



---

**Universidad de Valladolid**

Facultad de Ciencias

## **TRABAJO FIN DE GRADO**

Grado en Física

### **Modelado atómico de las implantaciones de alta energía en silicio**

***Autor:***

*Irene Muñoz Velasco*

***Tutores:***

*Lourdes Pelaz Montes*

*Iván Santos Tejido*



*A mis padres  
y a mi hermano*



Julio de 2021



# Resumen

La implantación iónica en Si tiene un amplio rango de aplicaciones en el sector tecnológico, desde microprocesadores hasta células solares. Los simuladores atomísticos existentes describen correctamente este proceso en el rango de bajas y medias energías de implantación pero no en el de altas energías. En el presente trabajo, se revisan los modelos que describen los diversos mecanismos por los que el ion pierde energía a medida que atraviesa el material blanco para comprender la física que hay detrás, especialmente a altas energías. Para ello, se analizarán los datos experimentales proporcionados por la empresa Applied Materials y se evaluarán las diferentes pérdidas energéticas que sufre el ion a lo largo de toda su trayectoria.

**Términos clave:** irradiación, implantación iónica, altas energías, modelado computacional, frenado electrónico, acanalamiento, desacanalamiento.





# Abstract

Ion implantation in Si has a wide range of applications in the technological sector, from microprocessors to solar cells. Current simulators describe this process correctly in the range of low and medium implantation energies but not in the high energy range. In the present work, we review the models that describe the several mechanisms by which the ion loses energy as it passes through the target material to understand the physics behind it, especially at high energies. To do this, the experimental data provided by the company Applied Materials will be analyzed and the different energy losses suffered by the ion throughout its entire trajectory will be evaluated.

**Key words:** irradiation, ion implantation, high energies, computational modeling, electronic stopping power, channeling, dechanneling.



# Agradecimientos

Agradezco a la Universidad de Valladolid y, en especial, a mis tutores Lourdes Pelaz e Iván Santos por su paciencia y apoyo, y por compartir conmigo sus conocimientos durante la realización de este Trabajo Fin de Grado.

Quiero agradecer también el cariño y apoyo incondicional de mi familia y amigos que me han acompañado a lo largo de estos últimos años, tanto en los buenos como en los malos momentos.



# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>VII</b>
<b>Abstract</b>	<b>IX</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>XI</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	1
1.2. Objetivos . . . . .	5
1.3. Estructura de la memoria . . . . .	5
<b>2. Estado del arte</b>	<b>7</b>
2.1. Antecedentes experimentales . . . . .	7
2.2. Modelado de la interacción de la radiación con la materia . . . . .	10
2.2.1. Frenado elástico o nuclear . . . . .	11
2.2.2. Frenado inelástico o electrónico . . . . .	12
2.3. Simuladores atomísticos . . . . .	25
<b>3. Metodología</b>	<b>27</b>
<b>4. Resultados</b>	<b>33</b>
4.1. Perfiles de dopantes . . . . .	33
4.2. Perfiles de energía depositada . . . . .	36
4.2.1. Bajas energías . . . . .	36
4.2.2. Altas energías . . . . .	37
4.3. Caracterización de las pérdidas electrónicas . . . . .	39
4.3.1. Pérdidas electrónicas no locales . . . . .	39
4.3.2. Pérdidas electrónicas locales . . . . .	42
4.4. Mecanismos de desacanalamiento . . . . .	46
<b>5. Conclusiones</b>	<b>49</b>
<b>A. Programas en C</b>	<b>51</b>



