

Miércoles
Día 13 a los 10.00

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

"DISPERSION DE ELECTRONES POR DISLOCACIONES
CARGADAS EN CRISTALES IONICOS"

TRABAJO DE INVESTIGACION

que para obtener el título de

MAESTRO EN CIENCIAS

(FISICA)

p r e s e n t a

RICARDO ANTONIO RODRIGUEZ MIJANGOS

México, D. F.,

1976



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradezco al Dr. Carlos Ruiz Mejía su guía y dirección al elaborar éste trabajo, así como a la ANUIES - por permitirme participar en su programa de formación de profesores e Investigadores, dentro del cual se realizó el presente trabajo.

DISPERSION DE ELECTRONES

POR DISLOCACIONES CARGADAS

EN CRISTALES

IONICOS

INTRODUCCION

El efecto de las dislocaciones sobre la movilidad de los electrones en los cristales iónicos, ha recibido poca atención hasta la fecha, debido principalmente a que hasta muy recientemente se han realizado cálculos de bandas de energía en los halogenuros alcalinos, que dan a conocer el potencial de deformación producido por la dislocación, lo cual permitiría conocer el efecto de ésta sobre el movimiento de los electrones. El efecto será de tipo mecánico debido a los campos de esfuerzos alrededor de las dislocaciones. Sin embargo, puede existir otro efecto además del mecánico, que será de importancia para el movimiento electrónico ya que es de tipo electrostático y se debe a que las dislocaciones están cargadas, según suponen ciertos investigadores^{1,2}. Esta suposición está basada en la similitud con las superficies como fuente y sumidero de vacancias, que ocasiona se carguen^{1,3}. Si la dislocación está cargada, el efecto sobre la movilidad puede ser apreciable, pues el electrón con su carga eléctrica interactuará con el campo electrostático de la dislocación. Este efecto electrostático se podría conocer, sabiendo la forma analítica o determinando numéricamente el potencial^{3,4}. Ambas formas de conocimiento del potencial, han resultado restringidas hasta hoy.

Los hechos expuestos abren la posibilidad de atribuir al efecto de las dislocaciones la discrepancia entre los valores teóricos esperados y los valores prácticos obtenidos^{5,6}. Por lo tanto, es el propósito de éste trabajo investigar la posible influencia que pueden tener, en el movimiento de los elec

trones , las dislocaciones cargadas en cristales iónicos.

Para llevar a cabo tal propósito, se hace necesario conocer el potencial electrostático en la dislocación y para hacerlo se han llevado a cabo cálculos por diversos autores^{2,3,4}. Sin embargo los resultados reportados resultan inconsistentes, en particular en lo que respecta a la carga máxima que puede soportar una dislocación, pues dan por resultado cargas mayores a la máxima posible. Aquí se detalla un procedimiento que subsana tales dificultades, basado en resultados reportados por C. Ruiz Mejía, F. Broder y L. Cota A.⁷.

Así, en el capítulo I se desarrolla y resuelve la ecuación para el potencial, suponiendo un cristal del tipo del NaCl, con cierta densidad de vacancias e impurezas catiónicas divalentes. Bajo equilibrio térmico, minimizando la energía libre de Helmholtz, es posible encontrar la densidad de carga, y planteando la ecuación de Poisson, determinar el potencial a una carga y temperatura dadas, y bajo régimen de saturación por impurezas en el corazón o núcleo de la dislocación.

En el capítulo II se discuten los procesos de decaimiento de la corriente electrónica, debidos a los efectos por colisiones de los electrones con defectos en la red cristalina, y se encuentra una expresión que determina el tiempo libre medio - para dispersión de electrones de conducción por dislocaciones. Este tiempo de relajamiento nos dará el criterio del efecto que tienen tales dislocaciones en el movimiento electrónico, comparándolo con un efecto que es relevante, y es el debido a la dispersión de electrones con las vibraciones de la red. Este efecto se hace de mayor importancia conforme la temperatura es mayor.

En el Capítulo III se aplica la aproximación de Born, para encontrar la amplitud de dispersión, ya que en la expresión para el tiempo libre medio se requiere la probabilidad de dispersión, como función del ángulo en el cual se dispersan los electrones.

Finalmente en el Capítulo IV se aplican en un cristal de NaCl, los resultados obtenidos en los capítulos anteriores y se realizan los cálculos del tiempo libre medio para dispersión por dislocaciones de los electrones de conducción, y se hace la comparación con el tiempo libre medio para dispersión por vibraciones de la red.

CONTENIDO

I.- POTENCIAL ELECTROSTATICO DE UNA DISLOCACION CARGADA

I.1 Dislocaciones

I.2 Dislocaciones cargadas en cristales iónicos

I.3 Distribución de la carga espacial para un cristal
puro

I.4 Ecuación para el potencial

I.5 Distribución de la carga espacial para un cristal
con impurezas

II.- TIEMPO LIBRE MEDIO EN CRISTALES CON DISLOCACIONES

II.1 Conductividad electrónica

II.2 EL tiempo libre medio

III.- DISPERSION DE ELECTRONES POR DISLOCACIONES CARGADAS

III.1 El problema de la dispersión

III.2 Solución de la ecuación de Schrödinger

III.3 La amplitud de dispersión

IV.- RESULTADOS Y CONCLUSIONES

IV.1 Potencial en la dislocación para el NaCl

IV.2 Cálculo numérico del tiempo libre medio

IV.3 Comparación con el tiempo libre medio de la disper-
sión con vibraciones de red

IV.4 Conclusiones

APENDICE

REFERENCIAS

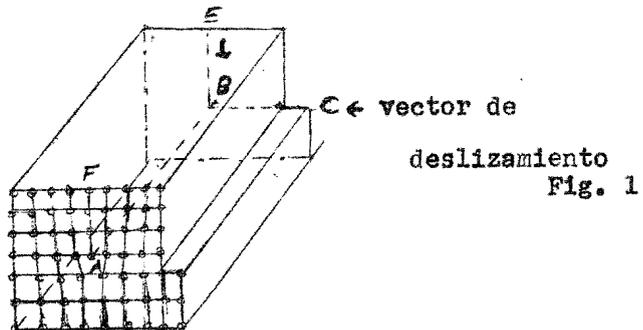
I

POTENCIAL ELECTROSTATICO DE UNA DISLOCACION CARGADA

I.1.-. DISLOCACIONES.- Cuando un cristal es deformado elásticamente bajo la influencia de una tensión aplicada, regresa a su estado original después de remover la tensión. Sin embargo, si las tensiones aplicadas son suficientemente intensas, permanece cierta cantidad de deformación después de removerlas; de ésta manera el cristal se ha deformado plásticamente. La deformación plástica en muchos cristales ocurre por deslizamiento, en el cuál una parte del cristal se desliza como una unidad respecto a una parte adyacente. La superficie sobre la cual tiene lugar el deslizamiento es a menudo un plano, y se conoce como plano de deslizamiento. La dirección del movimiento en el deslizamiento se conoce como dirección de deslizamiento. El desplazamiento tiene lugar a lo largo de los planos cristalográficos con un conjunto de índices de Miller pequeños, tales como los planos (111) en los cristales fcc y los planos (110), (112), y (123) en los cristales bcc. Los bajos valores observados del esfuerzo crítico para deslizamiento pueden explicarse en términos del movimiento a través de la red de un tipo particular de imperfección lineal conocida como dislocación. La idea de que el deslizamiento se propaga por el movimiento de las dislocaciones fué publicada en 1934 independientemente por Taylor⁸, Orowan⁹, y Polanyi¹⁰; el concepto de dislocación fué introducida en la Física un poco antes por Prandt y Dehlinger."

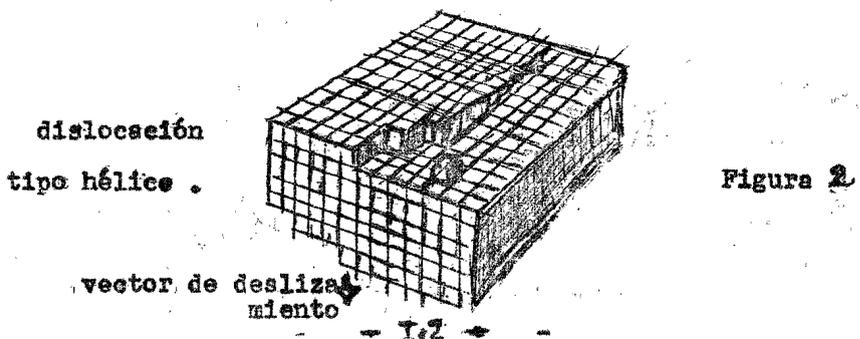
Hay dos tipos básicos de dislocaciones, dislocaciones tipo-borde y dislocaciones tipo-hélice. Una dislocación tipo borde se muestra en la figura . Este tipo de dislo -

cación puede considerarse que resulta del deslizamiento parcial interno en el plano ABCD a lo largo de la dirección BC.



En la ilustración la magnitud del deslizamiento es una distancia interatómica de corrimiento. El cristal resultante puede verse como un cristal conteniendo un semiplano extra (ABEF - en el diagrama), y está claramente en un estado de esfuerzo mecánico en la región de la dislocación de borde AB, tal que el material está en tensión arriba de la dislocación y comprimido por abajo.

Una dislocación tipo hélice es dibujada esquemática - mente en la figura 3. En ésta dislocación el deslizamiento ha tenido lugar paralelo a la línea de la dislocación, la cual es normal a la superficie externa del cristal, en lugar de perpendicular a la línea de la dislocación, como en el caso de las - dislocaciones de borde. De hecho las dislocaciones de borde y



de hélice pueden reconocerse como diferentes aspectos del mismo fenómeno de deslizamiento interno, como se ilustra en la figura 3, la cual es una vista del cristal mostrado en la figura 1 con la región de desplazamiento diferente. Aquí la misma línea de la dislocación (siempre denotada por el símbolo \perp) es normal al vector de deslizamiento en la cara frontal del cristal, como en la dislocación de borde y paralela al vector de deslizamiento por un lado, co-

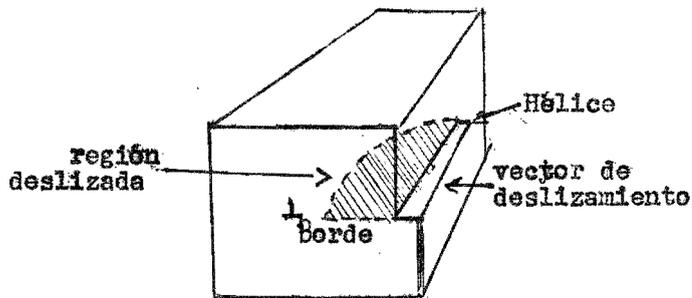


Fig. 3

mo en la dislocación de hélice. Es quizás más exacto decir que la dislocación tiene orientación de borde en el frente y la orientación de hélice por un lado.

Las dislocaciones se forman en las etapas iniciales del crecimiento del cristal y son responsables de muchas de las propiedades observadas en los cristales. Como un hecho establecido; las características observadas en el crecimiento cristalino, ya sea desde la fase de vapor, desde el fundente o desde una solución supersaturada; están gobernadas por las dislocaciones en los cristales en crecimiento, más que por cualquier otra propiedad de la misma red cristalina.^{12, 13, 14}

I.2.-DISLOCACIONES CARGADAS EN CRISTALES IONICOS.- Generalmente se admite que las vacancias pueden ser formadas en las dislocaciones tanto como en las superficies de un cristal. Fué Frenkel quien primero señaló que en un cristal iónico puro en el cual predomina el desorden de Schottky y que está en equilibrio térmico, posee una superficie cargada y una región de carga espacial de signo opuesto adyacente a la superficie, como una consecuencia del hecho de que las energías libres de formación de las vacancias aniónicas y catiónicas difieren. De una manera similar esperaríamos que las dislocaciones en un cristal iónico estén cargadas.^{2,3}

Cualitativamente la nube de carga resulta de la siguiente manera: Consideremos una dislocación con característica tipo borde. Supongamos que la energía F^+ requerida para formar una vacancia de ión positivo difiere de la energía F^- requerida para formar una vacancia de ión negativo. Específicamente supondremos que $F^+ < F^-$, entonces para un cristal puro en equilibrio a altas temperaturas, esperaríamos que la concentración fraccional C_+ de vacancias catiónicas excederá la concentración fraccional C_- de vacancias aniónicas. Sin embargo esto daría como resultado una gran energía coulombiana, ya que la dislocación estaría positivamente cargada, mientras los alrededores tendrían una carga espacial negativa. El resultado final es un compromiso en el cual la dislocación está cargada y un exceso de vacancias de ión positivo existen cerca de la dislocación apantallándola, pero lejos de ésta hay iguales concentraciones de iones positivos y negativos

Restringiremos nuestra discusión a cristales del tipo M^+X^- con la estructura del NaCl para el cual el desorden intrínseco

es del tipo de Schottky. Consideremos un cristal eléctricamente neutro y de extensión infinita. Supondremos que la distribución de defectos cargados sobre la dislocación puede ser apropiadamente suavizada, de tal manera que el potencial $\bar{\Phi}$ resultante de ésta distribución satisficará la ecuación de Poisson para un medio con una constante dieléctrica ϵ . (15)

Supondremos una densidad N_d de dislocaciones de borde estáticas, regularmente espaciadas y paralelas entre sí, dentro del cristal. También supondremos que el radio del corazón de la dislocación es a ; entónces las condiciones en la frontera sobre el potencial $\bar{\Phi}$ en un sistema de coordenadas cilíndricas, con el eje z a lo largo de la línea de la dislocación y con r perpendicular a ésta línea, son:

$$\bar{\Phi} = 0 \quad \text{en } r = a \quad (I2-1)$$

$$\frac{d\bar{\Phi}}{dr} = 0 \quad \text{en } r = R \quad (I2-2)$$

La condición (I2-2) expresa el hecho de que la dislocación y la región que la rodea hacia afuera en un radio R forma un sistema eléctricamente neutro. La condición (I2-1) se discutirá posteriormente.

Suponemos además que siempre estamos en un estado de equilibrio térmico. O sea que todos los defectos tienen movibilidades suficientemente altas, para que el estado predicho en una minimización de la energía libre pueda obtenerse. A bajas temperaturas tal suposición es de dudosa validez.

