

Breathers en cristales

Juan FR Archilla

Grupo de Física No Lineal de la Universidad de Sevilla

<http://www.us.es/gfnl/archilla>

Sevilla, 2 de mayo de 2006

- Transformaciones reconstructivas en silicatos laminares

M. D. Alba, M. Naranjo y J. M. Trillo, CSIC/Universidad de Sevilla

- Quodons en la mica moscovita

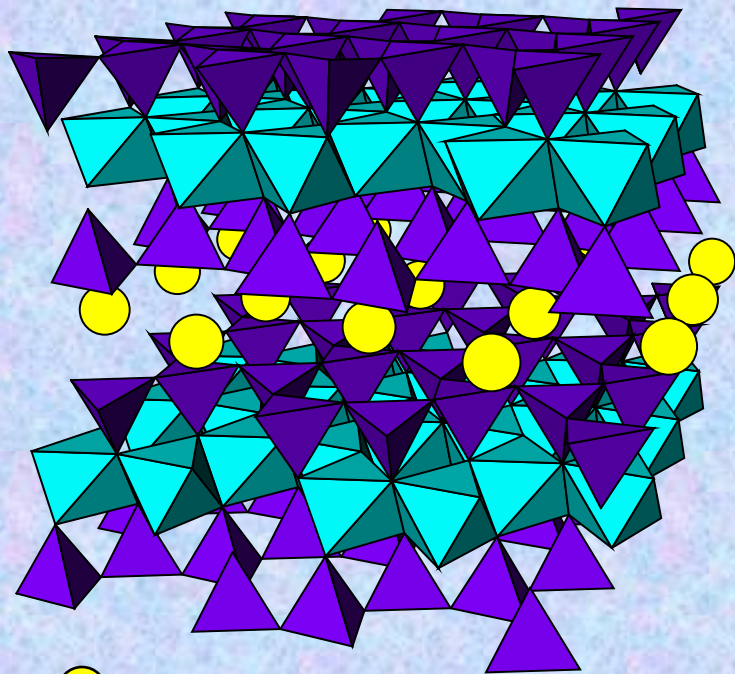
FM Russell y JC Eilbeck, Universidad Heriot-Watt, Edimburgo

- Desplazamiento de defectos en silicio

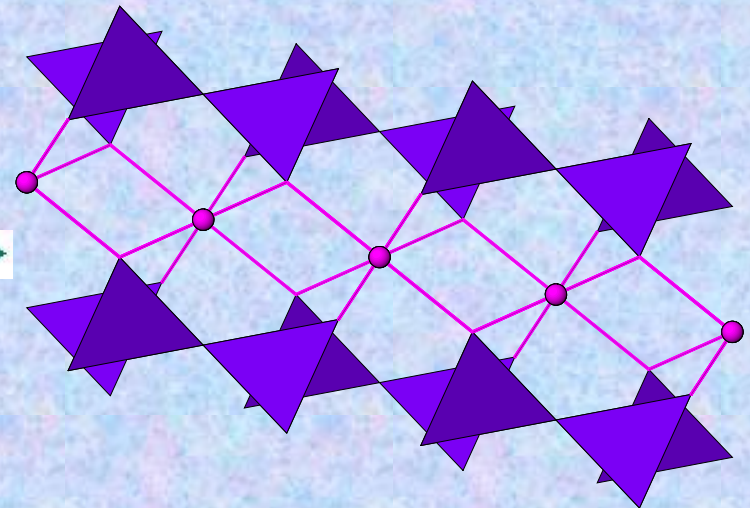
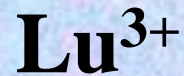
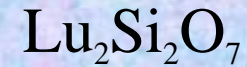
P Sen, Universidad Jawaharlal Nehru, Nueva Delhi

Transformación reconstructiva de la moscovita

moscovita



Disilicato de lutecio



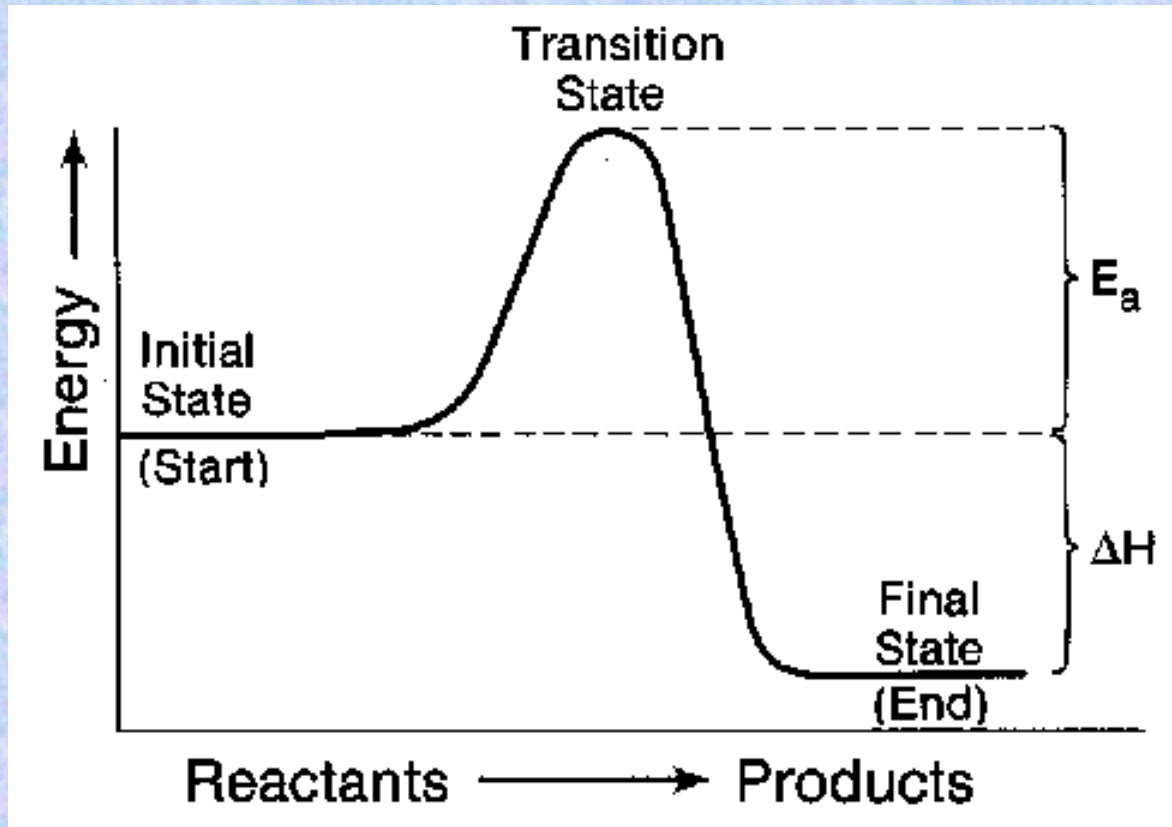
300° C, 3 días

Transformaciones reconstructivas a baja temperatura

- MD Alba, M Naranjo, JM Trillo (CSIC/Universidad de Sevilla) han conseguido recientemente transformaciones reconstructivas a baja temperatura (TRBT) a temperaturas 500 C más bajas que la más baja conseguida previamente
- Ruptura aparente de la ley de Arrhenius
- POR EL MOMENTO NO HAY NINGUNA EXPLICACIÓN
- **¿Existencia de breathers en la capa de K^+ ?**