# Índice de figuras

1.1. Dosis (en $\text{at}/\text{cm}^2$ ) y energía (en eV) de implantación para un amplio rango de aplicaciones de la implantación iónica. Las regiones rojas, negras y azules indican aplicaciones de altas corrientes, corrientes medias y altas energías, respectivamente (figura extraída de la referencia [1]). . . . .	2
1.2. (a) y (b) Configuraciones de acanalamiento y (c) Desacanalamiento (figura extraída de la referencia [2]). . . . .	3
1.3. (a) Trayectorias de los iones implantados a través de una red cúbica y (b) Efecto del acanalamiento en un perfil de dopantes (figura (a) extraída de la referencia [3] y figura (b) de la referencia [4]). . . . .	3
2.1. De izquierda a derecha, concentración (en $\text{at}/\text{cm}^3$ ) de As y P implantados en función de la profundidad (en $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento en Si {100} a 50 keV para diferentes dosis de implantación. Los puntos representan los datos experimentales y las líneas continuas las curvas obtenidas con el simulador Sentaurus Atomistic de la empresa Synopsys Inc. (figuras extraídas de la referencia [5]). . . . .	7
2.2. Concentración (en $\text{at}/\text{cm}^3$ ) de As en función de la profundidad (en $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento en Si {100} a 3 MeV y con una dosis de implantación igual a $5 \times 10^{12} \text{at}/\text{cm}^2$ . Datos obtenidos experimentalmente con SIMS (símbolos de color rojo), computacionalmente con el simulador Sentaurus Atomistic (línea verde) de la empresa Synopsys Inc. (datos proporcionados por la empresa estadounidense Applied Materials) y con el código IIS (línea azul). . . . .	8
2.3. Concentración (en $\text{at}/\text{cm}^3$ ) de As en función de la profundidad (en $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento y desacanalamiento ( $0.3^\circ$ y $0.6^\circ$ ) en Si {100} a 3.1 MeV y con una dosis de implantación igual a $1 \times 10^{12} \text{at}/\text{cm}^2$ . Datos obtenidos experimentalmente con SIMS en condiciones de acanalamiento (símbolos rellenos de color azul) y computacionalmente con los códigos SRIM (símbolos huecos de color negro) e IMSIL (diversos trazos naranjas) (figura extraída de la referencia [6]). . . . .	9
2.4. Esquema ilustrando los diferentes mecanismos de pérdida de energía de un ion.	10
2.5. Esquema de una colisión binaria desde el sistema de referencia del centro de masas (figura extraída de la referencia [7]). . . . .	12
2.6. Dependencia del frenado electrónico no local con la velocidad del ion (figura extraída de la referencia [8]). . . . .	13
2.7. Comparativa de varias aproximaciones al método teórico desarrollado por Echenique et al. para el frenado electrónico del protón. Los símbolos rellenos representan los puntos obtenidos por Echenique et al. y las líneas continuas los diferentes ajustes. . . . .	17

2.8.	Isosuperficies que representan las diferentes densidades electrónicas (figura extraída de la referencia [7]). . . . .	19
2.9.	Pérdidas energéticas por unidad de longitud (en eV/Å) para un protón contenido en un gas de electrones con $r_s = 1.85$ a.u. en función de su energía (en eV) (figura extraída de la referencia [7]). . . . .	20
2.10.	Ilustración de los parámetros envueltos en el cálculo del frenado electrónico local con el método de Firsov (figura extraída de la referencia [8]). . . . .	22
2.11.	Diagrama de bandas del Si, en el que se representa la energía $E$ en función del momento $k$ (figura extraída de la referencia [9]). . . . .	24
3.1.	Diagrama de flujo que ilustra el funcionamiento del código IIS basado en la técnica BCA. . . . .	28
3.2.	Estructura del fichero de entrada para el código IIS. . . . .	29
3.3.	Ilustración de los ángulos de inclinación de implantación. . . . .	29
4.1.	Concentración (en at/cm <sup>3</sup> ) de As en función de la profundidad (en μm), bajo condiciones de acanalamiento en Si {100}, con una dosis de implantación igual a $5 \times 10^{12}$ cm <sup>-2</sup> y con energías de implantación de: a) 3 MeV, b) 4.5 MeV, c) 6 MeV, d) 7.5 MeV, e) 9 MeV y f) 10.5 MeV. Datos obtenidos experimentalmente con SIMS y proporcionados por la empresa estadounidense Applied Materials (línea rosa) y obtenidos computacionalmente con el código IIS (línea azul). . . . .	34
4.2.	Concentración (en at/cm <sup>3</sup> ) de P en función de la profundidad (en μm), bajo condiciones de acanalamiento en Si {100}, con una dosis de implantación igual a $5 \times 10^{12}$ cm <sup>-2</sup> y con energías de implantación de: a) 3 MeV, b) 4.5 MeV, c) 6 MeV, d) 7.5 MeV, e) 9 MeV y f) 10.5 MeV. Datos obtenidos experimentalmente con SIMS y proporcionados por la empresa estadounidense Applied Materials (línea rosa) y obtenidos computacionalmente con el código IIS (línea azul). . . . .	34
4.3.	Concentración (en at/cm <sup>3</sup> ) de B en función de la profundidad (en μm), bajo condiciones de acanalamiento en Si {100}, con una dosis de implantación igual a $5 \times 10^{12}$ cm <sup>-2</sup> y con energías de implantación de: a) 1 MeV, b) 2 MeV, c) 3 MeV, d) 4 MeV y e) 5 MeV. Datos obtenidos experimentalmente con SIMS y proporcionados por la empresa estadounidense Applied Materials (línea rosa) y obtenidos computacionalmente con el código IIS (línea azul). . . . .	35
4.4.	Pérdidas energéticas por unidad de longitud (en eV/Å) en función de la profundidad (en μm) durante la implantación de a) As, b) P y c) B a 100 keV en Si {100}, con una dosis de $5 \times 10^{12}$ at/cm <sup>2</sup> y en condiciones de acanalamiento, para cada uno de los posibles eventos que se pueden producir en una colisión. . . . .	36
4.5.	Cociente entre las pérdidas electrónicas y nucleares en función de la profundidad (en Å) durante la implantación de As en Si {100}, con una dosis de $5 \times 10^{12}$ at/cm <sup>2</sup> , para: 100 keV en condiciones de acanalamiento (línea roja), 10.5 MeV en condiciones de acanalamiento (línea azul) y 10.5 MeV en condiciones de desacanalamiento (línea verde). . . . .	39
4.6.	Valor promedio de las pérdidas electrónicas no locales (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (símbolos huecos en color rojo), P a 10.5 MeV (símbolos huecos en color verde) y As a 10.5 MeV (símbolos huecos en color azul) en Si {100}, con una dosis de $5 \times 10^{12}$ at/cm <sup>2</sup> y en condiciones de acanalamiento. Las líneas discontinuas ilustran los valores obtenidos con SRIM para implantaciones de B (en color rojo), P (en color azul) y As (en color verde) en Si. . . . .	40