Otra suposición será que la presión es nula, de tal manera que el estado de equilibrio térmico será determinado por una mi

minimización de la energía libre de Helmholtz, o sea

$$F = U - TS \quad (I2 - 3)$$

dónde U es la energía interna del cristal, T es la temperatura absoluta y S la entropía.

I.3.-DISTRIBUCION DE LA CARGA ESPACIAL PARA UN CRISTAL - PURO.- Para el caso de un cristal puro, la neutralidad eléctrica del sistema significa que tenemos números iguales de cationes y aniones. Ya que estamos considerando el caso de desorden de Schottky, hay que considerar los tipos de defectos ya mencionados: vacancias aniónicas y vacancias catiónicas. El modelo ignora los pares de vacancias amarradas. Sean $n_+(r)$ y $n_-(r)$ las densidades de vacancias catiónicas y aniónicas respectivamente, funciones de r, dónde r está medido desde un eje en un sistema de coordenadas cilíndricas de acuerdo con la simetría de la dislocación.

La energía libre por unidad lángrea de la región del cristal desordenado que estamos considerando es:

$$F = \int_0^R r dr \left[n_+(r)F^+ + n_-(r)F^- + \frac{1}{2} \rho(r)\Phi(r) \right] - TS \quad (I3-1)$$

dónde S es la entropía configuracional. La densidad de carga $\rho(r)$ está determinada por

$$\rho(r) = e (n_-(r) - n_+(r)) \quad (I3-2)$$

y el potencial electrostático $\Phi(r)$ será determinado por la ecuación de Poisson.

$$\nabla^2 \Phi(r) = - \frac{4\pi}{\epsilon} \rho(r) \quad (I3-3)$$

Las cantidades F^+ y F^- , que son las energías de formación de las vacancias catiónicas y aniónicas, incluyen el cambio de la energía vibracional del cristal por la presencia del defecto. Además, finalmente supondremos que las cantidades F^+ y F^- son independientes de r .

Haremos una variación de F con respecto a las cantidades independientes $n_+(r)$ y $n_-(r)$. Así:

$$\delta F = \int_0^R r dr [\delta n_+(r) F^+ + \delta n_-(r) F^- - \frac{1}{2} \delta \{ \rho(r) \phi(r) \}] - T \delta S \quad (I3-4)$$

Por lo tanto tenemos que evaluar la integral de la variación de la energía electrostática y la variación de la entropía con figuracional.

Si denotamos por I a la integral de la variación de la energía electrostática.

$$I = \frac{1}{2} \int_0^R r dr \{ \delta \rho(r) \phi(r) + \rho(r) \delta \phi(r) \} \quad (I3-5)$$

La variación de $\rho(r)$ se sigue inmediatamente de la relación $\rho(r) = e \{ n_-(r) - n_+(r) \}$, así, considerando la segunda parte de (I3-4)

$$I_1 = \frac{1}{2} \int_0^R r dr \rho(r) \delta \phi(r) \text{ y usando la ecuación de Poisson } -\epsilon \nabla^2 \phi(r) = 4\pi \rho(r) \text{ y utilizando integración por partes se tiene}$$

$$\int \rho \delta \phi r dr = -\frac{\epsilon}{4\pi} \int \nabla^2 \phi \delta \phi r dr = -\frac{\epsilon}{4\pi} \int \phi \delta \nabla^2 \phi r dr = \int \phi \delta \rho r dr \quad (I3-6) *$$

Al realizar por dos veces las integraciones por partes, los términos que se anulan, lo hacen debido a el hecho de que los campos desaparecen a una distancia R . Así tenemos

$$I = \int_0^R \delta \rho \phi r dr + e \int_0^R r \{ \delta n_-(r) - \delta n_+(r) \} \phi dr \quad (I3-7)$$

* ver Apéndice

dónde ρ_0 es la carga en la dislocación.

Queremos enfatizar que el potencial $\phi(r)$ es la diferencia de potencial entre el punto r y el centro de la dislocación.

En seguida, consideraremos la variación de la entropía configuracional por unidad de área. Supondremos un volumen cristalino pequeño ΔV_i que aún contiene gran número de defectos en una región dónde la concentración de defectos es esencialmente constante. Supongamos que ésta región contiene $n_+^i \Delta V_i$ vacancias catiónicas y $n_-^i \Delta V_i$ vacancias aniónicas y $N \Delta V_i$ sitios aniónicos y catiónicos. El número de maneras que éstos componentes pueden ser arreglados sobre los sitios disponibles es

$$w_i = (N \Delta V_i)! \{ [n_+^i \Delta V_i]! [n_-^i \Delta V_i]! [(N - n_+^i) \Delta V_i]! \times \\ \times [(N - n_-^i) \Delta V_i]! \}^{-1} \quad (I3-8)$$

usando la aproximación de Stirling y variando $\ln w_i$ con respecto a n_+^i y n_-^i , encontramos

$$\delta(\ln w_i) = \Delta V_i \left\{ \delta n_+^i \ln \frac{N - n_+^i}{n_+^i} + \delta n_-^i \ln \frac{N - n_-^i}{n_-^i} \right\} \quad (I3-9)$$

para el cristal completo la entropía configuracional S está determinada por

$$S = k \ln \prod_i w_i = k \sum_i \ln w_i \quad (I3-10)$$

obteniendo finalmente

$$\delta S/L = k \int_a^R dr \left\{ \delta n_+(r) \ln \frac{N - n_+(r)}{n_+(r)} + \right. \\ \left. + \delta n_-(r) \ln \frac{N - n_-(r)}{n_-(r)} \right\} \quad (I3-11)$$

Como establecimos anteriormente, Δv_i debe contener muchos defectos en una región dónde la concentración de defectos es esencialmente constante. Al pasar de (I.3-10) a (I.3-11), dónde de todas las cantidades son funciones de r , éstas condiciones se expresan como

$$nA|\Delta r| \gg 1 \quad \text{y} \quad |dn/dr||\Delta r| \ll n$$

dónde n es cualquier densidad de defectos, A es el área en cuestión, y la integración se pensará como una suma sobre las Δr 's sucesivas que satisfacen las condiciones anteriores, las cuales deben cumplirse para que (I3-11) sea válida.

Así, utilizando (I3-11) y usando el resultado (I3-7) para la variación de la energía electrostática, obtenemos para δF :

$$\delta F = \int \delta \rho_p \phi dr + \int_a^R dr \left[\delta n_+(r) \left\{ F^+ - e\phi(r) - kT \ln \left(\frac{N - n_+(r)}{n_+(r)} \right) \right\} + \delta n_-(r) \left\{ F^- + e\phi(r) - kT \ln \left(\frac{N - n_-(r)}{n_-(r)} \right) \right\} \right] \quad (I3-12)$$

dónde N es la densidad de sitios aniónicos o catiónicos en el cristal. Ya que no existen restricciones sobre las cantidades variadas, las condiciones para un mínimo de la energía libre $\delta F = 0$ son que los sumandos de (I3-12) deben anularse, o sea que el primer sumando y los coeficientes de δn_+ y δn_- deben anularse. Ahora, ya que $\delta \rho_p$ representa una variación arbitraria, es claro que el primer sumando se anula únicamente si el potencial en el corazón de la dislocación es cero, lo cual es la condición (I2-1). Las condiciones para que δn_+ y δn_- se anulen resultan

$$\begin{aligned} n_+(r) &= N \exp \left\{ - (F^+ - e\phi(r)) / kT \right\} \\ n_-(r) &= N \exp \left\{ - (F^- + e\phi(r)) / kT \right\} \end{aligned} \quad (I3-13)$$

en dónde se supone que n_+/N y n_-/N son mucho menores que uno.

Por lo tanto las expresiones en (I3-13) son las distribuciones de las vacancias, y la distribución de carga la obtenemos de $\rho(r) = e (n_-(r) - n_+(r))$, donde e es la carga del electrón.

I.4.- ECUACION PARA EL POTENCIAL.- Ya que conocemos la distribución de carga $\rho(r)$ podemos plantear la ecuación para el potencial

$$\nabla^2 \bar{\phi}(r) = - \frac{4\pi e}{\epsilon} [n_-(r) - n_+(r)] \quad (I4-1)$$

Ya que $\bar{\phi}(R)$ es el potencial para el cual $\rho(r) = 0$, lo podremos hallar haciendo $n_-(R) = n_+(R)$, obteniéndose

$$e\bar{\phi}(R) = \frac{1}{2} (F^+ - F^-) \quad (I4-2)$$

como sabemos R es la distancia media entre dislocaciones.

Utilizando el laplaciano en coordenadas cilíndricas y utilizando las cantidades:

$$Z = \frac{e}{kT} \{ \bar{\phi}(r) - \bar{\phi}(R) \} ; \quad S = Kr \quad (I4-3)$$

dónde
$$K^2 = \frac{8\pi N e^2}{\epsilon kT} \exp \left\{ \frac{e\bar{\phi}(R) - F^+}{kT} \right\} \quad (I4-4)$$

la ecuación de Poisson (I4-1) resulta

$$\frac{1}{S} \frac{d}{ds} \left[S \frac{dZ}{ds} \right] = \sinh Z \quad (I4-5)$$

con las condiciones a la frontera (I4-1) y (I4-2) que repetimos aquí

$$\bar{\phi} = 0 \quad \text{en} \quad r = a$$

$$\frac{d\bar{\phi}}{dr} = 0 \quad \text{en} \quad r = R$$

En lo que se ha discutido se ha tratado a la nube de carga como un continuo en el cual el potencial del corazón car-

gado de la dislocación se toma como el debido a una línea continua de carga sobre el eje de la dislocación. Ya que la carga sobre el corazón de la dislocación es de naturaleza discreta, debería tomarse en cuenta ésta naturaleza, sin embargo en el caso de las cargas localizadas sobre el corazón existe la dificultad de que se repelen entre sí, de tal manera que todas las distribuciones de carga son igualmente probables. Se han distinguido dos casos límites: la aproximación de "energía mínima" en la cual los defectos cargados están igualmente espaciados y su entropía es nula, y la aproximación de "estadística de Fermi" en la cual se supone que se ocupan todos los sitios con igual probabilidad y su energía de interacción se mantiene en su valor mínimo. Después se desarrollaron aproximaciones entre éstos extremos. Como se formularon originalmente, todas éstas teorías requieren que la energía total pueda ser calculada analíticamente en la configuración de energía mínima y esto hace necesario usar modelos sencillos de la nube de carga con distribuciones de defectos cargados apropiadamente suavizadas para que el potencial ϕ resultante satisfaga la ecuación de Poisson, tal como se ha hecho aquí.

I.5.-DISTRIBUCION DE LA CARGA ESPACIAL PARA UN CRISTAL CON IMPUREZAS.--Supondremos que hay en el cristal una concentración promedio \bar{C} de impurezas catiónicas divalentes, donde \bar{C} se define como la razón de iones de impureza a cationes normales. Hay considerable evidencia de que cuando, por ejemplo, un NaCl derretido se le añaden impurezas tales como el CaCl_2 , el Ca entra al cristal como iones Ca^{++} en sitios catiónicos, nosotros consideraremos que éste es el caso. La neutralidad total del

crystal entonces significará aquí que cada catión divalente que entra al cristal trae consigo dos aniones.

Hay ahora, además de los dos tipos de defectos discutidos antes, los catiónes divalentes que representan defectos de impureza, que pueden presentarse en forma aislada con una carga efectiva $+e$, y también como defectos que consisten en impurezas amarradas con vacancias catiónicas vecinas cercanas. Estos defectos al igual que las vacancias amarradas son complejos neutros y no contribuirán a la densidad de carga. Sin embargo en ésta sección consideraremos los dos tipos de apareamientos para mayor generalidad.

La energía libre por unidad lineal de la región alrededor de la dislocación del cristal desordenado que estamos considerando, dentro de una cantidad aditiva dependiente únicamente de la temperatura es:

$$F = \int_0^R dx [n_+(x)F^+ + n_-(x)F^- + n_B(x)\{F^+ + F^- - B\} + n_{ib}(x)\{F^+ - B_+\} + \frac{1}{2} \rho(x)\phi(x)] - TS \quad (I5-1)$$

dónde n_B es la densidad de pares de vacancias amarradas, n_{ib} la densidad de complejos impureza-vacancia catiónica, B la energía de amarre entre vacancias y B_+ la del complejo impureza-vacancia catiónica, Ahora la densidad de carga es:

$$\rho = e(n_{if} + n_- + n_+) \quad (I5-2)$$

dónde n_{if} es la densidad de impurezas desasociadas.

Haremos ahora una variación de F permitiendo que n_+ , n_- , n_B , n_{if} y n_{ib} varíen. Procediendo en la misma forma que la sección I.4 y sabiendo que el número de maneras que los defectos constituyentes contenidos en un volumen ΔV_1 pueden ser

arreglados en $N \Delta V_i$ sitios es ¹⁵

$$W_i = \sum_{mn} \binom{n_{i,b} \Delta V_i}{mn} \left[\prod_{j=0}^{(n_{i,b} \Delta V_i - 1)} (N \Delta V_i - 2j) \right] \frac{[(N - 2n_{i,b}) \Delta V_i]!}{[n_{i,b} \Delta V_i]!} \times$$

$$\times \frac{\sum_n \binom{n_{i,b} \Delta V_i}{n} [(N - n_{i,b}) \Delta V_i]!}{[n_{i,b} \Delta V_i]! [n_{i,f} \Delta V_i]! [n_{i,+} \Delta V_i]! [n_{i,-} \Delta V_i]!} \times$$

$$\times \frac{1}{[(N - 2n_{i,b} - n_{i,b}^i - n_{i,f}^i - n_{i,+}^i) \Delta V_i]! [(N - n_{i,b}^i - n_{i,-}^i) \Delta V_i]!} \quad (1.5-3)$$

podremos obtener la variación de la entropía configuracional y obtener usando el mismo proceso mencionado en el caso de cristales puros, que las condiciones para que la energía libre sea mínima, son: ¹⁵

$$\frac{n_{i,f}}{N - 2n_{i,b} - n_{i,b} - n_{i,f} - n_{i,+}} = \exp \left\{ - \frac{e\phi + \alpha}{kT} \right\} \quad (15-4)$$

$$\frac{n_{i,b} (N - 2n_{i,b})^2}{(N - 2n_{i,b} - n_{i,b} - n_{i,f} - n_{i,+})^2 N} = \sum_{mn} \exp \left\{ - \frac{F^+ - B_+ + \alpha}{kT} \right\}$$

$$\frac{n_{i,+}}{N - 2n_{i,b} - n_{i,b} - n_{i,f} - n_{i,+}} = \exp \left\{ - \frac{F^+ - e\phi}{kT} \right\}; \quad \frac{n_{i,-}}{N - n_{i,b}} = \exp \left\{ - \frac{F^- + e\phi}{kT} \right\}$$

$$\frac{n_{i,b} (N - n_{i,b})}{(N - 2n_{i,b} - n_{i,b} - n_{i,f} - n_{i,+})(N - n_{i,b} - n_{i,-})} = \sum_n \exp \left\{ - \frac{F^+ + F^- - B}{kT} \right\}$$

en las expresiones anteriores, z_n y z_{mn} son el número de vecinos cercanos diferentes e iguales respectivamente, para un ión dado. Además de las condiciones anteriores, prevalece la condición de potencial nulo en el corazón de la dislocación.