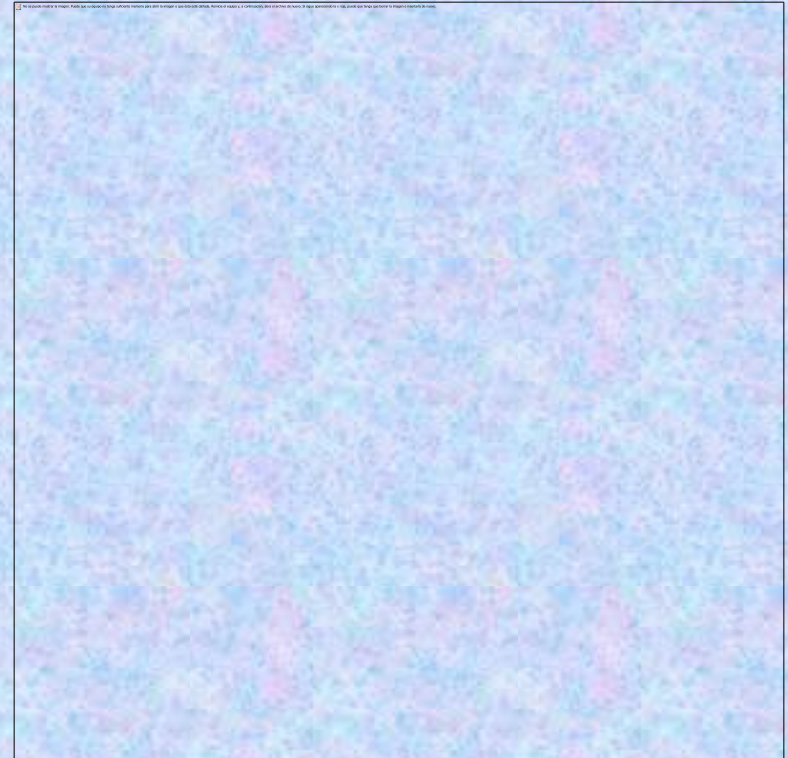
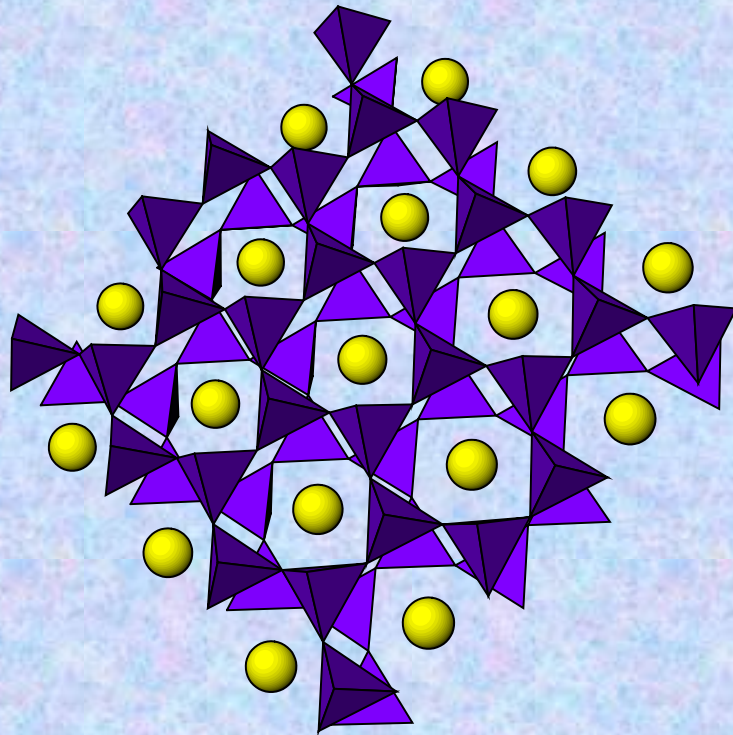
Ley de Arrhenius