4.7. Valor promedio de las pérdidas electrónicas no locales (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (símbolos huecos en color rojo), P a 10.5 MeV (símbolos huecos en color verde) y As a 10.5 MeV (símbolos huecos en color azul) en Si {100}, con una dosis de $5 \times 10^{12}$ at/cm <sup>2</sup> y en condiciones de desacanalamiento. Las líneas discontinuas ilustran los valores obtenidos con SRIM para implantaciones de B (en color rojo), P (en color azul) y As (en color verde) en Si. . . . .	40
4.8. Valor promedio de las pérdidas electrónicas no locales (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (en color rojo), P a 10.5 MeV (en color verde) y As a 10.5 MeV (en color azul) en Si {100}, con una dosis de $5 \times 10^{12}$ at/cm <sup>2</sup> , en condiciones de acanalamiento (símbolos huecos) y de desacanalamiento (símbolos rellenos). . . . .	41
4.9. Valor promedio de las pérdidas electrónicas locales (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (en color rojo), P a 10.5 MeV (en color verde) y As a 10.5 MeV (en color azul) en Si {100}, con una dosis de $5 \times 10^{12}$ at/cm <sup>2</sup> , en condiciones de acanalamiento (símbolos huecos) y de desacanalamiento (símbolos rellenos). . . . .	42
4.10. Valor promedio de las pérdidas electrónicas locales, en escala logarítmica, (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (en color rojo), P a 10.5 MeV (en color verde) y As a 10.5 MeV (en color azul) en Si {100}, con una dosis de $5 \times 10^{12}$ at/cm <sup>2</sup> , en condiciones de acanalamiento (símbolos huecos) y de desacanalamiento (símbolos rellenos). . . . .	43
4.11. Parámetro $R_0$ (en Å) frente a la masa atómica (en a.m.u.) de los iones implantados (B 10.81 a.m.u., P 30.97 a.m.u. y As 74.952 a.m.u.). . . . .	45
4.12. Ajuste de las pérdidas electrónicas locales con el modelo de Firsov junto con una función de Fermi-Dirac. . . . .	45
4.13. Concentración (en at/cm <sup>3</sup> ) de As en función de la profundidad (en $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento en Si {100}, con una dosis de implantación igual a $5 \times 10^{12}$ at/cm <sup>2</sup> y con una energía de implantación de 10.5 MeV. Datos obtenidos experimentalmente con SIMS (puntos naranjas) y computacionalmente con el código IIS para diferentes temperaturas de Debye: 200 K (línea gris), 300 K (línea amarilla), 400 K (línea azul) y 519 K (línea verde, esta es la temperatura que se emplea por defecto). . . . .	47



