

## TANDAR: POSIBLES APLICACIONES A FISICA DEL ESTADO SOLIDO

María Angélica Rodríguez de Benyacar

La mayor parte de este resumen ha sido tomado de Reports de Harwell y del "Rapport de Prospective de Physique autour des accélérateurs dans des domaines autres que nucléaires" publicado por el CNRS, IN2, CEA, CNE 7 redactado en junio de 1976 y que tiene por fin describir las relaciones entre la física nuclear y la física atómica, molecular y de los medios condensados.

Mi experiencia personal se limita a una pequeña area de la física de los medios condensados y mi falta de experiencia tanto en los temas de física nuclear como en las otras areas no nucleares lleva a que el mayor énfasis de este resumen esté puesto en la aplicación de los aceleradores a los materiales cristalinos.

Aunque el uso de máquinas de alta energía tiene su centro principal en la física nuclear, el uso cada vez mayor que hacen ya las disciplinas no nucleares (químicas y biológicas) de máquinas de energía media, permite predecir que lo mismo sucederá con las máquinas de alta energía. Un ejemplo es el uso de reacciones nucleares para el análisis elemental de aleaciones.

En el caso de la interacción entre un haz de partículas y un medio denso, muy frecuentemente sólido, intervienen colisiones sucesivas cuyas consecuencias no pueden ser deducidas del simple conocimiento de colisiones binarias ion-átomo: es indispensable tener en cuenta al aspecto colectivo de la estructura del medio. Y esta interacción tiene dos aspectos: los efectos sufridos por el medio y los sufridos por la partícula; ambos son absolutamente inseparables si al estudiar un fenómeno de irradiación se quiere dar un modelo cuantitativo de los fenómenos que tienen lugar. Pero este doble enfoque no se hace habitualmente.

El estudio de las modificaciones que sufren los haces de partículas aceleradas que inciden en un sólido se desarrolló hace más de 70 años y se relaciona esencialmente con su frenado y su trayectoria, mientras que hasta 1946 se le había prestado muy poca atención al estudio de las modificaciones que sufren los sólidos irradiados. Es este último campo el que nos interesa particularmente; dentro de él la mayor parte de los trabajos publicados están relacionados con posibles aplicaciones tecnológicas.

Los materiales irradiados son variados: plásticos, metales, materiales iónicos u orgánicos, monocristalinos o policristalinos. La mayor parte de los trabajos publicados hasta ahora utiliza haces de iones livianos de energías ba-

jas y medias, hasta 500 keV; solo una pequeña parte de los trabajos hechos utiliza haces de iones de energía superior a 2 MeV y otra parte también pequeña de trabajos utiliza haces de iones pesados de energía del orden de varias decenas de MeV.

La mayor parte del interés del uso de haces de iones de energía del orden de decenas de MeV se ha centrado en el campo de la simulación del daño que sufren los metales al ser irradiados por neutrones.

Los medios densos presentan por irradiación modificaciones en sus propiedades físicas, químicas y biológicas. Estas modificaciones pueden ser permanentes, y relativamente fáciles de estudiar, o transitorias y mucho más difíciles de estudiar. También entra en juego la fisico-química de las superficies al considerar el rol particular de la interfase entre el medio denso y el vacío que lo rodea.

Los fenómenos más estudiados han sido:

1) implantación iónica (o aleado iónico) que permite obtener aleaciones imposibles de obtener por otros métodos, dando por resultado materiales de alta resistencia, con alta estabilidad térmica o muy difíciles de corroer, bastando pequeñas cantidades de material implantado para obtener notables variaciones en las propiedades.

Por ejemplo se han preparado así aleaciones superficiales o casi superficiales de elementos semiconductores de propiedades electrofísicas particulares.

Materiales base: Si , Ge .

Materiales implantados: B , P , Ta entre otros.

Ventajas: Fácil de automatizar.

Reproducibilidad: 100%.

Trabaja a temperaturas relativamente bajas y el daño por radiación puede eliminarse, al menos parcialmente, por calentamiento a temperaturas también relativamente bajas.

2) Análisis químico de sólidos y películas delgadas, utilizando la técnica de microscopía de profundidad sensible a las masas. El análisis de la energía de las partículas de retroceso da una manera de distinguir las masas de los elementos componentes y su distribución en profundidad.

Por ejemplo se ha estudiado la distribución en profundidad de Pt , Pd , y Ti depositado sobre Si.

Técnica: retrodispersión de haces de  $\text{He}^+$  de 2 MeV.

Resolución: 15 keV.

Ventajas: Capacidad de determinar composición en función de profundidad, p.ej. en las etapas iniciales de formación de capas delgadas; posibilidad de conocer la profundidad alcanzada por una impureza implantada.

### 3) Simulación del daño por irradiación:

En este campo se han realizado un buen número de trabajos en Harwell y Oak-Ridge, estudiando la simulación del daño producido por neutrones en las vainas de los reactores nucleares. Tiene la ventaja de poder tener en horas de irradiación daño equivalente al de años de trabajo en el reactor y además deja muestras inactivas fáciles de estudiar inmediatamente y la desventaja de no producir durante la irradiación los elementos de transmutación que se originan en la irradiación por neutrones de alta energía.

La simulación en vainas de aceros utilizadas en reactores rápidos se ha hecho utilizando p.ej. iones de  $Ni^{6+}$  de 46.5 MeV porque no se introducen iones extraños obteniéndose resultados más cercanos a la realidad que si se utilizan haces de C.

Aún así sigue existiendo la desventaja de no producirse p.ej. gases durante la irradiación con  $Ni^{6+}$ , de modo que los resultados están alterados al no formarse "burbujas" en la estructura metálica.