$$k = A \exp(-E_a/RT)$$



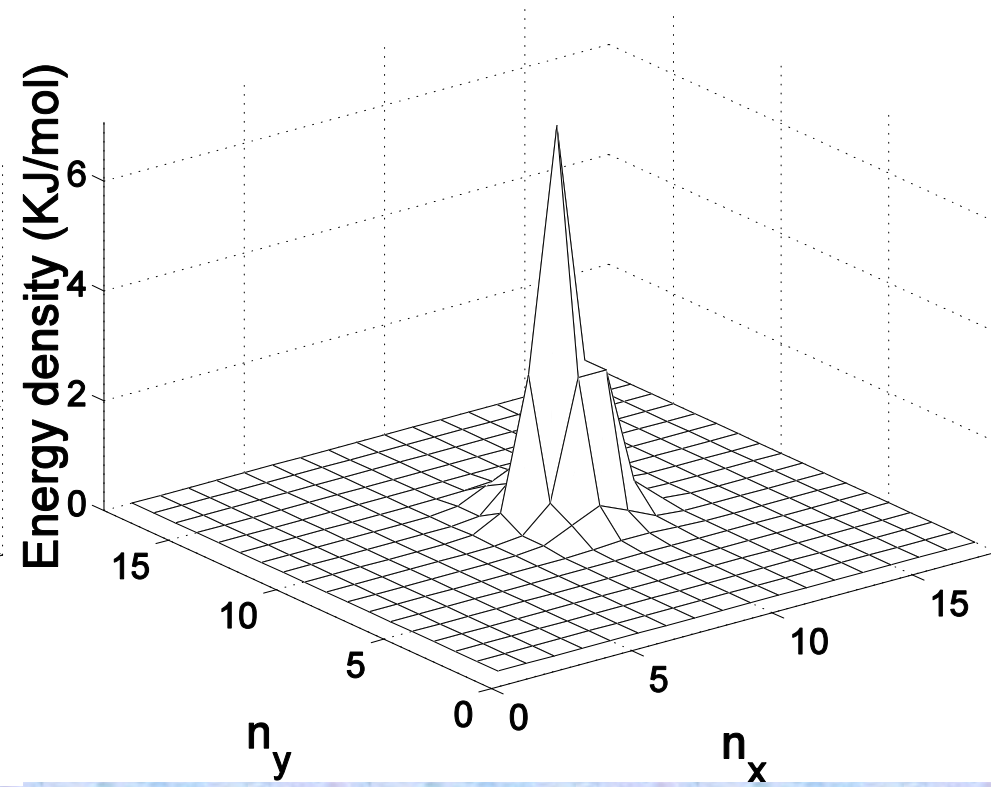
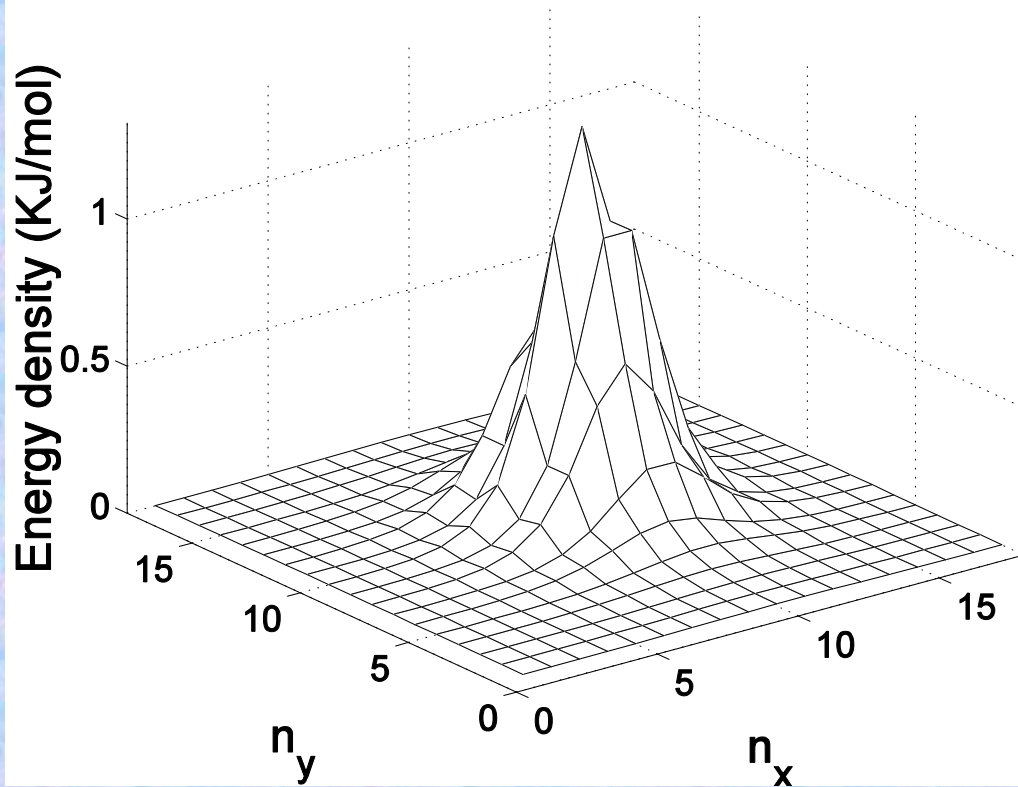
$$N_{E_a}/N = \exp(-E_a/RT)$$

Modo: vibración del K^+ perpendicular al plano de cationes



$$H = \sum_{\vec{n}} \left[\frac{1}{2} m \dot{u}_{\vec{n}}^2 + V(u_{\vec{n}}) + \frac{1}{2} k \sum_{\vec{n}'} (u_{\vec{n}} - u_{\vec{n}'})^2 \right]$$

Perfiles de densidad de energía de dos breathers



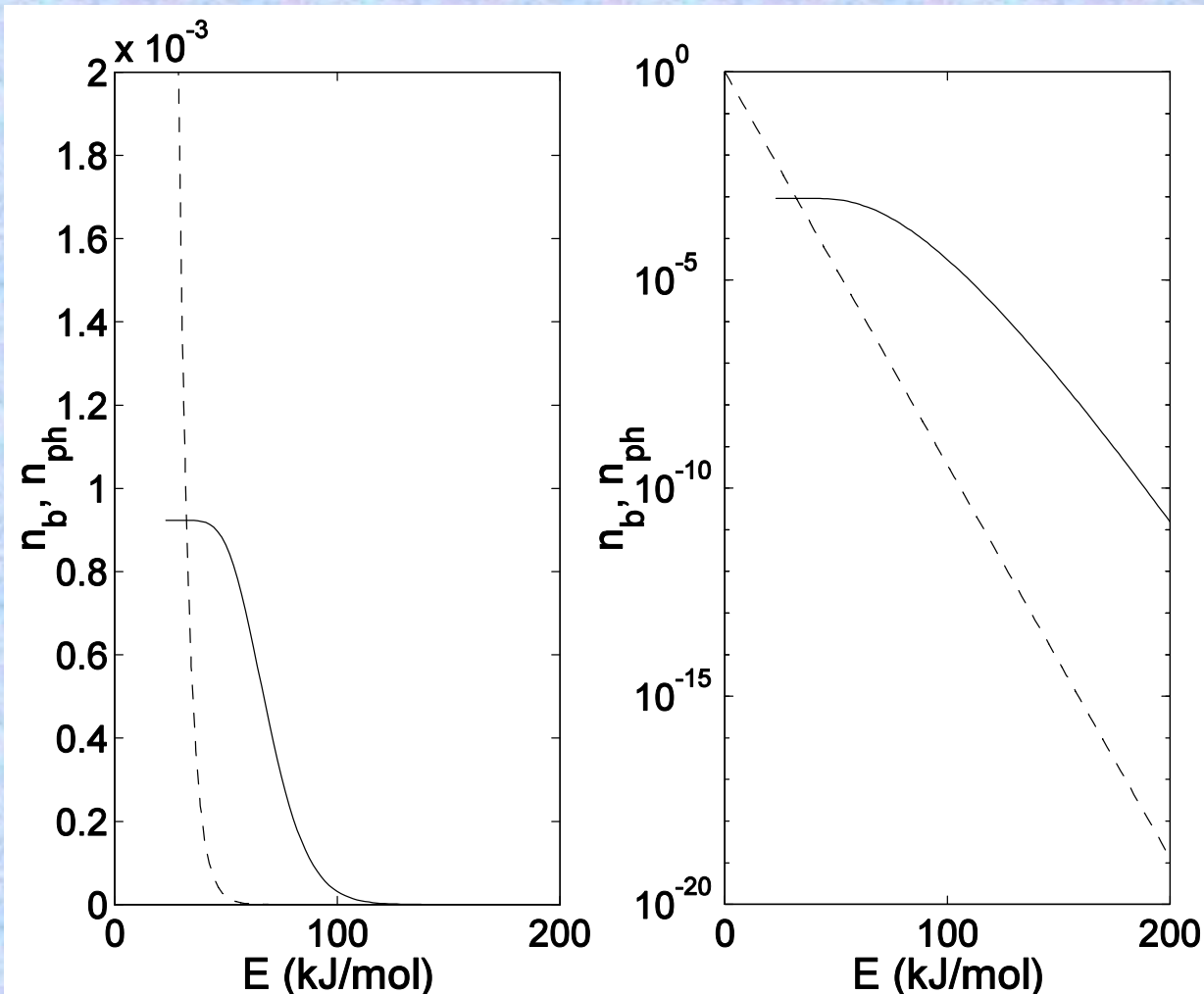
$\nu_b = 164.15 \text{ cm}^{-1}$, $E = 22.82 \text{ kJ/mol}$