# Índice de tablas

2.1. Diferentes modelos que se emplean para describir tanto el frenado electrónico no local como local en el rango de bajas energías (desde cientos o miles de keV hasta decenas de MeV). . . . .	23
2.2. Simuladores atomísticos basados en la técnica de simulación BCA. . . . .	26
4.1. Pérdidas energéticas por unidad de longitud (en $\text{eV}/\text{Å}$ ) en función de la profundidad (en $\mu\text{m}$ ) durante la implantación de: As a 10.5 MeV, P a 10.5 MeV y B a 5 MeV en Si {100}, con una dosis de $5 \times 10^{12}$ $\text{at}/\text{cm}^2$ y en condiciones de acanalamiento (columna izquierda) y desacanalamiento (columna derecha), para cada uno de los posibles eventos que se pueden producir en una colisión. Las pérdidas elásticas (evento E) se representan en color azul, las pérdidas electrónicas locales (evento L) en color rojo, las pérdidas electrónicas no locales (evento N) en color verde, el vuelo libre (evento F) en color naranja y las pérdidas electrónicas totales (eventos L+N+F) en color negro. . . . .	38
4.2. Parámetros de ajuste de la ecuación (4.2) para representar los datos de la Figura 4.10. . . . .	44



# Siglas

**BCA** Binary Collision Approximation (Aproximación de Colisiones Binarias).

**BK** Brandt-Kitagawa.

**DFT** Density Functional Theory.

**IIS** Ion Implant Simulator.

**ISDS** ISolated atom Density Superposition.

**ITRS** International Technology Roadmap for Semiconductors.

**KMC** Kinetic Monte Carlo.

**LDA** Local Density Approximation.

**LSS** Lindhard-Scharff-Schiott.

**MD** Molecular Dynamics (Dinámica Molecular).

**OR** Oen-Robinson.

**PF** Pares de Frenkel.

**SIMS** Secondary Ion Mass Spectrometry.

**SRIM** Stopping and Range of Ions in Matter.

**TF** Thomas-Fermi.

**TRIM** TRansport of Ions in Matter.

**TTM** Two-Temperature Model (Modelo de Dos Temperaturas).

**ZBL** Ziegler-Biersack-Littmark.



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación

La **implantación iónica** consiste en el bombardeo de la superficie de un sustrato con iones que han sido acelerados previamente para alcanzar una cierta energía. Es el método más empleado actualmente para la introducción de dopantes en semiconductores durante la fabricación de las zonas activas (uniones PN) de los dispositivos electrónicos. Este método se emplea en la fabricación tanto de dispositivos de muy pequeñas dimensiones, tales como los procesadores nanoelectrónicos de última generación, como de dispositivos con extensas zonas activas, como los detectores de radiación y las células solares. En el primer caso, la progresiva miniaturización de los procesadores implica la optimización de las extensiones de la fuente y el drenador para poder controlar mejor el canal en los transistores MOSFET, de manera que las uniones sean ultra superficiales y para ello, se necesitan implantaciones de muy baja energía (del orden de unas centenas de eV o unos pocos keV). Mientras que en el segundo caso, las zonas activas de los detectores de radiación y de las células solares tienen dimensiones mucho mayores (del orden de las micras o incluso mayores) y se necesitan implantaciones de alta energía ( $\sim$  MeV) para que los dopantes alcancen una mayor profundidad. En la Figura 1.1 se recogen las condiciones de implantación para la fabricación de distintas partes de los dispositivos electrónicos [1].

El Si es un material cristalino con una estructura tipo diamante o tipo zinc blenda, que son dos redes cúbicas centradas en las caras desplazadas entre sí  $(a/4, a/4, a/4)$ , siendo  $a$  el parámetro de red de la estructura. Los iones se pueden implantar, por un lado, a través de una dirección cristalográfica en concreto, sin ninguna inclinación con respecto al eje principal de la red cristalográfica, y esto es lo que se conoce como implantación bajo condiciones de **acanalamiento** (Figuras 1.2 (a) y (b)) [2]. Por otro lado, los iones se pueden implantar con un cierto ángulo de inclinación con respecto al eje principal de la red y es lo que se denomina implantación bajo condiciones de desacanalamiento o de no acanalamiento (Figura 1.2 (c)) [2]. La Figura 1.3 (a) muestra tres iones que son implantados en una red cúbica simple [3]. El ion A es implantado acanaladamente y, en consecuencia, solo sufre colisiones laterales con los átomos que constituyen las paredes del canal a medida que se adentra en el material blanco. El ion B es implantado con un pequeño ángulo de inclinación y tras una corta distancia, se sale del canal debido a una fuerte colisión con un átomo de la red. Por último, el ion C se implanta con un ángulo de inclinación mucho mayor y sufre muchas más desviaciones debido a las colisiones con los átomos de la red. La consecuencia del acanalamiento es evidente, los iones sufren muchas menos colisiones y alcanzan una mayor profundidad en el material implantado,