El multiplicador de Lagrange α se introduce para tomar en

el hecho de que el número total de impurezas en el sistema debe permanecer constante, o sea:

$$\int_0^R dr \{n_{i5} + n_{i6}\} \equiv N \bar{C} R \quad (I5-5)$$

Suponemos que n_{i6}/N , n_+/N , n_-/N , n_B/N y n_{i5}/N son mucho menores que uno. Usando la suposición de que todas las concentraciones son pequeñas, (I5-4) puede simplificarse para cada una de las expresiones que ahí aparecen, como:

$$\begin{aligned} n_+/N &= \exp \{ - (F^+ - e\phi) / kT \} \\ n_-/N &= \exp \{ - (F^- + e\phi) / kT \} \\ n_{i5}/N &= \exp \{ - (e\phi + \alpha) / kT \} \\ n_{i6}/N &= Z_{nn} \exp \{ - (F^+ - B_+ + \alpha) / kT \} \\ n_B/N &= Z_n \exp \{ - (F^+ + F^- - B) / kT \} \end{aligned} \quad (I5-6)$$

Así la densidad de carga resulta

$$\begin{aligned} \rho &= eN [\exp \{ - (e\phi + \alpha) / kT \} + \exp \{ - (F^- + e\phi) / kT \} \\ &\quad - \exp \{ - (F^+ - e\phi) / kT \}] \end{aligned} \quad (I5-7)$$

Otra vez tenemos que $\phi(R)$ es el potencial para $\rho = 0$, Así

$$\begin{aligned} 0 &= \exp \{ - (e\phi(R) + \alpha) / kT \} + \exp \{ - (F^- + e\phi(R)) / kT \} \\ &\quad - \exp \{ - (F^+ - e\phi(R)) / kT \} \end{aligned} \quad (I5-8)$$

Por lo tanto, utilizando otra vez las cantidades (I4-3) y (I4-4), obtenemos una vez más una ecuación del tipo (I4-5). Únicamente hay que tomar en cuenta el hecho importante de que ahora $\phi(R)$ se refiere al cristal que contiene cationes divalentes, y se puede obtener de la expresión (I5-8).

1.6.-POTENCIAL EN LA DISLOCACION.- No es posible resolver la ecuación para el potencial analíticamente, sin embargo se puede realizar un intento de solución analítica para una situación no descrita por las ecuaciones anteriores. A concentraciones promedio moderadamente bajas de impurezas (cerca de 3×10^{-6} a temperatura ambiente), ocurre, que en el corazón de la dislocación hay saturación; entonces en la vecindad de éste corazón existirá una región saturada en el cual el término de impurezas domina la densidad de carga. Cuando existe una situación de saturación la suposición $n_{if}/N \ll 1$, ya no vale más, y para obtener una solución al problema debemos empezar con las expresiones generales para las densidades de defectos, que se obtuvieron al minimizar la energía libre. Ahora nosotros supondremos que todas las concentraciones de defectos son pequeñas, excepto las de impurezas libres. Entonces tenemos:¹⁶

$$n_+ / (N - n_{if}) = \exp \{ - (F^+ - e\phi) / kT \}$$

$$n_- / (N) = \exp \{ - (F^- + e\phi) / kT \}$$

$$n_{if} / (N - n_{if}) = \exp \{ - (e\phi + \alpha^+) / kT \}$$

$$n_{ib} N / (N - n_{if})^2 = \sum_m \exp \{ - (F^+ - B_+ + \alpha^+) / kT \} \quad (16-1)$$

$$n_B / (N - n_{if}) = \sum_m \exp \{ - (F^+ + F^- - B) / kT \}$$

dónde α^+ es ahora el multiplicador de Lagrange relacionado con la conservación de la cantidad de impurezas. La densidad de carga ρ estará dado por

$$\rho = e(n_- + n_{if} - n_+) \quad (16-2)$$

y el potencial en el punto de equilibrio $\bar{\phi}(R)$ determinado por

$$\rho = 0, \text{ será } \bar{\phi}(R) = \frac{1}{2e} (F^+ - \alpha^+) \quad (16-3)$$

Así, cuando la concentración de defectos está esencialmente gobernada por el contenido de impurezas, éstas tienden a concentrarse en la vecindad del corazón de la dislocación y se forma una región saturada a su alrededor, que será descrita en la ecuación de Poisson haciendo a $\sinh z$ una constante; encontrándose que la solución asociada con el potencial en esta región saturada es:³

$$z_1 = - \frac{e\Phi(R)}{kT} + b \ln \frac{r}{a} - \frac{\pi N e^2}{\epsilon k T} (r^2 - a^2) \quad (16-4)$$

en esta ecuación a y R se pueden conocer para un cristal dado, y si suponemos conocido $\Phi(R)$, la cantidad que queda por determinar es la constante b . Esta función satisfecerá la condición a la frontera en el corazón de la dislocación.

Fuera de la región saturada el tipo de solución usada depende de la consideración de tener z grande o pequeña, para tener idea de que orden de magnitud puede ser z , podemos ver de (16-4) que toma el valor negativo $-e\Phi(R)/kT$ en $r = a$, después, utilizando valores para el NaCl y con el valor de b obtenido como se detalla en seguida, se comprueba que z va tomando valores mayores a $-e\Phi(R)/kT$ o sea se hace más pequeño en valor absoluto, conforme va creciendo la distancia r . Así, para valores grandes de $-z$, supondremos que es válida la aproximación: $\sinh z \approx e^{-z}/2$, la cual colocada en la ecuación de Poisson, da como resultado una solución de la forma³

$$z_2 = 2 \ln \frac{s \sinh \left[\frac{1}{2} H^{1/2} \ln \frac{r}{s_0} \right]}{H} \quad (16-5)$$

en donde $s = Kr$ y las constante H y s_0 las debemos determinar, la constante K se define según la expresión (14-4).

Si $-z$ es pequeña y más cercana al cero, entonces supondremos que existe una región para la cual vale la aproximación $\sinh z \approx z$

Con la cual obtenemos la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 z = k^2 z \quad (I6-6)$$

La solución en ésta región exterior es

$$z_3(kr) = -AK_0(kr) \quad (I6-7)$$

dónde K_0 es la función Bessel modificada de orden cero y A es una constante que se debe determinar. Esta función satisficará Las ^{condic.} a la frontera externas. En la discusión anterior se ha supues-
to desde luego que la función z asociada al potencial es monótona creciente y va del valor $-\frac{e\phi(r)}{kT}$ a cero.

Si los puntos frontera entre las regiones z_1 y z_2 y las regiones z_2 y z_3 se pueden hallar, los subsecuentes pasos para resolver la ecuación de Poisson consisten en aplicar las siguientes condiciones en la frontera

$$z_1(r_{12}) = z_2(r_{12}) ; \quad \left. \frac{\partial z_1}{\partial r} \right|_{r_{12}} = \left. \frac{\partial z_2}{\partial r} \right|_{r_{12}} \quad (I6-8)$$

$$z_2(r_{23}) = z_3(r_{23}) ; \quad \left. \frac{\partial z_2}{\partial r} \right|_{r_{23}} = \left. \frac{\partial z_3}{\partial r} \right|_{r_{23}} \quad (I6-9)$$

dónde r_{12} y r_{23} son las correspondientes puntos frontera.

El punto r_{12} lo podemos determinar observando que en él ocurre que $n_{1r}/N = 1$; por lo tanto utilizando la tercera expresión de (I5-6), tendremos^{15, 16} (con $\alpha \rightarrow \alpha^+$)

$$\exp\{-z_1(r_{12})\} \exp\{-(F^+ + \alpha^+)/2kT\} = 1 \quad (I6-10)$$

con lo cual obtenemos

$$z_1(r_{12}) = -(F^+ + \alpha^+)/2kT \quad (I6-11)$$

y de la expresión (I6-3) obtenemos finalmente

$$\frac{e\phi_1}{kT} = P_1(r_{12}) = -\alpha^+ \quad (I6-12)$$

calculando α^+ con la integral del tipo (I5-5) de acuerdo con la condición de la conservación del número de impurezas, se obtiene $\alpha^+(r_{12}) = 2kT \left\{ \ln 2Z_{nn} + (F^+ - 2B_+) + \ln \left[(4C_R(r_{12}) Z_{nn} e^{B_+/kT} + 1)^{1/2} - 1 \right] \right\}$; $C_R(r_{12}) = \bar{C} - \frac{1}{R} \left[r_{12} + \frac{\epsilon kT}{2\pi N e^2} \right]$ (I6-13)

con lo cual utilizamos (I6-12) y podemos hallar r_{12} de la ecuación que resulta para éste valor, si a la vez conocemos el valor de b en la función $p_1(r)$. Además hallamos $\bar{\phi}(R)$ de (I6-3).

La constante b la podemos determinar observando que la carga por unidad de longitud será dada por

$$q = \epsilon E_r / r_{12} a = - \frac{\epsilon kT}{2e} (ka) \frac{dz}{ds} \Big|_{s=ka} \quad (I6-14)$$

realizando la derivada podemos despejar b , con el resultado

$$b \equiv - \frac{2e q}{\epsilon kT} + \frac{2\pi N e^2}{\epsilon kT} a^2 \quad (I6-15)$$

y por lo tanto suponiendo un valor para q que no rebase la máxima carga posible en el corazón de la dislocación ($1 \times 10^{-2} \frac{\text{esu}}{\text{cm}}$), bajo régimen de saturación, tendremos el valor de la constante b .

El siguiente paso es calcular H y s_0 de las condiciones en la frontera, siempre y cuando z_2 sea rigurosamente válida en la frontera con la región saturada, Así, estas condiciones establecen las relaciones.

$$z_1(r_{12}) = z_2(r_{12}) \Rightarrow e^{-z_1(s_1)} = e^{-z_2(s_1)}$$

$$\frac{dz_1}{ds} \Big|_{s=s_1} = \frac{dz_2}{ds} \Big|_{s=s_1}; \quad s_1 = k r_{12}$$

con lo cual tenemos

$$C(s_1) = s_1 \left[e^{-z_1(s_1)} \right]^{1/2} = \frac{H^{1/2}}{\sinh \left[\frac{H^{1/2}}{2} \ln \frac{s_1}{s_0} \right]} \quad (I6-16)$$

$$b = H^{1/2} \coth \left[\frac{H^{1/2}}{2} \ln \left(\frac{s_1}{s_0} \right) \right] \quad (I6-17)$$

En éstas ecuaciones, ya que $\coth x$ es siempre mayor en valor

que $1/\operatorname{senhx}$, para que exista una solución simultánea para H y s_0 debe ser b siempre mayor a $C(s_1)$, pero esto solo ocurre para valores de b que corresponden a q 's mucho mayores a la máxima carga posible en la dislocación. De la única otra manera en que lo anterior puede cumplirse es suponiendo una solución distinta a z_1 y z_2 en la región en la cual dejan de tener estricta validez, esta región se denominará semisaturada.

Después de realizar numerosas tentativas con varias funciones, encontramos para la región semisaturada una función z_2' de la forma ⁷

$$z_2' = b_1' \ln \frac{r}{a} + b_2' \quad (16-18)$$

las constantes b_1' y b_2' pueden determinarse de las condiciones en la frontera

$$z_1(r_{12}) = z_2'(r_{12}) ; \left. \frac{dz_1}{dr} \right|_{r=r_{12}} = \left. \frac{dz_2'}{dr} \right|_{r=r_{12}} \quad (16-19)$$

Y para determinar H y s_0 utilizamos condiciones en la frontera similares a las anteriores, ahora entre z_1' y z_2' . El criterio para determinar el punto frontera r_{22}' es; seleccionarlo de tal manera, que ocurra que el tamaño de la región semisaturada sea mínimo en base a que siempre se cumpla ahí, $b > C(s_1)$. Una vez que H y s_0 están determinadas A y r_{23} se derivan para condiciones en la frontera expresadas en (16-9).

Sin embargo observamos que existe una región en que no valen de manera estricta las funciones z_2 y z_3 , pues el resultado de z_2 se debe a la aproximación $\operatorname{senhz} \approx z$ que vale para valores en que $|z| \leq 0.5$ y el resultado de z_3 se debe a la aproximación $\operatorname{senhz} \approx e^{-z}/2$ que vale para valores grandes de $-z$.

En particular para $-z = 1.5$ tal aproximación es aún correcta. Por lo tanto tenemos que hallar una función apropiada para la región en que no valen z_2 y z_3 . Llevando a cabo varias pruebas se encuentra que tal función es del tipo ⁷

$$-z_3' = Ds^2 + Cs + B \quad (16-20)$$

El punto frontera entre z_2 y z_3' se obtuvo de la relación $-z_2(r_{23}') = 1.5$, quedando por determinar las constantes D, B, C, y r_{33}' que es el punto frontera entre z_3 y z_3' . Las condiciones en la frontera en r_{23}' y r_{33}' nos determinan las ecuaciones

$$z_2(Kr_{23}') = z_3'(Kr_{23}') \quad (16-21)$$

$$\frac{dz_2(Kr_{23}')}{ds} = \frac{dz_3'(Kr_{23}')}{ds} \quad (16-22)$$

$$\frac{z_3'(Kr_{33}')}{dz_3'(Kr_{33}')/ds} = \frac{z_3(Kr_{33}')}{dz_3(Kr_{33}')/ds} \quad (16-23)$$

Para conocer las constantes indeterminadas procedemos escogiendo un valor de r_{33}' mayor que r_{23}' y resolvemos las tres ecuaciones simultáneas, obteniendo valores de r_{33}' hasta que $z_3'(r_{33}') \approx -0.5$, a partir de éste punto vale la función z_3 . Para finalizar encontramos A, la constante indeterminada de z_3 por la condición en la frontera $z_3'(r_{33}') = z_3(r_{33}')$.