$\nu_b = 142.38 \text{ cm}^{-1}$, $E = 28.75 \text{ kJ/mol}$

Velocidad de reacción y estadística de breathers

Ritmo de creación de breathers: $\sim \exp(-E_a/RT)$

Ritmo de destrucción de breathers: $\sim 1/(E-\Delta)^z$



Densidad de fonones
y breathers

— breathers

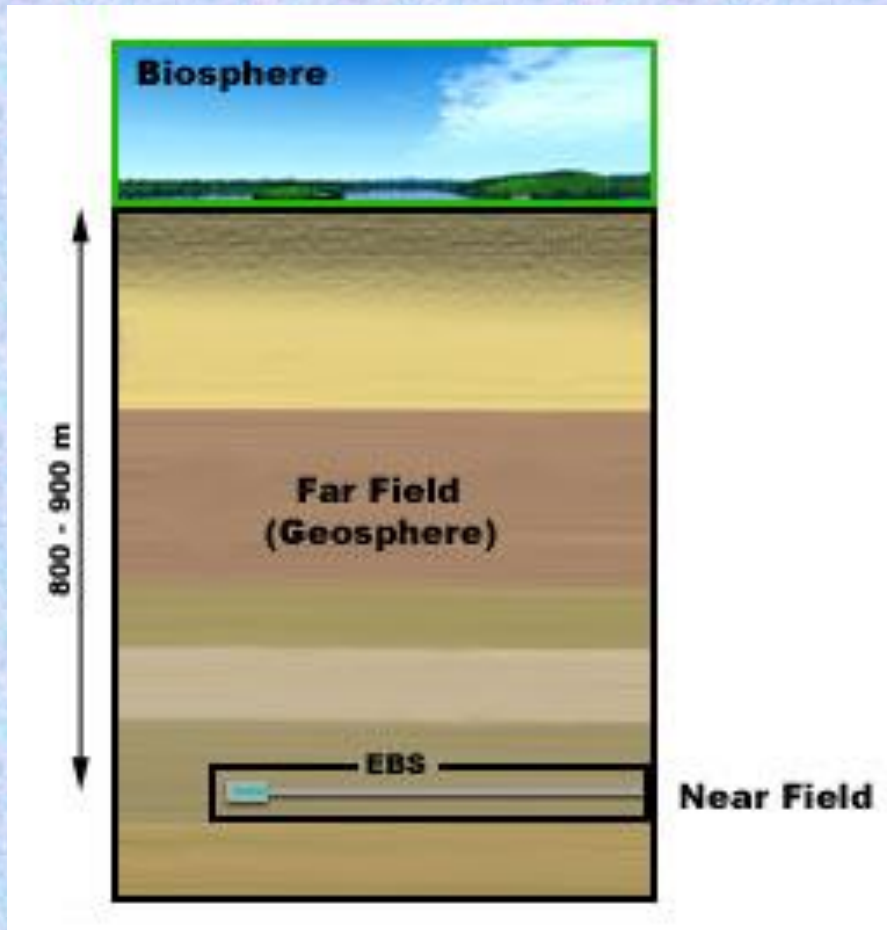
- - - fonones

CONCLUSION

- HAY MUCHOS MENOS BREATHERS QUE MODOS LINEALES, PERO MUCHOS MÁS CON ENERGÍA MAYOR QUE LA ENERGÍA DE ACTIVACIÓN
- Los breathers discretos son buenos candidatos para explicar las transformaciones reconstructivas a baja temperatura

¿Qué interés tienen las transformaciones reconstructivas a baja temperatura?

