 °C hasta los 300 °C. Empezamos describiendo el comportamiento cualitativo del modelo sin el campo eléctrico aplicado. En la Figura 3 se muestra la evolución de los centros F con el tiempo para diferentes

Defecto	Energía (eV)
Centro F	7,56
Centro F2	14,99
Centro F3	22,14
Intersticial (I_o)	5,47

Tabla I. Energías de formación de los principales defectos en la alúmina.

temperaturas. Como puede apreciarse la concentración del defecto va disminuyendo conforme aumenta la temperatura. Este resultado está cualitativamente de acuerdo con los resultados experimentales de algunos autores, [1] y [5], que muestran que tanto los picos en radioluminiscencia como en absorción óptica disminuyen al aumentar la temperatura. Para poder comparar nuestros resultados relativos a la concentración de defectos con los resultados experimentales de absorción óptica, éstos fueron convertidos mediante la denominada fórmula de Smakula, que se escribe como [6]

$$C = (0.87 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}) \frac{n}{(n^2 + 2)^2} \frac{1}{f_{oj}} \mu_j(\text{max}) U_j$$

En esta fórmula, C es la concentración en cm^{-3} , n es el índice de refracción del material en cuestión, f_{oj} es la fuerza de oscilador, $\mu_j(\text{max})$ es la altura del pico en absorción óptica en cm^{-1} , y U_j la anchura de la banda a mitad de altura en eV. Hay que decir que existen varias versiones de esta fórmula dependiendo de los perfiles de las bandas espectrales. Nosotros utilizamos perfiles gaussianos para ajustar estos perfiles y la fórmula dada más arriba es la que corresponde a los mismos.

Para una banda concreta todos estos parámetros permanecen aproximadamente constantes a diferentes temperaturas, salvo la altura del pico de dicha banda que como se ha comentado anteriormente sí depende de dicha temperatura. Por consiguiente, es de esperarse que si este

pico disminuye con la temperatura también lo haga la concentración, que es lo que nosotros obtenemos.

Tras estudiar la evolución de los centros F, ahora vamos a comparar la evolución de los centros F^+ con y sin campo eléctrico aplicado. Según Moroño [5] mientras en ausencia de este campo dichos centros F^+ llegan a un estado de equilibrio tras la primera hora de irradiación, al aplicarse un campo eléctrico de 200 kV/m la evolución de dichos defectos es prácticamente lineal para una temperatura de 200 °C. En la Figura 4 se muestra el resultado de nuestras simulaciones para esta temperatura de 200 °C en la cual comprobamos como efectivamente sin el campo los centros F^+ saturan aproximadamente tras la primera hora, mientras que con el campo simulado dichos defectos crecen de una forma más o menos lineal.

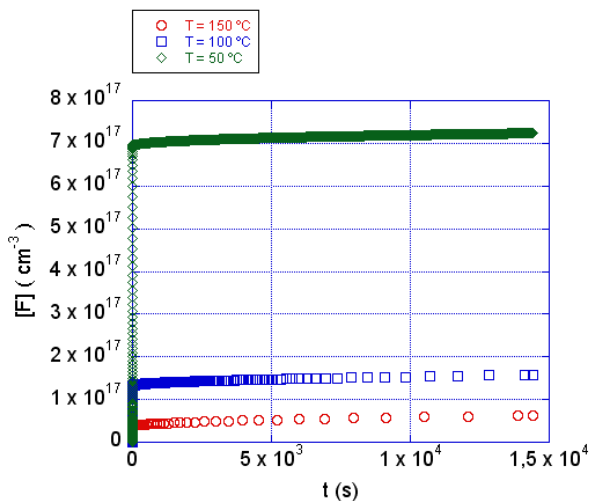


Figura 3. Evolución de los centros F en función del tiempo para diferentes temperaturas.

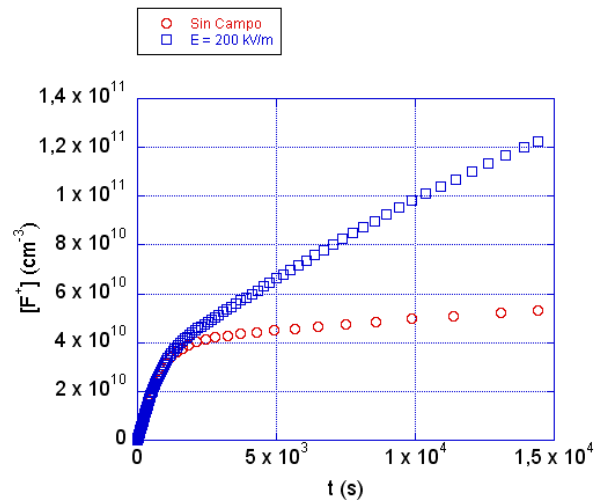


Figura 4. Evolución de los centros F^+ con y sin campo eléctrico aplicado a 200 °C.