Para tratar de aproximarse más a la realidad en este momento en Oak-Ridge están haciendo experiencias en las que a la vez que irradian con un ion perteneciente al material, implantan gases (helio, hidrógeno, neón). Los problemas en este caso están en que la implantación y el daño deben realizarse simultáneamente y a la misma profundidad.

En el caso del estudio de las vainas de zircalloy las irradiaciones se han hecho también con  $Ni^{6+}$  porque no está resuelta la producción de haces de iones de circonio.

Fenómenos estudiados: precipitación de impurezas, hinchamiento, formación de huecos, generación de defectos, estudios de fluencia, (creep) y difusión de impurezas.

Materiales: aceros inoxidable, zircalloy, óxidos.

Los resultados deben ser cuidadosamente analizados y si es posible, deben ser comparados con la información obtenida irradiando el material con neutrones antes de extrapolar los resultados a las condiciones de trabajo del reactor; la influencia de las diferencias de temperatura y estado de tensión del material en ambos casos deben ser tenidas en cuenta.

A partir de 1960 surge el interés en el estudio de penetración en medios cristalinos.

Aunque la primera sugestión de canalización se hizo alrededor de 1914, el interés dominante en los fenómenos de difracción de rayos X hizo que esta sugestión no se tuviera en cuenta hasta la década del 60 en que, se observó que la penetración de iones en metales (p.ej. 45 keV  $Kr^{+}$  en Cu) tenía valores anormalmente altos si la dirección de incidencia estaba próxima a direcciones

cristalográficas importantes. Si la dirección del haz incidente coincidía con ejes o planos de bajos índices había en cambio agudos mínimos en haz dispersado. En 1964 se mostró la fuerte dependencia del rendimiento de reacciones nucleares en la orientación del cristal-blanco para reacciones  $(p, \alpha)$  en Si y para reacciones  $(p, n)$  en Cu.

Las colisiones múltiples sufridas en un sólido especialmente si se trata de un monocristal pueden en ciertas direcciones de penetración, llamadas de canalización, no ser ya independientes, sino correlacionadas. Y estos fenómenos de canalización presentan características muy particulares que han contribuido especialmente a la comprensión de las interacciones partícula-materia. Además de este aspecto fundamental, las aplicaciones de los efectos de canalización están en pleno auge en los dominios de física del estado sólido (a través de la implantación iónica y el microanálisis).

Si la dirección de la partícula incidente sobre la superficie de un monocristal yace paralela a una dirección cristalográfica importante, por ejemplo, paralela a un eje de alta simetría, la partícula tiene alta probabilidad de sufrir una dispersión de pequeño ángulo cuando atraviesa el primer plano cristalino. También es grande la probabilidad (usualmente mayor del 90% para canalización axial) que esta primera deflexión será pequeña y la partícula sufrirá una segunda deflexión al atravesar el segundo plano. Debido a la estructura ordenada del blanco, tal partícula sufrirá una serie correlacionada de colisiones de pequeño ángulo. Un comportamiento similar puede esperarse para incidencia paralela a planos atómicos, hablándose entonces de canalización planar. Esto resulta en un efecto que hace que las partículas sigan trayectorias que (para partículas cargadas positivamente) oscilan en los canales formados por hileras o planos de átomos; en estas condiciones los rendimientos de procesos cercanos se reduce mucho.

Que la trayectoria de partículas con energías de varios MeV pueda estar tan fuertemente influenciada por potenciales del orden de unos pocos MeV es una consecuencia de la naturaleza colectiva del proceso de canalización. La mayor parte de la teoría básica de estos procesos se hizo en 1965. El fenómeno fue explicado como una serie de colisiones rasantes con átomos de la red y se derivó un potencial transversal efectivo que gobierna la trayectoria de las partículas. Posteriormente se introdujo el concepto de potencial medio o continuo y se calcularon las expresiones para las intensidades y anchos angulares de las anomalías de canalización.

Hasta ahora la mayor parte de los trabajos de canalización se ha hecho en materiales de estructura sencilla: metales, semiconductores, algunos óxidos; sólo se han estudiado escasos compuestos de más de dos componentes. En

el caso de estos compuestos, las distintas direcciones cristalográficas implican, además, canales limitados por átomos distintos; se consideran entonces hileras o planos "fuertes" y "débiles" con distinta interacción entre los átomos y el haz de iones; dependiendo de los iones incidentes y su energía el haz canalizado "vé" o no los canales limitados por átomos dados.

Este fenómeno podría ser particularmente útil en el estudio de compuestos que contienen a la vez átomos muy livianos y muy pesados, que es el caso por ejemplo de los compuestos de uranio que estudiamos en nuestro laboratorio. Los fenómenos de canalización son muy sensibles además a las modificaciones de estructura: pequeños desplazamientos de algunos átomos podrían cambiar notablemente las propiedades de canalización. Muchas transformaciones de fase implican desplazamientos atómicos muy pequeños que, sobretodo si los que se desplazan son átomos muy livianos, no son directamente medibles u observables a través del análisis de difracción de rayos X; creemos que en este campo que relaciona las transformaciones de fase con los fenómenos de canalización es donde nuestro laboratorio podría utilizar el nuevo acelerador.

No podemos dejar de mencionar las experiencias hechas en la Universidad de Moscú, utilizando haces de protones de 500 keV para obtener los "diagramas de protones", diagramas que registran en película fotográfica un conjunto de líneas y manchas clara y oscuras relacionadas con la orientación de los planos y ejes de simetría cristalinos. Estos diagramas de protones se modifican ligeramente al variar la temperatura de la muestra ( $TiO_3Ba$ ) a través de la temperatura de transición (120 °C). Las pequeñas variaciones han podido ser relacionadas con deformaciones espontáneas de la celda cristalina del orden de 1%, comparable con los valores obtenidos por difracción de rayos X.