Aplicación: Depósitos nucleares profundos para residuos nucleares

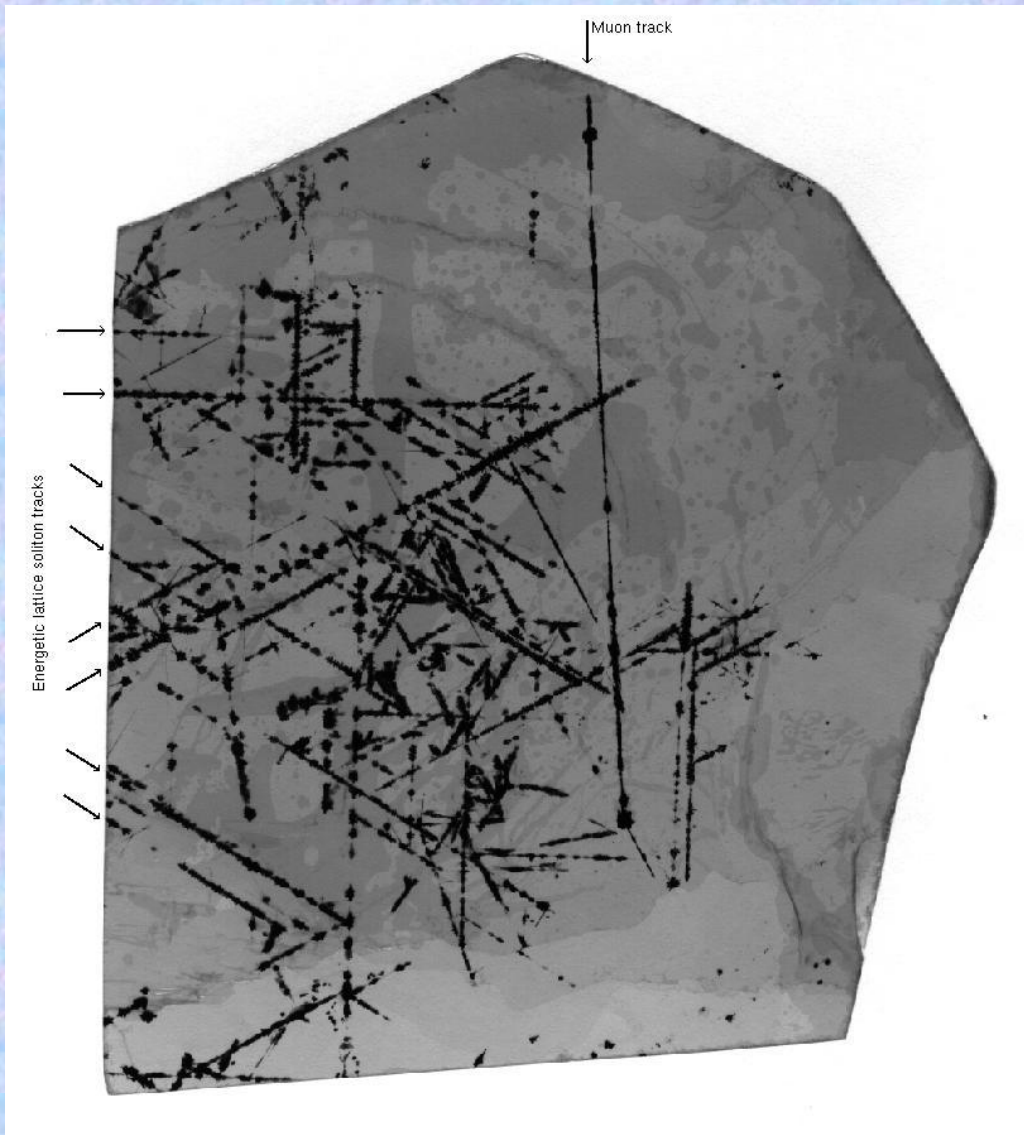


EBS:

Engineered barrier system
Sistema de barrera artificial

- El lutecio en el laboratorio simula elementos radioactivos pesados
- La transformación reconstructiva atrapa los elementos radioactivos

Quodons en la mica moscovita

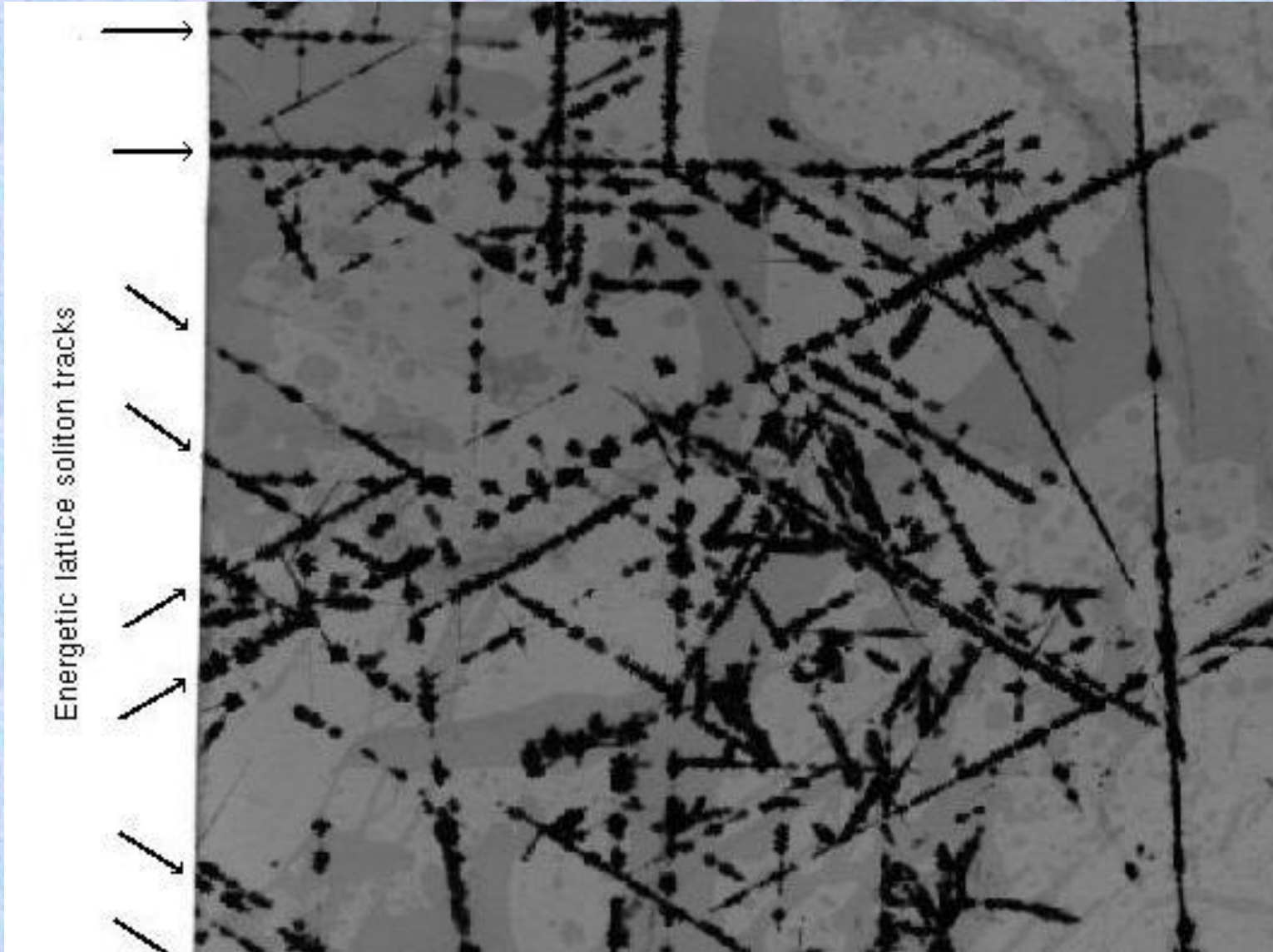


Líneas: depositos de Fe_3O_4

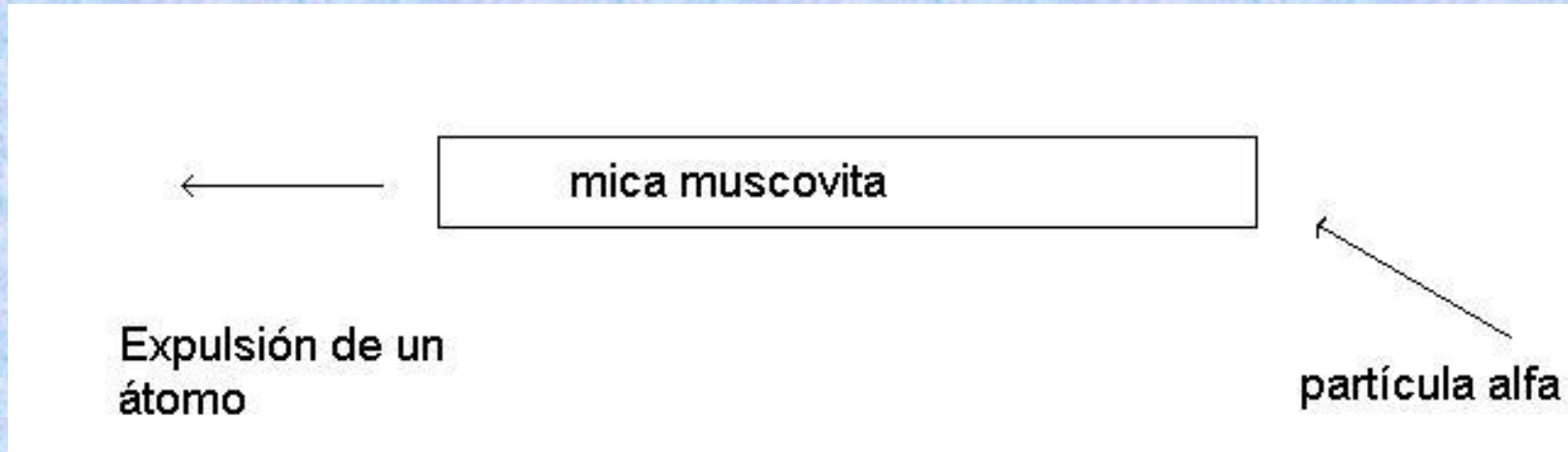
Causa:

- 0.1% Partículas:
 - muones: producidos por interacción de neutrinos
 - Positrones: producidos por interacción electromagnética de los muones y decaimiento de K
- 99.9% **Desconocida**
¿Vibraciones localizadas de la red: quodons?