esto implica la aparición de una cola más profunda en la distribución final de dopantes (Figura 1.3 (b)) [4]. La magnitud y extensión de esta cola dependen de la masa y energía de los iones y la orientación del cristal. Ahora bien, independientemente de las condiciones bajo las cuales se realice la implantación iónica, para optimizar el proceso de fabricación de las zonas activas de los dispositivos electrónicos, se realizan pruebas tanto experimentales como computacionales con el objeto de conseguir la distribución de dopantes que proporcione las características eléctricas buscadas en la unión fabricada.

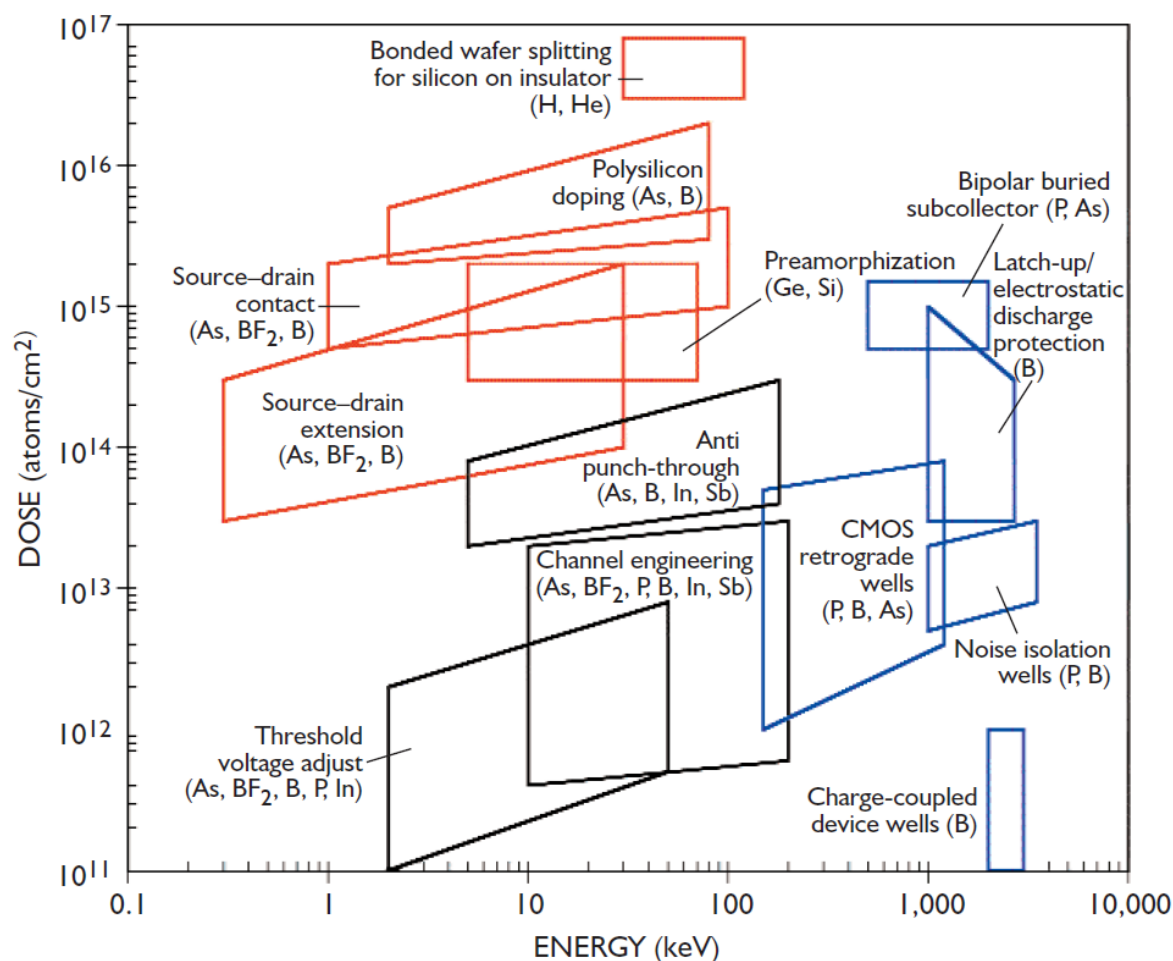


Figura 1.1: Dosis (en  $\text{at}/\text{cm}^2$ ) y energía (en  $\text{eV}$ ) de implantación para un amplio rango de aplicaciones de la implantación iónica. Las regiones rojas, negras y azules indican aplicaciones de altas corrientes, corrientes medias y altas energías, respectivamente (figura extraída de la referencia [1]).