I I

TIEMPO LIBRE MEDIO EN CRISTALES CON DISLOCACIONES

II.1.-CONDUCTIVIDAD ELECTRONICA.* Existen varios métodos para obtener electrones de conducción en un cristal iónico; un método usual es la fotoconductividad, la cual es el incremento en la conductividad eléctrica de un cristal aislador causada por radiación incidente en el cristal. El efecto directo de la iluminación es incrementar el número de portadores de carga móviles en el cristal. Si la energía del fotón incidente es mayor que el intervalo de las bandas de valencia y conducción, E_g , entonces cada fotón absorbido en el cristal producirá un par libre electrón-agujero. Así el fotón absorbido eleva a la banda de conducción un electrón que estaba originalmente en la banda de valencia.

Sea cual fuere el método con que fueron creados el par electrón-agujero, éstos terminan por recombinarse, pero pueden tener distintas historias antes de la recombinación al interactuar con fotones, impurezas, dislocaciones u otros defectos. El efecto de cualquier interacción de dispersión particular puede evaluarse calculando el tiempo libre medio asociado con éste proceso. Una vez que el tiempo libre medio se conoce, la movilidad de los electrones o agujerones puede expresarse como $|u| = |e\tau/m|$.

Si en un cristal iónico donde existen pares electrón-agujero, aplicamos un campo eléctrico, se producirá una corriente eléctrica en la dirección del campo, la cual puede ser distinta según distintas causas. El tiempo libre medio de los electrones puede afectarse (y así la corriente eléctrica) debido a la interacción con fotones, con impurezas o con defectos. Sin embargo, aquí, nos interesará únicamente el efecto que puedan tener las dislocaciones cargadas sobre el tiempo libre medio y por lo tanto, sobre la corriente eléctrica.

Consideremos que en el cristal iónico existe un arreglo de dislocaciones paralelas, las cuales afectarán a la movilidad de los electrones de la siguiente manera: La movilidad electrónica normal a las dislocaciones será reducida - debido a que los cilindros de carga espacial deflectan a los electrones y dispersan el momento electrónico normal a las dislocaciones, esto reduce el tiempo libre medio. La dispersión por dislocaciones está caracterizada por una trayectoria media libre que depende de la dirección. Si ocurre que las dislocaciones están bastante apartadas de - tal manera que el tiempo libre medio no se afecte, la movilidad macroscópica o corriente eléctrica puede reducirse debido a que los electrones no pueden ser acarreados paralelos a el campo eléctrico aplicado, en lugar de hacerlo así, siguen trayectorias curvas que voltean entre los cilindros de carga espacial. Si la movilidad electrónica es paralela a las dislocaciones, éstas tendrán poco efecto sobre los electrones.

II,2 .- EL TIEMPO LIBRE MEDIO.- En esta sección se considera el proceso de decaimiento realizando una formulación general de éste proceso, en particular obtendremos el tiempo libre medio en relación con la probabilidad de dispersión. El procedimiento es demostrar que cualquier disturbio de la distribución de electrones a partir del valor de equilibrio tiende a decaer debido a la dispersión de electrones en cualquier tipo de interacción con defectos, impurezas, etc.

El tratamiento simplificado que se dará sobre el - proceso de dispersión se basa en dos suposiciones: 18

(1) La probabilidad de que un electrón (o agujero) haga una transición en un intervalo pequeño de tiempo dt es $dt/\tau(v)$, dónde $\tau(v)$ es el parámetro de la probabilidad y se verá que es el tiempo libre medio.

(2) La probabilidad de una transición a cualquier estado final particular es independiente del estado inicial y es directamente proporcional a la probabilidad de que el estado final estuviera ocupado en la distribución de equilibrio térmico.

En ésta última suposición hay que considerar que en realidad el electrón puede ganar o perder una pequeña fracción de su energía en una colisión determinada; sin embargo éste cambio de energía es muy pequeño, más aún, habrá efectos de balance, y los electrones que caen a bajas energías serán reemplazados por otros electrones excitados a altas energías. Por ésto, se introducen errores despreciables haciendo la aproximación acostumbrada de la teoría de la conductividad de que la energía se conserva en las transiciones. La suposición deja de considerar la distribución de direcciones después de la colisión, pero derivaremos una fórmula que tiene en cuenta tales correlaciones.

La figura 4 representa el caso en el que estamos interesados. Representa en el espacio de momentos a dos superficies de energía ~~distintas~~ separadas por una pequeña diferencia de energía ΔE . Un elemento de volumen en la capa entre las dos superficies puede describirse por la correspondiente área superficial Ω , la cual tiene las dimensiones de (momento)². Un electrón en un estado P_1 puede realizar transiciones a otros estados de casi exactamente la misma energía. Como un

**en la banda de cond.

*constantes

resultado de estas transiciones, los electrones (mas exactamente los estados ocupados por los electrones) resultan uniformemente distribuidos en la capa; tal que la probabilidad de que cualquier estado determinado sea ocupado por un electrón, resulta la misma para todos los estados y adquiere el valor f dado por la función de distribución de Fermi-Dirac.

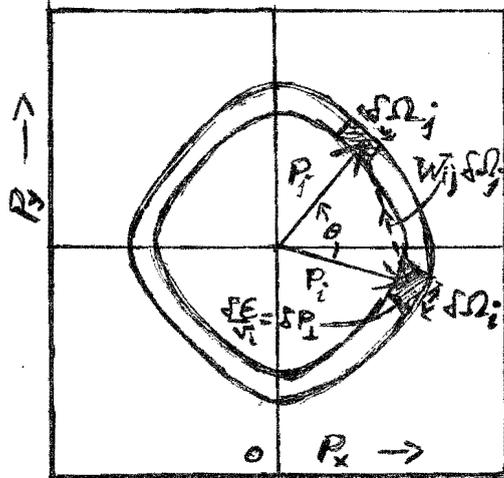


Fig.4

El número de estados en el rango $\delta E \delta \Omega_i$ se obtiene como sigue: El volumen en el espacio de momentos del elemento es $d\Omega$ veces la anchura de la capa, δP_\perp evidentemente,

$$\delta E = |\nabla_P E(P)| \delta P_\perp = v_i \delta P_\perp \quad (11.2-1)$$

La última igualdad se sigue desde la fórmula de la velocidad de grupo. De aquí el volumen del elemento es: $\delta P_\perp \delta \Omega_i = \delta E \delta \Omega_i / v_i$. La densidad de estados en el espacio-P es $2V/h^3$ donde V es el volumen del cristal. Así el número de estados δS_i en el elemento es:

$$\delta S_i = (2V/h^3) \delta E \delta \Omega_i / v_i = 2P_i \delta E \delta \Omega_i \quad (11.2-2)$$

donde $P_i = V/v_i h^3$ es la densidad de estados de cada espín por unidad de energía por unidad de área superficial.

Para el caso en el cual la banda de conducción está casi vacía, tal que el principio de exclusión de Pauli puede ignorarse, las transiciones pueden describirse en términos del parámetro de probabilidad W_{ij} . Este parámetro se usa para especificar la probabilidad total de transición desde un estado i a todos los estados j estando en una región $d\Omega_j$ de la capa de energía. En estas transiciones puede haber pérdidas o ganancias de energía. Para razones discutidas antes despreciamos éstos cambios de energía y suponemos que todos los estados a los cuales el estado P_i puede realizar transiciones están en la capa $\sqrt{\mathcal{E}}$ tal que podemos hablar de transición por unidad de área de la capa. Así la probabilidad de que un electrón haga una transición desde un estado cerca de P_i a un estado en un rango $\sqrt{\Omega_j}$ cerca de P_j en el tiempo dt es

$$W_{ij} \sqrt{\Omega_j} dt \quad (\text{II2-3})$$

El número total de transiciones de éste tipo se obtiene simplemente multiplicando ésta probabilidad por el número de electrones en el elemento $\sqrt{\Omega_i}$; y éste número es simplemente ds_i veces la probabilidad f_i de que éstos estados estén ocupados. Por lo tanto la razón total de transición desde $\sqrt{\mathcal{E}}\sqrt{\Omega_i}$ a $\sqrt{\mathcal{E}}\sqrt{\Omega_j}$ es

$$(\sqrt{\mathcal{E}}\sqrt{\Omega_i} \rightarrow \sqrt{\mathcal{E}}\sqrt{\Omega_j}) = f_i \sqrt{s_i} W_{ij} \sqrt{\Omega_j} \quad (\text{II2-4})$$

$$= f_i z \rho_i W_{ij} \sqrt{\Omega_i} \sqrt{\Omega_j} \sqrt{\mathcal{E}} \quad (\text{II2-5})$$

De manera similar las transiciones desde j a i estarán determinadas por

$$(\sqrt{\mathcal{E}}\sqrt{\Omega_j} \rightarrow \sqrt{\mathcal{E}}\sqrt{\Omega_i}) = f_j z \rho_j W_{ji} \sqrt{\mathcal{E}} \sqrt{\Omega_i} \sqrt{\Omega_j} \quad (\text{II2-6})$$

Estas expresiones son consistentes con el principio del balance detallado, el cual establece que cada proceso y su inverso ocurren con igual frecuencia bajo condiciones de equi-

librio. Para equilibrio térmico $f_i = f_j = f(\mathcal{E})$, que es la función de distribución de Fermi-Dirac para la energía \mathcal{E} de la capa.

La probabilidad total de transición desde el estado P_i es simplemente la suma de todas las probabilidades de transición a todas las áreas $\delta\Omega_j$. La escribiremos como W_i , dónde

$$W_i = \int_{\Omega(\mathcal{E})} W_{ij} \delta\Omega_j = 1/\tau_c \quad (\text{II.2-7})$$

Esta probabilidad es esencialmente el recíproco del tiempo de relajamiento o tiempo libre medio entre colisiones, ya que la probabilidad de colisión es dt/τ que es evidentemente igual a $W_i dt$.

En seguida consideraremos la ley de decaimiento para cualquier corriente producida por un disturbio de la distribución de equilibrio. Trataremos primero el caso de principal interés, en el cual las superficies de energía se consideran esferas y todas las direcciones de movimiento son equivalentes. Para el caso esférico, es evidente de la simetría, que para la condición de equilibrio no hay corriente neta. En seguida supondremos que estamos tratando con una situación perturbada. Consideremos la corriente debida a el grupo de electrones δn_i en un elemento de volumen $\delta\mathcal{E} \delta\Omega_i$. Estos producirán una densidad de corriente

$$\delta I = (-e v_i / V) \delta n_i \quad (\text{II.2-8})$$

En el tiempo dt , una fracción $W_{ij} \delta\Omega_j dt$ será dispersada en una nueva dirección con velocidad v_j , tal que el cambio de corriente será

$$d\delta I = dt \int_{\Omega(\mathcal{E})} [-e (v_j - v_i) / V] \delta n_i W_{ij} \delta\Omega_j \quad (\text{II.2-9})$$

siendo $\Omega(\mathcal{E})$ la superficie de energía. Para los casos de particular interés, las transiciones son de tal naturaleza que W_{ij}

es una función $W(\theta)$ de θ , el ángulo entre las velocidades inicial y final. Bajo estas condiciones, podemos escoger un sistema de coordenadas esféricas con $\theta = 0$ paralelo a v_i . En términos de éste sistema de coordenadas, podemos escribir

$$\vec{v}_i = v_i \hat{k} \quad (\text{II2-10})$$

$$\vec{v}_j = (\hat{k} \cos \theta + \hat{i} \sin \theta \cos \varphi + \hat{j} \sin \theta \sin \varphi) v_j \quad (\text{II2-11})$$

$$d\Omega_j = (m_j v_j)^2 \sin \theta d\theta d\varphi \quad (\text{II2-12})$$

dónde $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$, son vectores unitarios mutuamente ortogonales.

Con la ayuda de éstas expresiones encontramos

$$d\delta I = dt \sum_i n_i (-e/v) v_i \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (\cos \theta - 1) W(\theta) d\Omega_j \quad (\text{II2-13})$$

ya que las componentes a lo largo de \hat{i} y \hat{j} se integran a cero.

Esta expresión puede reescribirse como

$$\begin{aligned} d\delta I &= -dt \delta I \int (1 - \cos \theta_j) W(\theta_j) d\Omega_j = \\ &= -dt \delta I W_0 \langle 1 - \cos \theta \rangle = -dt \delta I / \epsilon \end{aligned} \quad (\text{II2-14})$$

dónde $W_0 = \int W(\theta) d\Omega_j = 1/\epsilon$ (II2.15)

y $\langle 1 - \cos \theta \rangle = (1/W_0) \int (1 - \cos \theta) W(\theta) d\Omega$ (II2-16)

aquí $\langle 1 - \cos \theta \rangle$ es el valor promedio de $1 - \cos \theta$ para todas las colisiones.

Para relacionar éstas ecuaciones a la relajación de la corriente, consideraremos la corriente debida a una distribución arbitraria f_1 sobre la capa de energía, y suponiendo que $f_1 \ll 1$. Cada elemento de área $\sqrt{\Omega}_j$ producirá entonces una corriente \sqrt{I}_j y en el tiempo dt los electrones en éstos elementos sufrirán transiciones tales que

$$d\sqrt{I}_j = -\sqrt{I}_j dt / \epsilon \quad (\text{II2-17})$$

El cambio en la corriente total $I = \sum \delta I_i$ entonces cambiará por

$$dI = \sum d\delta I_i = -(\sum \delta I_i) dt / \tau = -\frac{I dt}{\tau} \quad (\text{II2-18})$$

o sea

$$\dot{I} = -I/\tau \quad (\text{II2-19})$$

Esto muestra que la corriente total decae de acuerdo a una simple ecuación de relajación para la cual la solución es

$$I = I_0 e^{-t/\tau} \quad (\text{II2-20})$$

Así τ es el tiempo de relajación o el tiempo libre medio para la corriente y es la misma cantidad definida como parámetro de probabilidad.