Las líneas siguen las direcciones de la red en el plano de K^+



Sputtering



Trayectorias a lo largo de las direcciones de la red en el plano de K^+

FM Russell y JC Eilbeck, 2006, preprint enviado a Nature

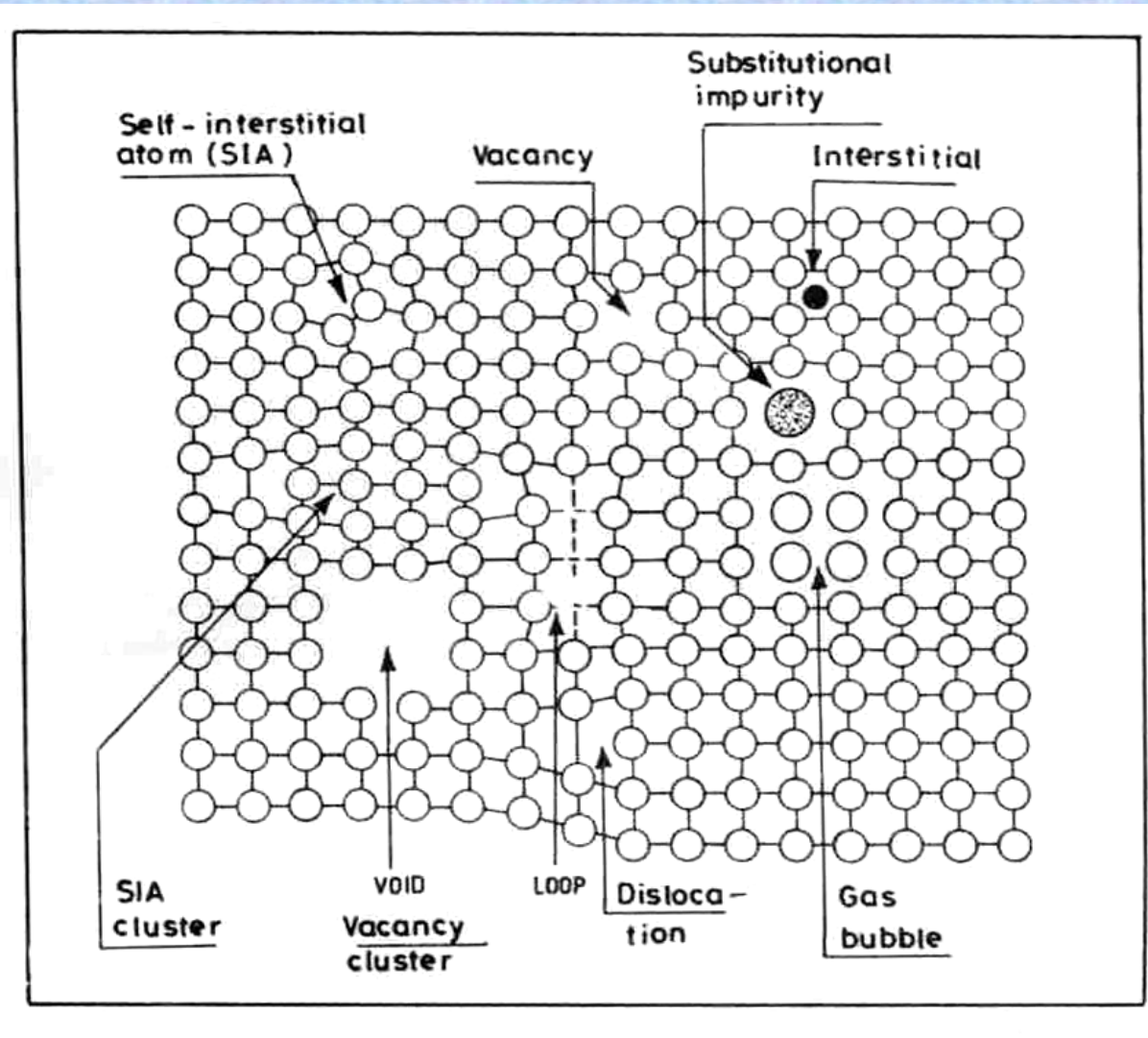
Problemas pendientes

- ¿Causas de la larga vida de los quodons? $\sim 10^8$ unidades de la red
- ¿Precursores de los quodons?
- ¿Qué tipos de red soportan quodons y cuales son mejores?

Aplicaciones

¿Reparación de defectos o templado en materiales dañados?

Migración de defectos en silicio



Defectos en Si

Experimento para generar interfaces de radiación

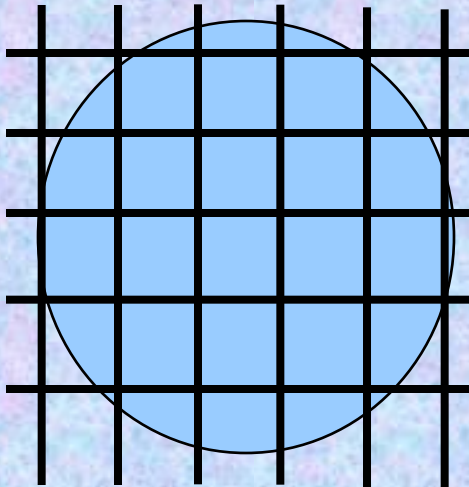
Si(100)

Definición : interfaz de radiación es la región entre las secciones irradiadas y no irradiadas de la muestra

Iones 100~200 MeV en dirección perpendicular

La red de alambre de Ni está encima de la muestra de Si(100). Distancias de 5mm – 300 mm