Una vez visto que el comportamiento cualitativo de los centros F^+ parece ser el correcto para una temperatura de 200 °C intentamos ir más allá calculando el cociente de F^+ con y sin campo eléctrico para diferentes temperaturas, y comparándolo con datos experimentales. Esto se muestra en la Figura 5 donde los cuadrados representan los datos experimentales obtenidos por [5], y la curva representa nuestras simulaciones.

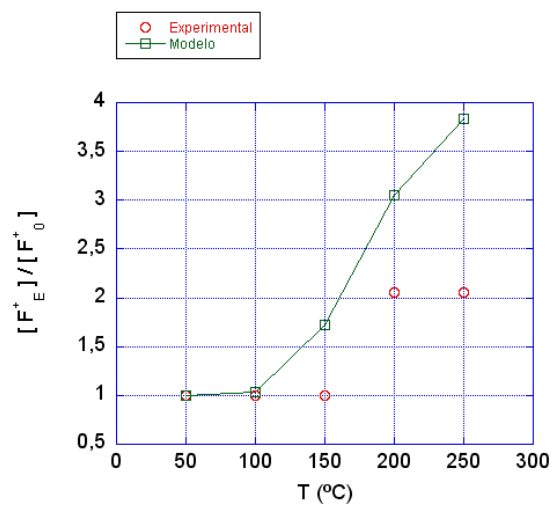


Figura 5. Cociente de la concentración de centros F^+ con y sin campo eléctrico aplicado para diferentes temperaturas.

Como puede apreciarse el comportamiento es aproximadamente correcto, aunque el “salto” observado experimentalmente a partir de los 150 °C es mayor en nuestro caso (un cociente cercano a 4 frente al experimental que es aproximadamente igual a 2). Una de las razones a esta discrepancia puede estar en el desconocimiento de algunos parámetros en nuestro modelo. Se ha comprobado en las simulaciones que el cociente al cual nos referimos ahora es muy susceptible a las energías de migración de los centros F^+ y de los electrones, provocando que este cociente varíe tanto en magnitud como la temperatura a la cual empieza a ser distinto de la unidad.

Pasando ahora por entero al caso de campo eléctrico aplicado, se ha observado experimentalmente que la altura de la banda de radioluminiscencia de los centros F^+ varía linealmente como la raíz cuadrada de la altura de la banda correspondiente a los centros F [5] para temperaturas inferiores a los 200 °C. Para comprobar si nuestro modelo reproduce este comportamiento en la Figura 6 se ha representado la concentración de centros F^+ frente a la raíz cuadrada de la concentración de los centros F a 150 °C. Sin embargo, según Morono a 200 °C este comportamiento pasa a ser más bien exponencial como se muestra en la Figura 7. En definitiva, como podemos ver los resultados de nuestro modelo también se ajustan, desde el punto de vista cualitativo, a los resultados experimentales para diferentes temperaturas cuando relacionamos la evolución

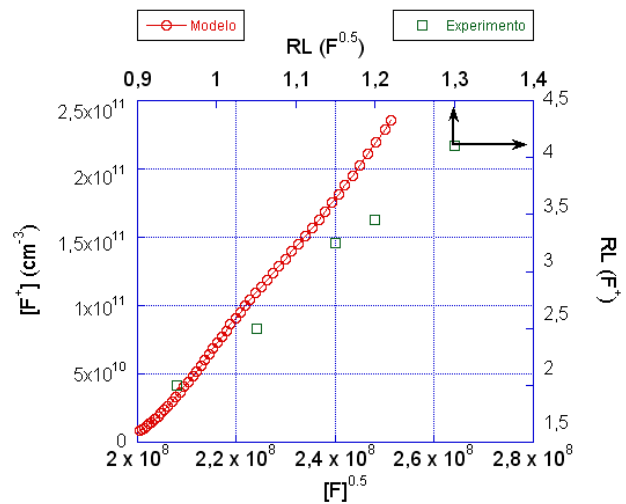


Figura 6. Evolución de los centros F^+ frente a la raíz cuadrada de los centros F a 150 °C. Se observa una tendencia aproximadamente lineal, tanto en nuestras simulaciones como en los resultados experimentales.

de los centros F^+ con la correspondiente a la de los centros F.