Si tomamos en cuenta el principio de exclusión de Pauli, una gran fracción de los estados en la capa de energía están ocupados, entonces algunas transiciones de electrones estarán prohibidas ya que los estados finales ya estarán ocupados. Esta situación puede tomarse en cuenta de manera muy sencilla, y el sorprendente resultado que se obtiene es que el proceso de relajación no se afecta por tener una proporción apreciable de estados ocupados. En seguida consideraremos una manera sencilla de ver esto.

Veamos una vez más la transición desde $\sqrt{\mathcal{E}} \sqrt{\Omega_i}$ a $\sqrt{\mathcal{E}} \sqrt{\Omega_j}$. Ya que una fracción f_j de los estados en $\sqrt{\mathcal{E}} \sqrt{\Omega_j}$ están ocupados, el número de posibles transiciones es reducida por un factor $(1 - f_j)$ y obtenemos

$$(\sqrt{\mathcal{E}} \sqrt{\Omega_i} \rightarrow \sqrt{\mathcal{E}} \sqrt{\Omega_j}) = f_i (1 - f_j) 2\rho_i W_{ij} \sqrt{\mathcal{E}} \sqrt{\Omega_i} \sqrt{\Omega_j} \quad (\text{II2-21})$$

La razón de transición desde $\sqrt{\mathcal{E}} \sqrt{\Omega_i}$ a $\sqrt{\mathcal{E}} \sqrt{\Omega_j}$ será dada por una expresión similar con $(1 - f_j)f_j$. Así la razón

neta de transición desde $\mathcal{E} \mathcal{E} \Omega_i$ a $\mathcal{E} \mathcal{E} \Omega_j$ es
 $(\mathcal{E} \mathcal{E} \Omega_i \rightleftharpoons \mathcal{E} \mathcal{E} \Omega_j) = [f_i(1-f_j) - f_j(1-f_i)] 2\ell_i W_{ij} \mathcal{E} \mathcal{E} \Omega_i \mathcal{E} \Omega_j$
 $= (f_i - f_j) 2\ell_i W_{ij} \mathcal{E} \mathcal{E} \Omega_i \mathcal{E} \Omega_j$ (II2-22)

Así la razón neta depende únicamente de $f_i - f_j$ y no de f_i y f_j individualmente. Por ésto, la razón de decaimiento de un dis-
 turbio no se afecta por el grado en que los estados estén ocupa-
 dos, y en consecuencia el tiempo libre medio queda inalterado.

Finalmente, utilizando los resultados anteriores, considera-
 remos concretamente la dispersión por dislocaciones, suponiendo
 a un electrón que se mueve con velocidad v y incidiendo sobre una
 dislocación con una componente v_1 normal a élla.

Como antes, tratamos a la dislocación y su carga espacial co-
 mo un cilindro en el cual se deflectan los electrones que inci-
 den perpendiculares a él, (o de manera equivalente la componen-
 te normal de la velocidad). Los electrones de conducción chocan
 con la dislocación y son dispersados, y ocurre que v_1 , la compo-
 nente normal de la velocidad cambia en la colisión, mientras que
 la componente paralela permanece igual.

Un electrón chocará con cualquier dislocación dentro de una
 distancia R (distancia media entre dislocaciones) de su trayec-
 toria. La probabilidad de colisión por unidad de tiempo es así
 $2Rv_1$ veces el número N_d de dislocaciones por cm^2 . Así la razón
 de colisión por electrón es

$$\frac{1}{\tau_c} = 2N_d R v_1 \quad (\text{II2-23})$$

Suponiendo que el electrón al dispersarse pasa del estado
 con momento P_i al estado con momento P_j con una probabilidad
 W_{ij} , la transición se realiza de tal manera que éstos momen-

tos siempre están sobre el mismo círculo C alrededor del eje de la dislocación (ya que la componente del momento paralelo a la dislocación no cambia en la colisión). Cuando \vec{E}_1 y \vec{E}_2 están sobre el mismo círculo C, entonces W_{1j} para dispersión por dislocaciones es igual a una función del ángulo θ entre las proyecciones de \vec{E}_1 y \vec{E}_2 en el plano normal a la dislocación y se aprecia en la figura esquemática de abajo.

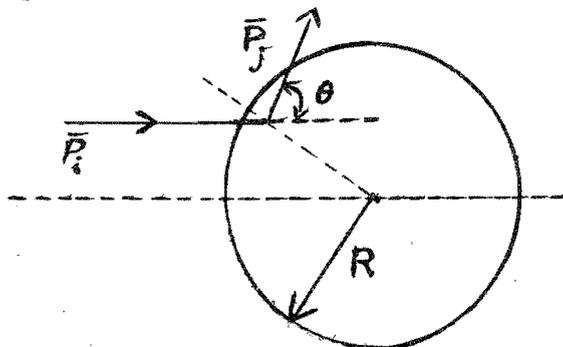


Fig 5

Por lo tanto el tiempo libre medio para la dispersión por dislocación de un electrón será ¹⁹

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{v} \int_C (1 - \cos \theta) W dC = 2RNv \int_C (1 - \cos \theta) W(\theta) dC \quad (\text{II2-24})$$

en donde utilizamos las expresiones (II2-14) y (II2-16). Finalmente hemos encontrado una expresión para el tiempo libre medio, en el cual apreciamos la necesidad de hallar una expresión adecuada para la probabilidad de dispersión; tarea a que nos avozaremos en el siguiente capítulo, en donde encontraremos en base a la Mecánica Cuántica, la amplitud de dispersión $A(\theta)$, ya que el módulo al cuadrado de ésta cantidad nos determinará la probabilidad de que la partícula incidente (el electrón) emerja en una cierta dirección en la colisión con la dislocación.

Para encontrar la relación de $1/\tau$ con $|A(\theta)|^2$ haremos las siguientes consideraciones; Ya que $W(\theta)$ es la probabilidad por unidad de momento, si $u(r, \theta)$ es la función de onda del electrón dispersado, ésta será

$$W(\theta) = \frac{|u(r, \theta)|^2}{P}$$

y como la integración en (II2-24) se realiza en el espacio de momentos; $dC = P d\theta$.

En función de la amplitud de probabilidad, a una distancia de $2R$ entre dos centros dispersores, la probabilidad en una región subtendida por el ángulo $d\theta$ es:

$$|u(r, \theta)|^2 = \frac{|A(\theta)|^2}{2R}$$

Por lo tanto, sustituyendo $W(\theta)$ y dC en II2-24 se tiene: ²⁰

$$\frac{1}{\tau} = N_d v \int (1 - \cos \theta) |A(\theta)|^2 d\theta \quad (\text{II2-25})$$

Que es la expresión que nos será de utilidad.

I I I

DISPERSION DE ELECTRONES POR DISLOCACIONES CARGADAS

III.1.-EL PROBLEMA DE LA DISPERSION.- El electrón al incidir sobre la dislocación se dispersará de acuerdo a el potencial Φ alrededor de la dislocación, y su energía electrostática $-e\Phi$ crece según se acerca a ésta. Consideremos un electrón que se mueve en línea recta hacia la dislocación; cuando entra a la región de carga espacial experimenta un campo oponiéndose a su movimiento y penetrará al cilindro de carga espacial hasta una distancia donde $-e\Phi$ es igual a su energía cinética inicial $\sim kT$. Si suponemos que el potencial se eleva de una manera abrupta en una cantidad kT/e en una distancia muy pequeña comparada con el radio del cilindro de carga espacial, entonces el electrón que choca con el cilindro en una colisión de frente penetrará una distancia despreciable en comparación con el radio cilíndrico, los electrones que inciden oblicuamente penetrarán distancias aún más cortas. Por lo tanto en un modelo sencillo, podemos reconocer a los electrones efectuando colisiones elásticas con cilindros rígidos.

Así, si suponemos colisión elástica al incidir el electrón sobre la dislocación, se dispersará de acuerdo a la interacción a través del potencial Φ , al cual podemos reconocer como el debido a un cilindro rígido en un modelo sencillo, o el potencial más apropiado obtenido en el Capítulo I, utilizando la ecuación de Poisson.

La energía potencial del electrón en el campo de la dislocación puede denotarse por $U(r)$, donde r es la distancia desde el eje de la dislocación en un plano perpendicular a ésta. Si suponemos $U(r) \rightarrow 0$ cuando $r = \infty$ debemos tomar a la ener

gia del electrón positiva, $E > 0$, ya que estamos interesados en el caso en el cual el electrón de energía E se mueve desde ∞ hacia R_0 (distancia media entre dislocaciones) hacia la dislocación.

La ecuación de Schrödinger para la función de onda $\bar{\Psi}(x, y, z)$ del electrón puede escribirse como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \bar{\Psi} + U(r) \bar{\Psi} = E \bar{\Psi} \quad (\text{III-1})$$

la cual podemos reescribir en la forma

$$\nabla^2 \bar{\Psi} + k^2 \bar{\Psi} = V(r) \bar{\Psi} \quad (\text{III-2})$$

dónde $\frac{2m}{\hbar^2} U(r) = V(r)$; $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

en virtud de la simetría cilíndrica del problema utilizamos un sistema de coordenadas cilíndricas (z, r, θ) con z paralela al eje de la dislocación. Ya que el potencial es función de r únicamente, podemos separar las variables de tal manera que

$$\bar{\Psi} = \psi(r, \theta) \varphi(z) \quad (\text{III-3})$$

y utilizando la expresión del laplaciano en coordenadas polares:

$$\nabla_p^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}; \quad k_p^2 = k_r^2 + k_\theta^2 \quad (\text{III-4})$$

expresamos (III-2) como

$$\nabla_p^2 \psi + k_p^2 \psi = V(r) \psi \quad (\text{III-5})$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + k_p^2 \psi = 0 \quad (\text{III-6})$$

Por lo tanto nos interesará resolver (III-5), la cual nos determina el problema en un plano, ya que únicamente la componente del momento del electrón perpendicular a la dislocación, interaccionará con ella, mientras que la componente -

paralela a la misma se deslizará a lo largo del eje sin interaccionar, manteniéndose por lo tanto invariable. En el caso en que tengamos a varios electrones incidiendo sobre la dislocación, vemos que la corriente paralela a la dislocación es despreciable, ya que como no existe dirección privilegiada a lo largo del eje de la dislocación, habrá en promedio un número igual de electrones moviéndose en direcciones opuestas; por lo tanto nos interesará únicamente el caso de la corriente eléctrica perpendicular a la dislocación.

Las diversas soluciones de la ecuación (IIII-5) que corresponden a una energía E son altamente degeneradas y muy diferentes en forma. Sin embargo, únicamente son soluciones aceptables aquellas que corresponden al problema físico particular. O sea, a grandes distancias de la dislocación la solución debe tomar la forma de una onda plana representando el haz de electrones incidentes y una onda divergente representando el haz de electrones dispersados.

La función de onda $\psi(r, \theta)$ puede escribirse en la forma:

$$\psi(r, \theta) = \psi_0(r, \theta) + u(r, \theta) \quad (\text{IIII-7})$$

dónde ψ_0 representa a los electrones incidentes y u a los dispersados. La función u que representa el estado de los electrones dispersados, debe tomar la forma de una onda cilíndrica divergente a grandes distancias del eje de la dislocación, o sea

$$u(r, \theta) = A(\theta) \frac{e^{iKr}}{\sqrt{r}} \quad (\text{IIII-8})$$

dónde $A(\theta)$ es la amplitud de la onda dispersada .

Por lo tanto tenemos que resolver la ecuación de Schrödinger con la condición en la frontera de que la función de onda debe tener la forma (IIII-7).

III.2.- SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRODINGER.- Para hallar $A(\theta)$ utilizamos la aproximación de Born, puesto que los electrones tienen energías tales que ocurre que $kR \gg 1$, y se espera válido el criterio de validez $|U(r, \theta)|^2 \ll 1$ (21). Por lo tanto planteamos la ecuación de Schrödinger para la dispersión en una dislocación cargada.

$$(\nabla_p^2 + k_p^2) \psi = \frac{2me}{\hbar^2} \phi \psi \quad (\text{III2-1})$$

obtenida de (III1-5). La solución debe satisfacer la forma (III1-7), por lo tanto debemos hallar la función perturbada por la dispersión, $U(r, \theta)$. Para tal efecto escribiremos la ecuación (III2-1) en la forma

$$(\nabla_p^2 + k_p^2) \psi = V \psi \quad (\text{III2-2})$$

la cual debemos resolver sujeta a la condición a la frontera (III1-7). Obtendremos ahora una ecuación integral para $\psi(r, \theta)$, la cual incorpora tal condición a la frontera, introduciendo la función de Green $G(r, r', \theta, \theta')$ definida como la solución de una onda puramente saliente de la ecuación inhomogénea

$$(\nabla_p^2 + k_p^2) G(r, r') = -\delta(r - r') \quad (\text{III2-3})$$

con $G(r, r') = G(r, r', \theta, \theta')$

Aquí $\delta(r - r')$, es la función delta de Dirac en dos dimensiones. La función de Green es por lo tanto la función de onda en el punto (r, θ) generada por un punto fuente (r', θ') .

Observamos que cualquier función ψ que satisface la ecuación integral :

$$\psi = \psi_0 + \int G(r, r', \theta, \theta') V(r') \psi(r', \theta') d\tau \quad (\text{III2-4})$$

es una solución de la ecuación de Schrödinger (III2-2) y que

Esta solución satisface automáticamente las condiciones en la frontera (III1-7), que la expresión (III1-7) se satisface se debe a que G contiene únicamente ondas salientes en (r, θ) generadas por un punto fuente (r', θ') ; mientras que la integral a la derecha de la ecuación (III2-4) es simplemente una superposición de tales ondas salientes, y por lo tanto toma la forma requerida para r suficientemente grande. Por lo tanto tendremos para $V(r, \theta)$ la expresión.

$$u(r, \theta) = \int G(r, r', \theta, \theta') V(r') \psi(r', \theta') dr' \quad (\text{III2-5})$$

De tal manera que el siguiente paso es construir la propia G.