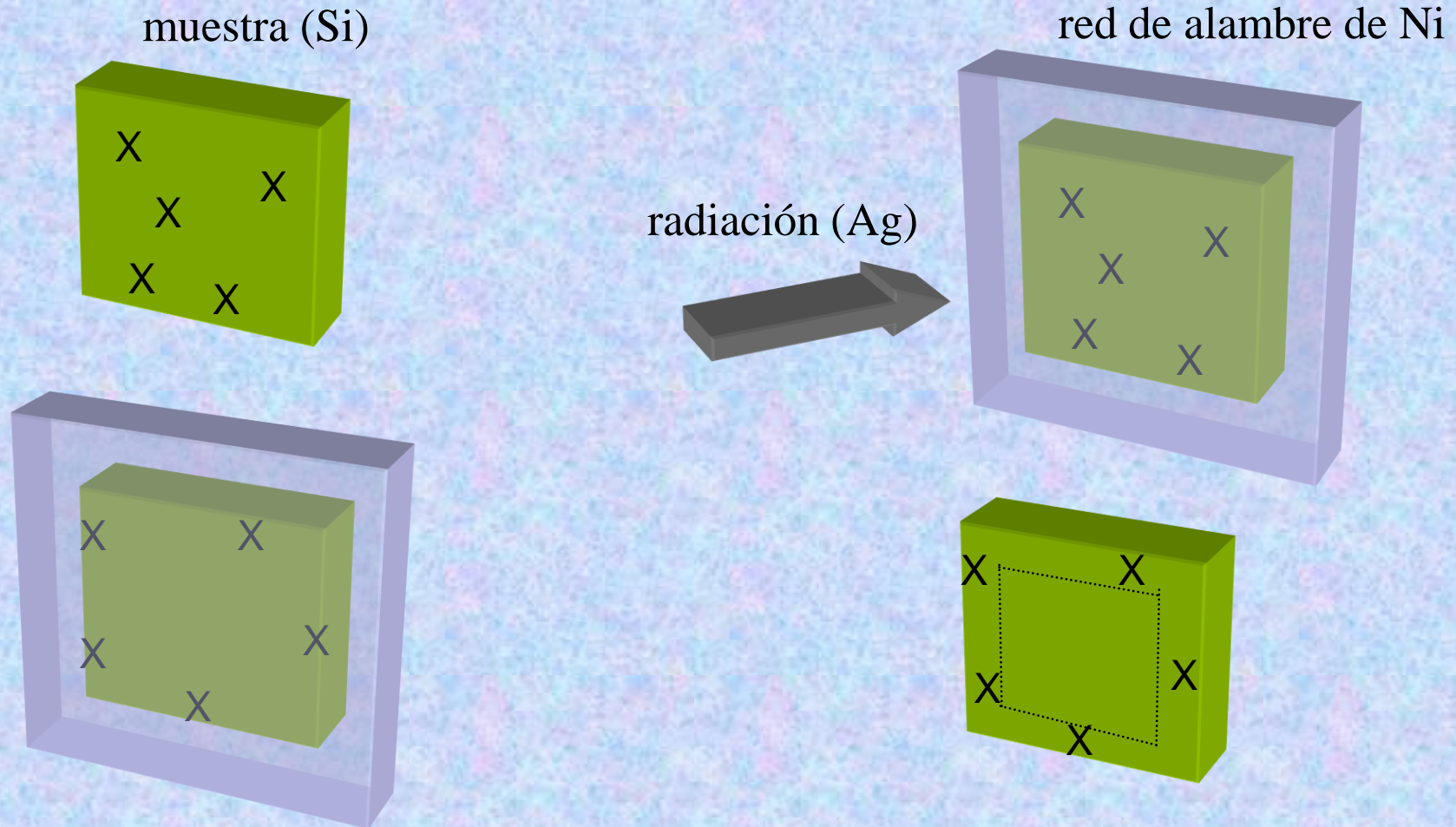
Los iones son detenidos por los alambres de Ni



— alambre de Ni

40 micras grosor, separación de 850 micras

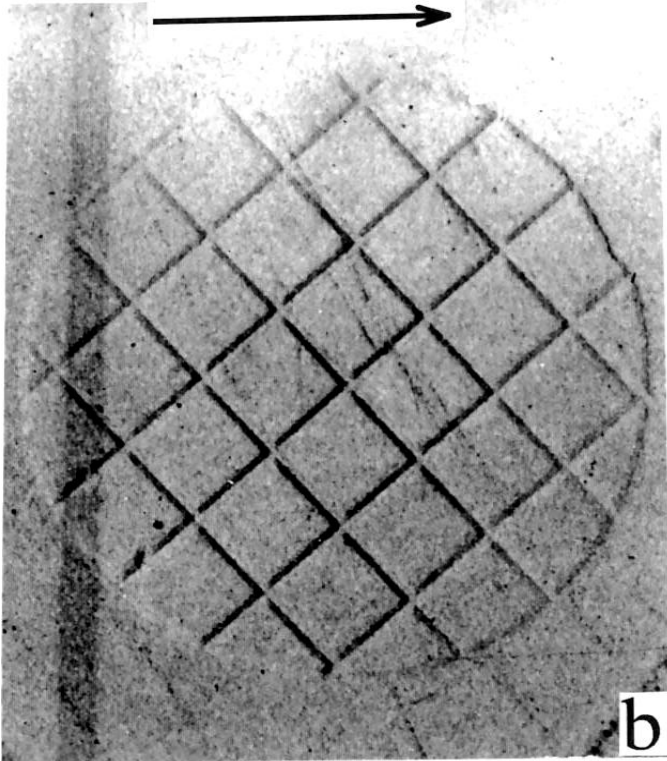
Evidencia experimental: migración de defectos



