

Conclusiones

En este trabajo se determinó experimentalmente, utilizando la técnica de las “*Correlaciones Angulares Perturbadas Diferenciales en Tiempo*” (TDPAC), la magnitud, simetría y dirección del tensor GCE, en el sitio de impureza Ta sustituyendo al catión en un monocristal de $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ dopado con Ta (con una concentración de ppm). Estos resultados se compararon con predicciones teóricas obtenidas con el modelo de cargas puntuales (PCM) y con cálculos de primeros principios a partir del método FP-LAPW (en el marco teórico de la DFT). Se realizó una estudio teórico-experimental exhaustivo para este sistema impureza-huésped y también para el sistema $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{:Cd}$.

Existe un excelente acuerdo entre las medidas experimentales para el caso de las dos interacciones hiperfinas encontradas (HFI1 y HFI2) y las predicciones FP-LAPW para la situación en que la impureza donora Ta no está ionizada y considerando las relajaciones estructurales introducidas por la impureza Ta en la red huésped, predichas por FP-LAPW de manera autoconsistente. En el futuro, es necesario un estudio EXAFS en el borde L del Ta para poder medir las distancias Ta-O1 y Ta-O2 y corroborar los valores de la relajación estructural predichas por FP-LAPW.

Las dos interacciones HFI1 y HFI2 son originadas en sondas ^{181}Ta localizadas en sitios de catión libres de defectos en el caso de HFI2 ($\delta = 0.0_8 \%$), y con un daño remanente y de baja intensidad, para el caso de HFI1 ($\delta = 5.7_8 \%$).

Experimentalmente se concluye que la dirección de V_{33} coincide con el eje [001] del cristal, en excelente acuerdo con el cálculo *ab initio*, y que V_{22} se encuentra en el plano del monocristal y perpendicular a uno de sus lados (en el caso de HFI1). De la comparación entre teoría y experimento se puede determinar que el signo del GCE (V_{33}) es positivo.

Sería interesante en el futuro realizar cálculos en sitios intersticiales simulando la localización de la impureza para validar o descartar la hipótesis de que alguna de las dos interacciones HFI1 y HFI2 pudieren corresponder a impurezas localizadas en dichos sitios.

Las predicciones PCM quedan invalidadas una vez más por los desacuerdos encontrados con las medidas experimentales quedando demostrado que el modelo de

cargas puntuales y el uso de un factor de antiapantallamiento (único para cada átomo sonda) son inadecuados para describir el tensor GCE en este tipo de compuestos.

De la comparación de los resultados experimentales del GCE con las predicciones FP-LAPW se concluye que la impureza Ta introduce un nivel doble donador en el gap del semiconductor cercano a la banda de conducción, el cual no se encuentra ionizado a temperatura ambiente. Mientras que del estudio de las predicciones calculadas y los valores experimentales del $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{:Cd}$, reportados por Habenicht et. al. [Habenicht, 1999], se concluye que la impureza Cd, que introduce un nivel simple aceptor en el gap del semiconductor, está parcialmente ionizada.

Al igual que en otros óxidos dopados con impurezas donoras y aceptoras, los cálculos de primeros principios muestran que el nivel de impureza introducido en el gap del semiconductor se corre hacia la banda de valencia (profundizando el nivel de impureza para su ionización) cuando se permite a los oxígenos primeros vecinos que relajen estructuralmente, reduciendo la energía del sistema. Para distancias no relajadas, el nivel de impureza se acerca a la banda de conducción, aumentando la energía del sistema, y en acuerdo con el principio de exclusión de Pauli.

Por último, de los resultados PAC se pudo observar que mientras que el cociente de V_{33} para las sondas Ta y Cd es cercano a la unidad en el grupo corundum, en el grupo de las bixbitas es del orden de 2 o 3. Estos comportamientos deberán explicarse en el futuro a partir de cálculos *ab initio* ya en desarrollo. Cabe remarcar que en el marco del PCM dichos valores no pueden predecirse correctamente.