Las condiciones en la frontera que debe cumplir G son necesarias para encontrarla. Sabemos que debe ser finita y en particular se debe comportar como una onda plana tal como ψ , a muy grandes distancias del origen. Pero aún más importante es investigar el comportamiento de G para el punto de observación cerca del punto fuente, donde $|r' - r| = R$ es pequeña. De la naturaleza de la ecuación (III2-3) vemos que, cuando

$$\|r' - r\| = R = \sqrt{(x' - x)^2 + (y' - y)^2} \quad (\text{III2-6})$$

es pequeña, o sea que ocurra que $|r'| = r \pm \epsilon$, $\epsilon \ll 1$ la función G es justamente una función de R. En otras palabras la fuente es completamente simétrica, tal que G no puede depender de la dirección de R, únicamente de su magnitud. Notamos también que G tendrá una singularidad en $R = 0$. Por lo tanto debe existir una $g(R)$ tal que

$$G(r', r) \xrightarrow{R \rightarrow 0} g(R) \quad R = r' - r \quad (\text{III2-7})$$

Para encontrar el comportamiento de g para R pequeña, integra

mos ambos lados de (III2-3) sobre un pequeño círculo de radio ϵ respecto a r' (la integración es en el espacio del observador). Esto nos da

$$\iint \nabla^2 G(\vec{r}'; \vec{r}) da + k^2 \iint G(r', r) da = -1 \quad (\text{III2-8})$$

la integral en el lado derecho es igual a -1 por las propiedades de la función delta y porque el círculo sobre el cual se integra incluye el punto $r = r'$.

Hacemos ahora a ϵ bastante pequeño, tal que (III2-8) vale y sustituimos g por G en las restantes integrales. Más aun, presumimos que el laplaciano de una singularidad es más "singular" que la singularidad en sí misma, tal que, en el límite, la primera integral predomina. Por lo tanto obtenemos

$$\iint \nabla^2 g(R) da \rightarrow -1 \quad \epsilon \rightarrow 0 \quad (\text{III2-9})$$

dónde las coordenadas para integración sobre el área circular son θ y R , y $da = 2\pi R dR$.

Para evaluar la integral pasamos al espacio tridimensional, calculándola para un cilindro con caras paralelas a nuestra superficie y con una longitud $2L$. Así, planteando la integral y utilizando el teorema de la divergencia, se tiene:

$$\int_V \nabla^2 g(R) 2\pi R dR dz = \int_S \nabla g \cdot \hat{n} [R d\theta dz] \quad dC = R d\theta$$

dónde \hat{n} está en la dirección radial. Así, obtenemos

$$2L \int_S \nabla^2 g(R) 2\pi R dR = 2L \int_S \nabla g \cdot \hat{n} [R d\theta]$$

$$\therefore \int_S \nabla^2 g(R) da = \int_C (\nabla g(R)) R d\theta$$

Ya que g depende únicamente de R , la coordenada radial del pequeño círculo, y $g(R)$ es en todas partes paralelo a \hat{n} . Teniendo finalmente

$$\int_C \nabla g(R) R d\theta \rightarrow -1 \quad R \rightarrow \epsilon \rightarrow 0 \quad (\text{III2-10})$$

Debido a que la magnitud de g es la misma en todos los pun

tos sobre la circunferencia, la integral de línea es igual en el límite, a dg/dR en $R = \epsilon$, veces $2\pi\epsilon$, que es el valor de la circunferencia, así, llegamos a la fórmula

$$\frac{dg}{dR} 2\pi R \rightarrow -1 \quad (III2-11)$$

$$R \rightarrow \epsilon \rightarrow 0$$

o lo que es lo mismo

$$\frac{dg}{dR} \rightarrow -\frac{1}{2\pi R} \quad R \rightarrow 0$$

obteniendo finalmente

$$g \rightarrow -\frac{1}{2\pi} \ln R \quad R \rightarrow 0 \quad (III2-12)$$

$$G(\bar{r}', \bar{r}) \rightarrow -\frac{1}{2\pi} \ln R$$

Así podemos decir que la función de Green es una solución regular y continua de la ecuación homogénea $\nabla_p^2 G + k_p^2 G = 0$, excepto en el punto $r = r'$, dónde tiene una singularidad como se especifica en la ecuación (III2-12). Esta singularidad es una consecuencia de la presencia del punto fuente unitario, - siendo la ecuación (III2-3) inhomogénea únicamente en éste punto. Las soluciones que necesitamos deben comportarse como una onda plana, tal como ψ , a muy grandes distancias del origen como ya se apuntó, y tener la singularidad del tipo (III2-12). Las funciones que cumplen tales requerimientos son las funciones de Hankel²³; en particular

$$G(\bar{r}', \bar{r}) = g(R) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(kR) \rightarrow -\frac{1}{2\pi} \ln kR$$

$$R \rightarrow 0$$

$$G \equiv \frac{i}{4} H_0^{(1)}(kR) \rightarrow \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\pi kR}} e^{i(kR + \frac{\pi}{4})}$$

$$R \rightarrow \infty$$

nos proporciona la correcta función de Green para ondas salientes.

III.3 LA AMPLITUD DE DISPERSION.- Habiendo obtenido para $G(r, r', \theta, \theta')$ la expresión

$$G(r, r', \theta, \theta') = i\pi H_0^{(1)}(k|\underline{r}' - \underline{r}|) \quad (\text{III3-1})$$

estamos listos para calcular $A(\theta)$, y para tal efecto necesitamos considerar únicamente el caso de r grande, o sea $r \gg r'$. Entonces desarrollando asintóticamente $H_0^{(1)}$, se tiene⁽²²⁾

$$H_0^{(1)}[k|\underline{r}' - \underline{r}|] = \sqrt{\frac{2}{\pi k|\underline{r}' - \underline{r}|}} e^{i[k|\underline{r}' - \underline{r}| - \frac{\pi}{4}]} \quad (\text{III3-2})$$

Entonces llevando a cabo la aproximación de Born, aproximamos

ψ a primer orden, o sea $\psi = e^{ik\hat{n}_0 \cdot \underline{r}}$ la cual sustituimos en (III2-5) junto con la expresión (III3-1) para G , obteniéndose²⁰

$$u(\underline{r}, \theta) = \frac{me}{\sqrt{2\pi}\hbar^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^R \frac{e^{i[k|\underline{r}' - \underline{r}| + \frac{\pi}{4}]} \phi(\underline{r}') e^{ik\hat{n}_0 \cdot \underline{r}'} r' dr' d\theta'}{\sqrt{k|\underline{r}' - \underline{r}|}} \quad (\text{III3-3})$$

dónde \hat{n}_0 es la dirección inicial de propagación de la onda del electrón. Ya que estamos considerando r grandes podemos desarrollar $e^{ik|\underline{r}' - \underline{r}|}/(|\underline{r}' - \underline{r}|)^{1/2}$, con el resultado

$$\frac{e^{ik|\underline{r}' - \underline{r}|}}{\sqrt{|\underline{r}' - \underline{r}|}} = \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} e^{-ik\hat{n}_0 \cdot \underline{r}'} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \quad (\text{III3-4})$$

dónde hemos desarrollado $|\underline{r}' - \underline{r}|$ en serie de Taylor de acuerdo a

$$h(|\underline{r}' - \underline{r}|) = h(r) - \underline{r}' \cdot \nabla h(r) + \dots$$

sustituyendo estos resultados en (III3-3) obtenemos

$$u(\underline{r}, \theta) = \frac{me}{\sqrt{2\pi}\hbar^2} \int_{-\pi}^{\pi} \phi(\underline{r}') e^{ik(\hat{n}_0 \cdot \hat{n})r'} \frac{e^{ikr}}{\sqrt{kr}} e^{-i\frac{\pi}{4}} r' dt' d\theta' \quad (\text{III3-5})$$

De acuerdo a la figura de abajo, $k = |\hat{n}_0 - \hat{n}|$ la podremos poner como $K = k|\hat{m}_0 - \hat{m}| = 2k \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}$

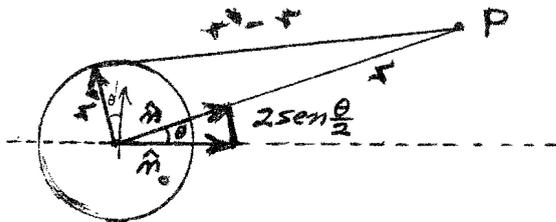


Fig. 6

por lo tanto tendremos

$$u(r, \theta) = \frac{mQ e^{iKr + i\frac{\pi}{4}}}{h^2 \sqrt{2\pi k r}} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^R \phi(r') e^{iK r' \cos \theta'} r' dr' d\theta' \quad \text{III3-6}$$

$Q = e$, carga del electrón.

Finalmente integrando respecto a θ' , obtenemos:

$$u(r, \theta) = \frac{e^{iKr + i\frac{\pi}{4}} mQ \sqrt{2\pi}}{h^2 \sqrt{kr}} \int_0^R \phi(r') r' J_0 [2kr' \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}] dr' \quad \text{III3-7}$$

dónde J_0 es la función Bessel de orden cero dada por la expresión

$$J_0 [2kr' \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}] = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{iKr' \cos \theta'} d\theta' \quad \text{III3-8}$$

Ya que $u(r, \theta)$ y $A(\theta)$ están relacionadas por la expresión

$$u(r, \theta) = A(\theta) \frac{e^{iKr}}{\sqrt{r}} ; \quad r \gg R \quad \text{III3-9}$$

tendremos que la amplitud de dispersión estará determinada por la magnitud ²⁰

$$A(\theta) = \frac{mQ e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{2\pi}}{h^2 \sqrt{k}} \int_0^R \phi(r) r J_0 [kr] dr \quad \text{III3-10}$$

que es la cantidad buscada. $K = 2k \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}$.

Estudieemos finalmente los límites de aplicabilidad de la aproximación de Born. Esta aproximación la realizamos al sustituir $\psi = \psi_0(r, \theta)$, por otro lado en general $\psi = \psi_0 + \psi_1$ según quedo establecido en (III1-7). Evidentemente esta sustitución de la función de onda en la integral (III2-5), únicamente es posible si en la región dispersada, donde $V(r)$ es grande, vale la siguiente desigualdad $|\psi_0| \gg |\psi_1|$ o:

$$|\psi_0(r, \theta)| \gg \left| \int G(r, r'; \theta, \theta') V(r') \psi_0(r'; \theta') d\tau' \right| \quad (\text{III3-11})$$

O de manera equivalente, ya que $|\psi_0(r, \theta)|^2 = 1$.

$$\left| \int G(r, r'; \theta, \theta') V(r') \psi_0(r'; \theta') d\tau' \right|^2 \ll 1 \quad (\text{III3.12})$$

calculado en r donde $V(r)$ es mayor,

Teniendo así el criterio de la validez de tal aproximación.

I V

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

IV.1.-POTENCIAL EN LA DISLOCACION PARA EL NaCl.-Para proceder a calcular el tiempo de relajación, necesitamos el potencial en la dislocación de manera explícita, o sea con todas las constantes involucradas determinadas explícitamente. Esto lo llevaremos a cabo para el NaCl, que es el cristal típico del tipo que hemos venido discutiendo.

Como sabemos el potencial está relacionado con z en la forma

$$z(r) = \frac{e\phi(r)}{kT} - \frac{e\phi(R)}{kT} = \frac{e}{kT} [\phi(r) - \phi(R)] \quad (IV-1)$$

y conocida z conocemos el potencial. Así, según lo discutido en (I.6) la forma de z_1 está dada por (I6-4)

$$z_1(r) = -\frac{e\phi(r)}{kT} + b \ln \frac{r}{a} + \frac{\pi N e^2}{\epsilon kT} (r^2 - a^2)$$

En esta ecuación se puede conocer de las constantes de la red⁽⁻⁾ y tiene el valor 8×10^{-8} cm., la distancia media entre dislocaciones R la tomamos del orden de 10^{-6} cm, el número de iones positivos por unidad de volumen N es igual a $2.25 \times 10^{32}/\text{cm}^3$ y $\epsilon = 5.62$. Las demás constantes son universales y la temperatura T es la ambiente de 300° K. La constante b está establecida en (I6-15) y suponiendo la carga máxima de 1×10^{-2} esu/cm, encontramos el valor: $b = 921.1686$. Por lo tanto tendremos para z_1 la expresión:

$$z_1(r) = -13.991 + 921.1686 \ln \frac{r}{a} + 448.2(r^2 - a^2) \quad (IV-2)$$

Inmediatamente después es necesario evaluar r_{12} , el punto frontera entre z_1 y z_2 , utilizando la relación (I6-12) y la (I6-13), entonces la ecuación para r_{12} se establece en la forma

$$-\frac{1}{kT} z_1(r_{12}) = \alpha^+(r_{12}) \quad (IV-3)$$

*Sección (I.6)

IV.1

**cte. dieléctica estática

Para el NaCl las cantidades necesarias en ésta ecuación serán

$z_{nn} = 12$; Número de vecinos cercanos de un ión dado.

$F^+ = 0.80 \text{ eV} - 3.kT$. (15); energía libre de formación de las vacancias catiónicas.

La constante B_+ tiene un espectro reducido de valores para los cuales (IV1-3) tiene solución, por lo tanto se escogió:

$B_+ = 0.349 \text{ eV}$; energía de amarre libre del complejo impureza-vacancia.

\bar{C} es del orden de 10^{-6} ; razón de iones de impureza a cationes normales.

Por lo tanto si utilizamos los valores anteriores en (IV1-3) se obtiene para r_{12} el valor de 8.048 \AA . En seguida conocido r_{12} obtenemos para $-\alpha^+/kT$ el valor de -0.199 eV con el cual podemos a la vez conocer $e\phi^{(0)}/kT$ con el valor de 14.015 .

Así, podemos plantear las ecuaciones simultáneas (I6-9), de dónde obtenemos b_1' y b_2' , con el resultado

$$b_1' = 30.491 \text{ y } b_2' = 0.0276.$$

Por lo tanto la siguiente expresión para el potencial, según (I6-18) es:

$$Z_2'(r) = 30.491 \ln \frac{r}{z} + 0.0276 \quad (\text{IV1-4})$$

Para encontrar el punto frontera r_{22}' entre z_2 y z_2' , buscamos el tamaño mínimo de la región semisaturada, encontrando el valor: $r_{22}' = 8.504 \text{ \AA}$, con lo cual obtenemos las ecuaciones simultáneas para H y s_0 .

$$Z_2'(r_{22}') = Z_2(r_{22}') \quad ; \quad \frac{dZ_2'}{dr} \Big|_{r_{22}'} = \frac{dZ_2}{dr} \Big|_{r_{22}'} \quad (\text{IV-5})$$

dando como resultado: $H = 8.07791$ y $s_0 = 0.05919956$, y sabiendo que la constante K está determinada por (I4-4), podemos determinar su valor que se encuentra igual a $7.4833 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$.