Bajo flujo de iones: 1 en 10^6 átomos de la superficie por segundo

Resultados de topografía de rayos X

Imagen XRT del Si(100)
irradiado con iones 200 MeV Ag



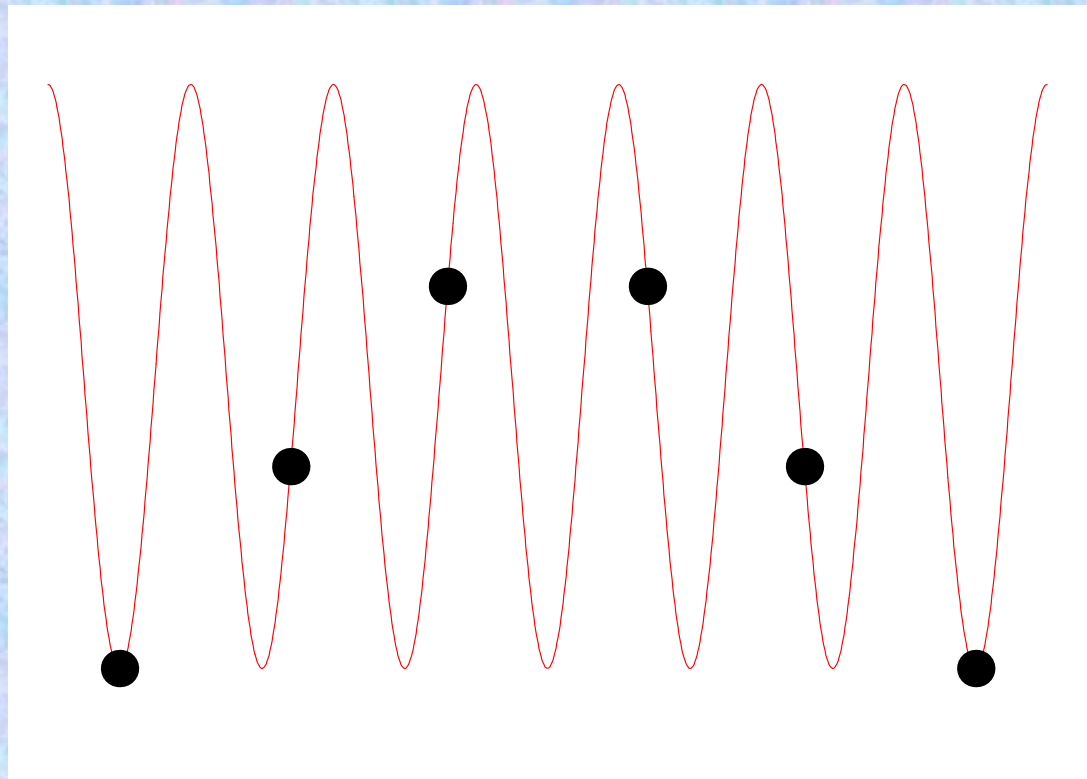
- Los defectos se mueven a la interfaz de irradiación

- La zona irradiada queda libre de defectos

- **EXPLICACIÓN:**
¿Breathers producidos por los iones son capaces de mover los defectos?

Simulaciones numéricas de defectos en 1D

Modelo de Frenkel-Kontorova con acoplo anarmónico

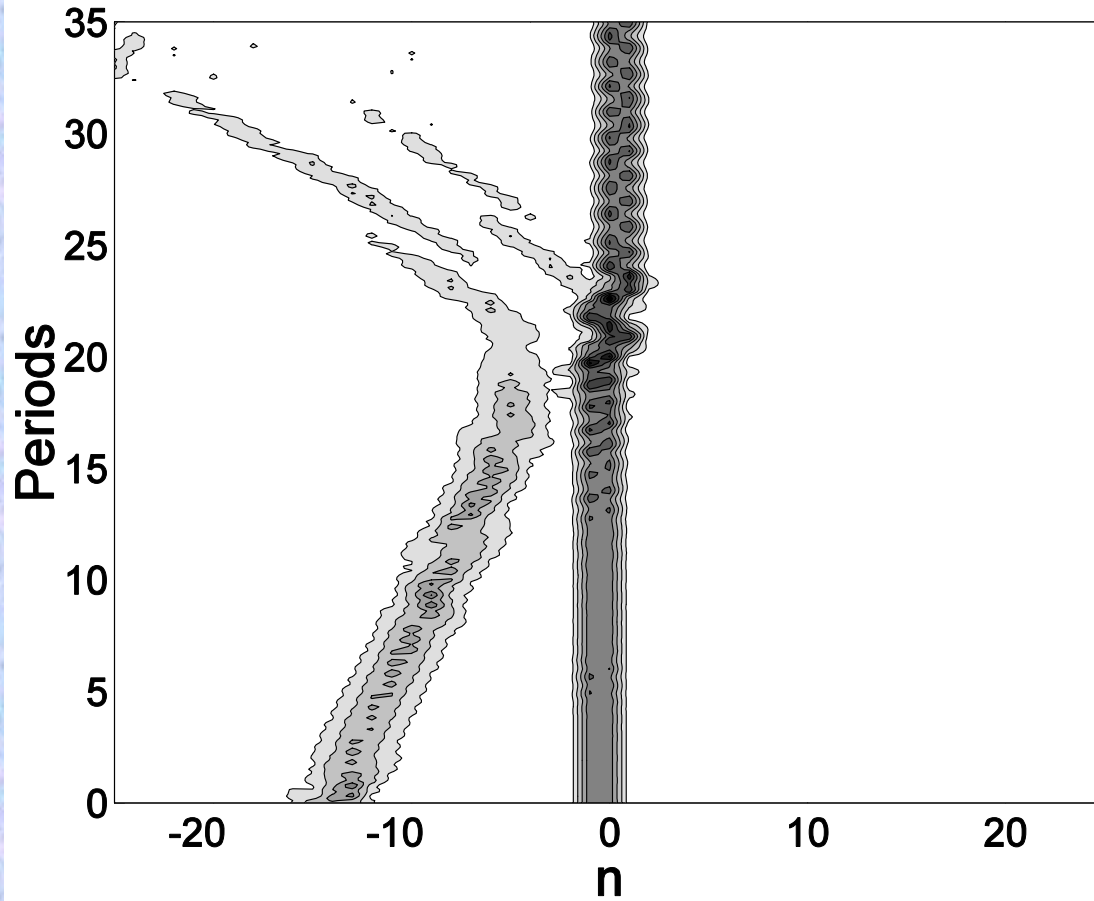


Se envía un breather
móvil sobre el defecto

$$H = \sum_n \frac{1}{2} \dot{x}_n^2 + \frac{L^2}{4\pi^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi x_n}{L}\right) \right] + C \left[\frac{1}{2} [\exp(-b(x_{n+1} - x_n - a)) - 1]^2 + \frac{1}{2} [\exp(-b(x_n - x_{n-1} - a)) - 1]^2 \right]$$

Simulaciones numéricas en 1D

(d) $C=0.50$, $b=0.5$, $\lambda=0.1498$



Las vacantes e intersticiales pueden:

1. avanzar
2. retroceder
3. permanecer

Comportamiento relacionado con los breathers de vacante

Conclusiones

- La evidencia experimental sugiere que excitaciones no lineales producidas por la interacción de iones con la red de silicio es capaz de movilizar los defectos
- Las simulaciones numéricas muestran que un breather es capaz de movilizar los defectos

Aplicaciones

- Obtención de cristales de silicio libre de defectos
- Interfaces de radiación: *nanoestructuras reordenadas artificialmente*
 - Uniones p-n con voltaje de ruptura de 6 V \rightarrow 48 V
 - Nanoestructuras ¿silicio emisor de luz?

Publicaciones

Discrete breathers for understanding reconstructive mineral processes at low temperatures, JFR Archilla, J Cuevas, MD Alba, M Naranjo and JM Trillo, Preprint.

Influence of moving breathers on vacancies migration. J Cuevas, C Katerji, JFR Archilla, JC Eilbeck and FM Russell, Phys. Lett. A 315 (2003) 364-371.

Interaction of moving discrete breathers with vacancies, J Cuevas, JFR Archilla, B Sánchez-Rey and FR Romero, Physica D 216 (2006) 115–120

<http://www.grupo.us.es/gfnl>