CONCLUSIONES

Se ha elaborado un modelo computacional para simular la difusión de defectos generados por irradiación en el material aislante denominado alúmina. En la medida de lo posible se han comparado los resultados obtenidos con nuestras simulaciones con aquellos resultados experimentales disponibles. La semejanza de comportamiento, tanto con campo eléctrico aplicado como sin él, parece indicar que estamos trabajando con un modelo aceptable que puede servir de base para la elaboración de modelos subsiguientes más complejos. Como trabajo futuro podrían implementarse centros F_n de mayor tamaño, así como la simulación para irradiaciones con neutrones e iones como H o

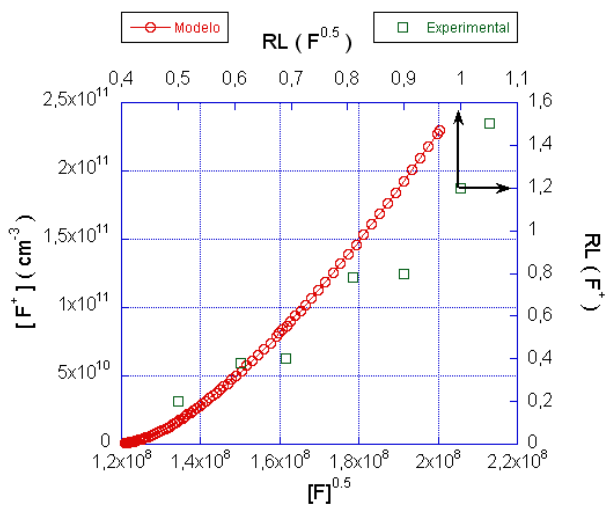


Figura 7. Evolución de los centros F^+ frente a la raíz cuadrada de los centros F a $200\text{ }^\circ\text{C}$. Se observa una tendencia aproximadamente exponencial tanto en nuestras simulaciones como en los resultados experimentales.

He, que son generados comúnmente por transmutación nuclear o por el plasma.

REFERENCIAS

- [1] K. Moritani et al., Journal of Nuclear Materials, 373 (2008) 157-163
- [2] C. Ortiz y M. Caturla, Physical Review B, 75 (2007) 184101
- [3] T. R. Waite, Physical Review, Volume 107, Number 2 (1957) 463-470
- [4] R. Martin, “Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods”, Cambridge University Press, 2004
- [5] A. Moroño, Tesis Doctoral, Universidad Complutense de Madrid, 1996

[6] D. L. Dexter, Physical Review, Volume 101, Number 1 (1956) 48-55

[7] K. Matsunaga et al., Physical Review B 68, 085110 (2003)

[8] M. T. Robinson, Physical Review B 40 (1989) 10717

El abajo firmante, matriculado en el Máster en Física Fundamental de la Facultad de Ciencias Físicas, autoriza a la Universidad Complutense de Madrid (UCM) a difundir y utilizar con fines académicos, no comerciales y mencionando expresamente a su autor el presente Trabajo de Fin de Máster: Modelización de la Evolución de Defectos en Alúmina bajo Irradiación, realizado durante el curso académico 2010-2011 bajo la dirección de Christophe Ortiz, y a la Biblioteca de la UCM a depositarla en el Archivo Institucional E-Prints Complutense u otra plataforma de la UCM que se cree para tal fin con el objeto de incrementar la difusión, uso e impacto del trabajo en Internet y garantizar su preservación y acceso a largo plazo.

La publicación en abierto tendrá un embargo de:

___ Ninguno

___ Un año

El abajo firmante, director del trabajo de Francisco José Niebla Castaño, autoriza a la Universidad Complutense de Madrid (UCM) a difundir y utilizar con fines académicos, no comerciales y mencionando expresamente a su autor el presente Trabajo de Fin de Máster: Modelización de la Evolución de Defectos en Alúmina bajo Irradiación, realizado durante el curso académico 2010-2011 bajo mi dirección, y a la Biblioteca de la UCM a depositarla en el Archivo Institucional E-Prints Complutense u otra plataforma de la UCM que se cree para tal fin con el objeto de incrementar la difusión, uso e impacto del trabajo en Internet y garantizar su preservación y acceso a largo plazo.

La publicación en abierto tendrá un embargo de:

Ninguno

Un año