Por lo tanto, sabiendo que $s = Kr$ tendremos para z_2 la expresión

$$Z_2(s) = 2 \ln \frac{s \operatorname{sech} \left[1.421 \left(\ln \frac{s}{0.05919} + 2.82621 \right) \right]}{8.07791} \quad (\text{IV1-6})$$

En seguida utilizamos la relación $-z_2(r_{23}') = 1.5$, para hallar el punto frontera r_{23}' entre z_2 y z_3' , encontrando que tiene el valor de 20 Å.

Finalmente, usando las ecuaciones (I6-21), (I6-22) y (I6-23) y con el método autoconsistente descrito en la sección (I.6, tendremos: $r_{33}' = 25.3898$ Å, $D = 818.2259$, $B = -312.28$ y $C = 30.27914$, con lo cual z_3' será

$$-Z_3'(s) = 818.2259 s^2 - 312.28 s + 30.27914 \quad (\text{IV1-7})$$

y utilizando la condición en la frontera $z_3'(r_{33}') = z_3(r_{33}')$ encontramos la constante A de z_3 , con el resultado: $A = 0.26856024$ así, z_3 es

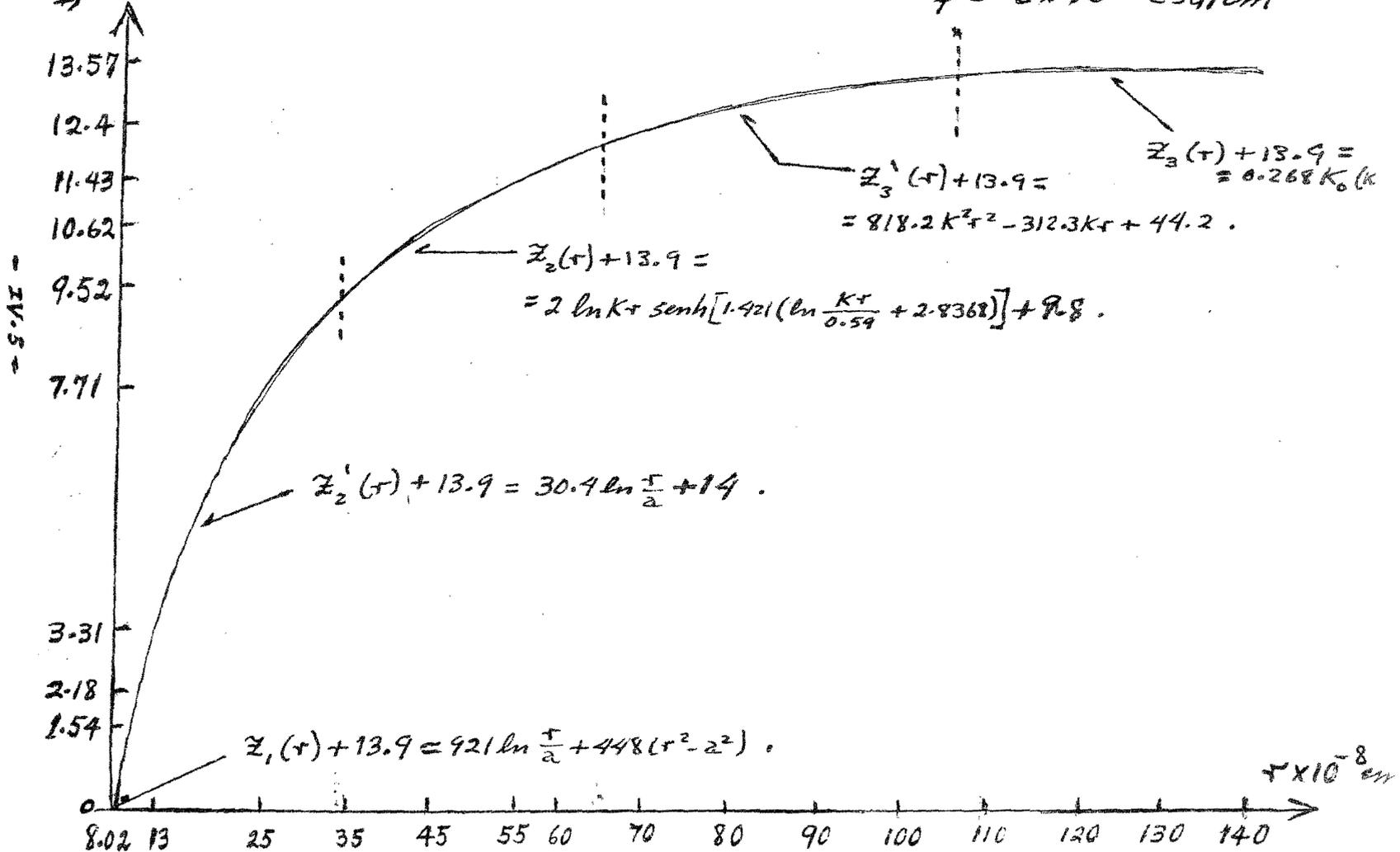
$$Z_3(s) = -0.26856024 K_0(s) \quad (\text{IV1-8})$$

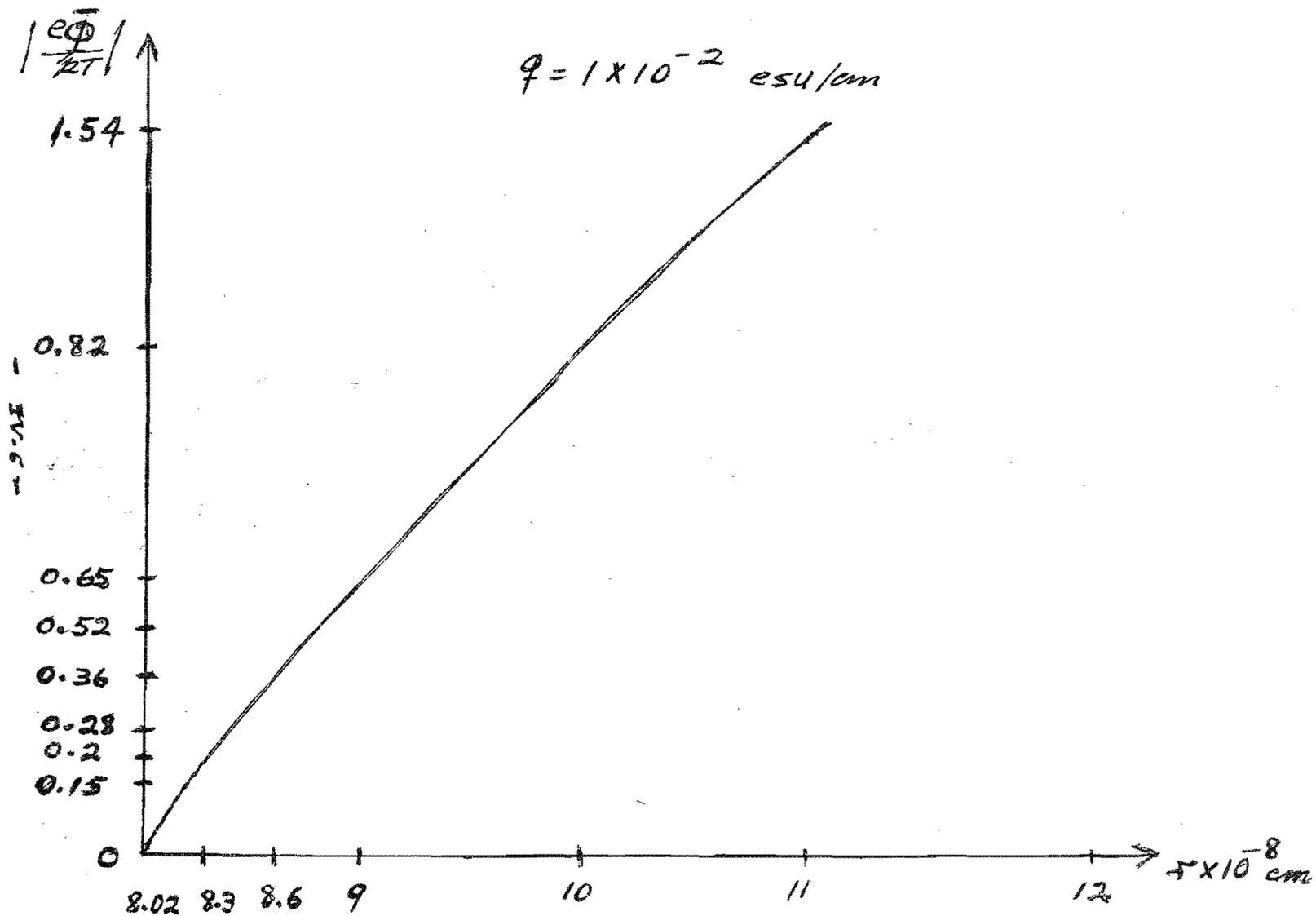
En seguida se detallan los valores encontrados en una tabla, junto con los valores hallados para otra carga q arbitraria con magnitud de 6×10^{-3} esu/cm., y se grafican las funciones Z.

q	6×10^{-3} esu/cm	TABLA IV-1 1×10^{-2} esu/cm
B	.351 eV	0.349 eV
$-\alpha^*/kT$	0.157	0.199 eV
$e^{q/kT}$	13.991	14.015
b	921.168	937.68
K	7.485×10^5 cm ⁻¹	7.4833×10^5 cm ⁻¹
H	1.237273	8.07791
s_0	0.11686	0.05919956
D	11.094636	818.2259
B	-18.54993	-312.28

C	8.2631	30.27914
A	0.926362	0.26856024
r_{12}	8.08 A	8.048 A
r_{22}'	24 A	8.504 A
r_{23}'	66.8 A	20 A
r_{33}'	106.88 A	25.3898 A
b_1'	6.751	30.491
b_2'	0.08983	0.0276

$10^5 \frac{\Phi}{KT}$





IV.2.- CALCULO NUMERICO DEL TIEMPO LIBRE MEDIO.- Los electrones en el cristal están sujetos a la Estadística de Fermi-Dirac

$$f = \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)/kT}} \quad (\text{IV2-1})$$

ya que tienen espín semientero y son fermiones, sin embargo a la temperatura ambiente ($T = 300^\circ \text{K}$) los electrones en la banda de conducción de un cristal iónico, cumplen la suposición

$$(E-\mu) \gg kT \quad (\text{IV2-2})$$

dónde E es la energía y μ el potencial químico. Así la función de Distribución de Fermi-Dirac se reduce a

$$f \approx e^{-(\mu-E)/kT} \quad (\text{IV2-3})$$

Sin embargo la función de distribución aproximada es simplemente la función de Distribución de Maxwell-Boltzman. Si la condición (IV2-2) vale, entonces, la distribución de Fermi-Dirac y la distribución de Maxwell-Boltzman son prácticamente las mismas para los electrones en el cristal iónico, y serán válidas las consideraciones relacionadas con un gas clásico.

Así, por lo expuesto anteriormente supondremos que los electrones en el cristal, tienen una energía media del orden de

$$E = \frac{3}{2} kT \quad (\text{IV2-4})$$

y su velocidad estará relacionada con la velocidad promedio en la distribución maxwelliana:

$$v = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (\text{IV2-5})$$

Tenemos que en la ecuación para la amplitud de probabilidad, la constante $a(k)$ que multiplica a la integral en (III3-10)

está dada como

$$a(k) = \frac{e^{i(kr + \frac{\pi}{4})} e m \sqrt{2\pi}}{\hbar^2 \sqrt{k}} \quad (\text{IV2-6})$$

y ya que $|a(k)|^2$ será

$$|a(k)|^2 = \frac{m^2 e^2 2\pi}{\hbar^2 k} \quad (\text{IV2-7})$$

la constante multiplicativa para la integral del inverso del tiempo de relajamiento (II2-24) es

$$N_d v |A(\theta)|^2 = \frac{N_d v m^2 e^2 2\pi}{\hbar^2 k} = \bar{t}(N_d) \quad (\text{IV2-8})$$

sabiendo que $k = (2mE)^{1/2}/\hbar = (3mkT)^{1/2}/\hbar$ y con la ayuda de (IV2-4) y (IV2-5), $\bar{t}(N_d)$ estará dada por la expresión siguiente:

$$\bar{t}(N_d) = 5.79 \frac{N_d m e^2}{\hbar^3} \quad (\text{IV2-9})$$

Una vez que se tienen todas las expresiones necesarias para la obtención del tiempo de relajamiento, se puede proceder a resolver las integrales involucradas.

Primeramente hay que realizar la integración

$$\int_0^R \phi(r) r J_0 [2kr \sin \frac{\theta}{2}] dr \quad (\text{IV2-10})$$

para así obtener $A(\theta)$. Para resolverla es necesario llevar a cabo la integración en forma numérica, con lo cual podemos obtener $|A(\theta)|^2$. Una vez obtenida la amplitud de probabilidad, el inverso del tiempo de relajamiento será determinado por la integral

$$\int_0^{2\pi} (1 - \cos \theta) |A(\theta)|^2 d\theta \quad (\text{IV2-11})$$

la cual se trabaja necesariamente en forma numérica.

Así, se diseña un programa para computadora, en el cual se utiliza el método de Gauss, y se lleva a cabo la operación

total;

$$\frac{1}{\tau} = \tau^{-1}(N_d) \int_0^{\pi} (1 - \cos \theta) \left| \int_0^R \phi'(r) r J_0(2kr \sin \frac{\theta}{2}) dr \right|^2 d\theta$$

en donde se utilizó el potencial $\phi'(r) = \phi(r) + \phi(R)$, que es igualmente válido para la dislocación, y es el adecuado para las condiciones en la frontera del electrón, que requieren que su energía potencial sea nula en el infinito y máxima en la dislocación, (ahora ϕ está medido en relación al potencial en (∞) *)

n El cálculo se realizó para las dos cargas en la dislocación que consideramos antes, asociando para cada una el potencial correspondiente, y variando la densidad de dislocaciones en dos valores: densidades relativamente normales del orden de $10^6/\text{cm}^2$ y densidades muy altas para cristales muy dañados del orden de $10^{12}/\text{cm}^2$. Para realizar el cálculo se toma en cuenta que la densidad de dislocaciones y la distancia media entre ellas están relacionadas por la expresión

$$N_d = \frac{1}{\sqrt{R^2}} \quad (\text{IV2-12})$$

Los resultados encontrados para $q = 6 \times 10^{-3}$ esu/cm son los siguientes:

R	$N_d \text{ cm}^{-2}$	$1/\tau \text{ seg}^{-1}$	$\tau \text{ seg}$
	1×10^6	1.7×10^6	5.8×10^{-7}
	1×10^{12}	1.7×10^{12}	5.8×10^{-13}

Para la carga mayor de 0.01 esu/cm., se encuentran valores de $1/\tau$ casi idénticos a los anteriormente dados, por lo cuál se concluye que no hay variación sensible del tiempo de relajamiento con la carga, al menos para cargas mayores que 6×10^{-3} esu/cm..

* El potencial para cualquier punto $r \geq R$, respecto a ϕ en ∞ es cero, y para $r \leq a$ es $-\phi(R)$.

IV-3.- COMPARACION CON EL TIEMPO DE RELAJAMIENTO DEBIDO A LAS VIBRACIONES DE RED.- A la temperatura ambiente, los electrones de conducción en el cristal iónico, serán afectados fuertemente por procesos dispersivos al chocar en su movimiento con defectos en el cristal, el efecto más notable que se conoce como un hecho establecido es el debido a la dispersión por vibraciones de la red. Por lo tanto resulta conveniente comparar el tiempo de relajación para dispersión con dislocaciones cargadas, con el tiempo de relajación para dispersión con las vibraciones de la red.

Ya que existen dos tipos de vibraciones de red; las vibraciones de modo óptico y las vibraciones de modo acústico, vamos a dar las expresiones tomadas de la literatura, que determinan los tiempos de relajamiento de cada una de ellas.

De acuerdo a la teoría de dispersión por vibraciones del modo óptico, el tiempo de relajamiento está determinado por la expresión de en seguida, para éste tipo de vibraciones ⁽²⁵⁾

$$\tau_0 = C(e^{g/T} - 1) \quad (\text{IV5-1})$$

dónde C es una constante independiente de la temperatura.

Una discusión completa de la dispersión por vibraciones acústicas en un cristal iónico no se ha efectuado. Sin embargo para un cristal cúbico del tipo del NaCl es razonable adoptar la teoría usual del potencial de deformación ⁽²⁷⁾, de acuerdo a la cual el tiempo libre medio es de la forma

$$\tau_a = \left[\frac{\pi \hbar^4 C_{11}}{\sqrt{2} m^{3/2} E_1^2} \right] \frac{(E/kT)^{-1/2}}{(kT)^{3/2}} \quad (\text{IV5-2})$$

donde C_{11} constante elástica y E_1 potencial de def. para las vibraciones del modo acústico.

Para evaluar τ_0 en el NaCl, tomamos el valor aproximado de C como ²⁴ $C = 0.63 \times 10^{-7}$ y la temperatura de Debye $\theta_D = 281^\circ\text{K}$, con los cuales encontramos

$$\tau_0 = 9.8 \times 10^{-8} \approx 10^{-7} \text{ seg} \quad (\text{IV3-3})$$

Para evaluar τ_2 tomamos el valor de la constante elástica para el NaCl; $C_{11} = 0.487 \times 10^{11}$ dinas/cm² y el valor aproximado del potencial de deformación, $E_1 \approx 2$ eV, obtenido de los datos para el KBr ²⁵, ya que no se encontró el correspondiente para el NaCl, el resultado es

$$\tau_2 = 4.5 \times 10^{-13} \text{ seg} \quad (\text{IV3-4})$$

Por lo tanto, entre los dos procesos el que domina es el de la dispersión por vibraciones del modo acústico.

Ahora compararemos éste efecto relevante con el efecto debido a las dislocaciones cargadas. Observamos que para densidades de dislocaciones del orden de $10^{12}/\text{cm}^2$, dónde se aprecia el efecto mayor, el tiempo de relajamiento debido a ellas es del orden de 5.8×10^{-13} seg., por lo tanto tendremos que $\tau_2 / \tau = 0.8$. Así, vemos que el tiempo de relajamiento para vibraciones de red es del mismo orden que el debido a las dislocaciones y la movilidad por el efecto de las dislocaciones, es también parecida, dando por resultado que serán similares los efectos. A bajas temperaturas el efecto de las dislocaciones, en cristales con altas densidades, se espera dominante. A densidades relativamente normales del orden de $10^6/\text{cm}^2$ el efecto será marcadamente menor y el proceso dominante es el de la dispersión por vibraciones de la red.

El efecto completo lo englobaremos en la probabilidad total

de dispersión

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_0} \quad (\text{IV3-5})$$

y podremos apreciar una vez más que los efectos a Temperatura ambiente, serán similares para la dispersión por vibraciones de red y dispersión por dislocaciones en densidades altas de ellas, ya que la probabilidad de dispersión para ambas es del mismo orden.

Para investigar la validez del cálculo del tiempo de relajamiento*¹ con el método de Born, se llevó a cabo la operación indicada en (III3-12), realizada en el punto $r = a$, que es dónde $\phi'(r)$ es mayor. Así, se llevó a cabo la siguiente operación con la ayuda de la computadora:

$$|u(a, \theta)|^2 = \left| \frac{me\pi}{h^2} \int_a^R H_0^{(1)}(k/r-2i) J_0(kr) \phi'(r) r dr \right|^2 \quad (\text{IV3-6})$$

con el resultado: $|u(a, \theta)|^2 = 0.2859 \ll 1$

Por lo tanto, se cumple la condición para la validez del método de Born, la cuál es suficiente aunque no necesaria.

$$\begin{array}{r} 54 \\ 10 \\ \hline 44 \\ 27 \\ \hline 17 \end{array} \quad \begin{array}{r} 17 \\ 16 \\ \hline 10 \end{array} \quad \begin{array}{r} 10^{-16} \\ 3+1 \\ \hline 19 * .19 \\ 178 \\ \hline .268 \end{array}$$

*¹ de las dislocaciones

IV.4 CONCLUSIONES

IV.4.- En el presente no se conoce el potencial en la dislocación, ya sea en forma analítica o numérica^{3,4}, sin la suposición de conocer la carga en la dislocación a una temperatura determinada. La limitación de suponer una cierta carga es importante, pues si bien es posible concebir que físicamente ésta carga puede existir, no hay ninguna evidencia que nos asegure que existe en forma estable y a la temperatura supuesta. Sin embargo, repetimos, es físicamente concebible su existencia, y bajo el régimen de saturación de impurezas en la dislocación, hemos encontrado el potencial a la temperatura ambiente, suponiendo cargas de 0.01 y 0.006 esu/cm. Una observación pertinente en relación con los potenciales para éstas cargas es la del hecho de que prácticamente no varían entre sí, lo cual nos indica que para las cargas supuestas, su valor no es crítico para la forma del potencial existente. En este punto conviene mencionar que el problema de medir la carga, es un problema abierto para la investigación experimental.

En lo que respecta al movimiento de los electrones, se encontró que el efecto de las dislocaciones sobre éste, es del mismo orden que el debido a las vibraciones de la red del modo acústico, para cristales muy dañados, (densidad de dislocaciones de $10^{12}/\text{cm}^2$). Sin embargo la exactitud del efecto no es concluyente, pues está en la naturaleza de los cálculos, el ser aproximados, ya que para τ_2 no se conoce exactamente el valor del potencial de deformación para el NaCl que aparece en la expresión (IV3-2), pues no es sino hasta muy recientemente que se han venido realizando cálculos confiables de bandas de energía en halogenuros alcalinos. Kawamura²⁶ hizo un cálculo

$\tau = 3.4 \times 10^{-13}$
Kawamura

con métodos considerados hoy día como burdos y reportó un valor de $E_1 = 5.6$ eV, con el cual obtendríamos un $\tau_a = 1.7 \times 10^{-13}$ seg.. Por lo que toca a la determinación de τ , por la naturaleza del cálculo, en un rango de integración amplio, la computadora hizo las operaciones usando intervalos que no se consideran adecuadamente pequeños, para dar un resultado muy preciso. Sin embargo nos interesaba, los ordenes de magnitud de los efectos, y el resultado que si es concluyente es que éstos ordenes son cercanos entre si y oscilan alrededor de 10^{-13} seg. para el tiempo de relajamiento. Según los resultados encontrados, a densidades bajas de dislocaciones ($1 \times 10^6/cm^2$) el efecto predominante es el de la dispersión por vibraciones de la red, y las dislocaciones prácticamente no influirán sobre el movimiento de los electrones. No es posible comparar con medidas experimentales, los resultados apuntados, pues no se ha medido la conductividad electrónica en cristales deformados de NaCl, y con impurezas catiónicas divalentes.* Este también es un problema abierto a la investigación experimental.

Para terminar conviene mencionar que según la teoría del potencial, la distancia media entre dislocaciones es del orden de $K^{-1} = 10^{-6}$ cm., pues a esa distancia el potencial es prácticamente constante y determina el punto de fuerza cero en el cual el efecto de las dislocaciones contiguas es nulo. Este criterio lo toman en efecto Turkovich y asociado³ y Kliewer y Koehler¹⁵. Sin embargo este valor de $R = K^{-1}$ - -

* Además, es necesario separar el efecto debido al potencial de deformación de la dislocación, y éste no se conoce.

se debe al argumento matemático de que $z_3 \approx 0$ en ese punto, pero no lo es estrictamente. De hecho $z_3 = 0$, ocurre para $r = \infty$, por lo cual el potencial es de largo alcance y el valor adecuado para la distancia media entre dislocaciones es el determinado por el criterio geométrico establecido en (IV2-12) y es el que prevaleció en los cálculos realizados aquí.

APENDICE

Evaluación de la integral $\int \nabla^2 \phi \delta \phi r dr$.

Tenemos:

$$\underline{I} = \int_0^R \nabla^2 \phi \delta \phi r dr = \int_0^R \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{d\phi}{dr} \right] \delta \phi r dr$$

$$= \int_0^R \delta \phi d \left[r \frac{d\phi}{dr} \right]$$

Integrando por partes,
se tiene:

$$u' = \delta \phi \quad dv' = d \left[r \frac{d\phi}{dr} \right]$$

$$du' = \frac{d\delta \phi}{dr} dr \quad v' = r \frac{d\phi}{dr}$$

Así, obtenemos:

$$\underline{I} = \delta \phi r \frac{d\phi}{dr} \Big|_0^R - \int_0^R \frac{d\delta \phi}{dr} \frac{d\phi}{dr} r dr =$$

$$= - \int_0^R \frac{d\delta \phi}{dr} \frac{d\phi}{dr} r dr \quad \frac{d\phi}{dr} \Big|_R = 0$$

Otra vez por partes:

$$u = r \frac{d\delta \phi}{dr} = r \delta \frac{d\phi}{dr} \quad dv = d\phi$$

$$du = \frac{d}{dr} \left[r \delta \frac{d\phi}{dr} \right] \quad v = \phi$$

$$\underline{I} = - r \phi \delta \frac{d\phi}{dr} \Big|_0^R + \int_0^R \phi \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \delta \frac{d\phi}{dr} \right] r dr$$

$$= \int_0^R \phi \nabla^2 \delta \phi r dr = \int_0^R \phi \delta \nabla^2 \phi r dr$$

intercambiando el orden de diferenciación y variación.

REFERENCIAS

- 1.- J. Frenkel, Kinetic Theory of liquids, Oxford, Clarendon Press (1946).
- 2.- J. D. Eshelby, C. W. A. Newey, P. L. Pratt y A. B. Lillard, Phil. Mag. 3, 75, (1958).
- 3.- J. S. Koehler, D. Langreth y Von Turkovich, Phys. Rev. 128, 573, (1962).
- 4.- R. W. Whitworth, Phys. Stat. Sol. (B) 54, 537, (1972).
- 5.- A. G. Rodfield, Phys. Rev. 94, 537, (1954).
- 6.- G. R. Mc Clurg y C. F. Squire, J. Chem. Phys., 51, 631, (1969).
- 7.- XVIII Congreso de la Soc. Mex. de Física, celebrado en Veracruz, Ver. en Dic. de 1975.
- 8.- G. I. Taylor, Proc. Roy. Soc. (London), A145, 362, (1934).
- 9.- E. Orowan, Z. Physik, 89, 605, (1934).
- 10.- M. Polanyi, Z. Physik, 89, 660, (1934).
- 11.- C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, John Wiley & sons Inc. (1971).
- 12.- A. Keller, Physics Today, 23, 72, (1970).
- 13.- Neugebauer, Growth & perfection of crystals, Wiley, (1959).
- 14.- J. Friedel, Dislocations, Addison Wesley (1964).
- 15.- K. L. Kliewer y J. S. Koehler, Phys. Rev. A140, 1226, (1965).
- 16.- K. L. Kliewer, Phys. Rev. A140, 1241, (1965).
- 17.- R. H. Dube, Photoconductivity of solids, John Wiley & sons Inc. (1960).
- 18.- Semiconductor Theory, W. Shockley, (1953).

- 19.- W. Read, Phil. Mag. 46, 373, (1955). 1962
- 20.- E. M. Kuznetsova, Sov. Phys. Sol. State, 3, 1446, (1961)
- 21.- L. Landau, E. Lifchitz, Mecánica Cuántica, Edit. Mir
Moscu, (1974).
- 22.- H. B. Dwight, Tables of Integrals & other mathematical
data, Mc Millan & company, (1961).
- 23.- Morse & Feshbach, V. 1, McGraw Hill Book Company Inc.
Methods of Theoretical Physics, (1953).
- 24.- R. K. Ahrenkiel y F. C. Brown, Phys. Rev. 136, B223,
(1964).
- 25.- A. Tapia D. y C. Ruiz M., Phys. Rev. B, 9, 3582, (1974).
- 26.- H. Kawamura, J. Phys, Chem. Solids., 5, 256, (1957).