Tal y como afirma el [International Technology Roadmap for Semiconductors \(ITRS\)](#) [10], el **modelado computacional** es una herramienta fundamental en el desarrollo y fabricación de dispositivos electrónicos, ya que permite reducir tiempos de desarrollo y costes de producción. Para que el modelado computacional sea útil, se necesitan modelos predictivos: aquellos modelos que habiéndose desarrollado bajo unas ciertas condiciones, sigan siendo realistas cuando nos salgamos de ellas. En el caso de la implantación iónica, los modelos empleados tienen que abarcar un gran rango de energías: de unas pocas centenas de  $\text{eV}$  hasta  $\text{MeV}$ . Esto



implica una correcta comprensión de los mecanismos físicos que ocurren a lo largo de toda la implantación.

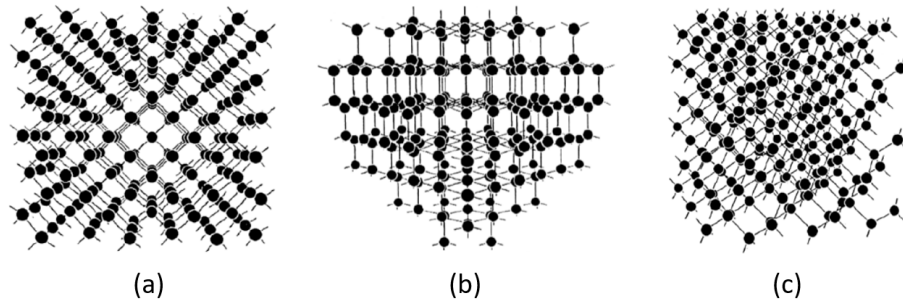


Figura 1.2: (a) y (b) Configuraciones de acanalamiento y (c) Desacanalamiento (figura extraída de la referencia [2]).

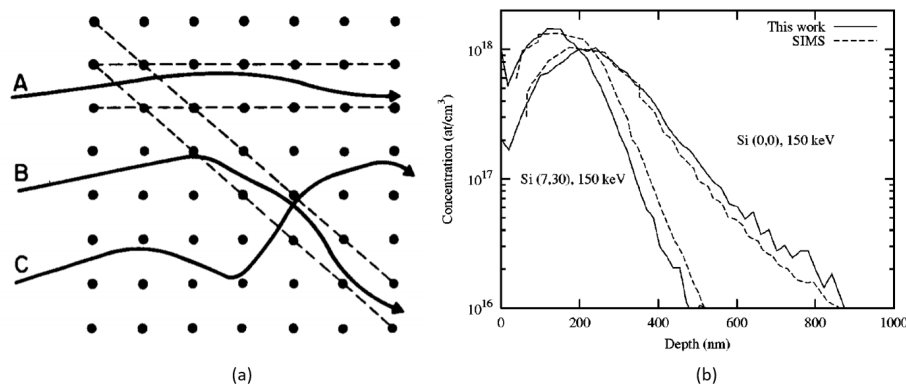


Figura 1.3: (a) Trayectorias de los iones implantados a través de una red cúbica y (b) Efecto del acanalamiento en un perfil de dopantes (figura (a) extraída de la referencia [3] y figura (b) de la referencia [4]).

El modelado del proceso de irradiación de iones energéticos sobre un sustrato es complejo debido a la gran cantidad de fenómenos físicos que tienen lugar. Los iones energéticos incidentes penetran en el material blanco y, mientras se desplazan por él, van perdiendo energía debido a las distintas interacciones que tienen con los núcleos (frenado nuclear o elástico) y los electrones (frenado electrónico o inelástico) del blanco. Estas interacciones pueden dar lugar al desplazamiento de los átomos de la red cristalina (formación de defectos en la red), generación de pares electrón-hueco, fragmentación de los núcleos del blanco, etc. De entre todas las **técnicas de simulación** que existen para simular todos estos mecanismos a lo largo de una implantación iónica y que se pueden consultar en la referencia [11], las más versátiles son las de **Molecular Dynamics (Dinámica Molecular) (MD)** y **Binary Collision Approximation (Aproximación de Colisiones Binarias) (BCA)**. Por un lado, la técnica MD describe el movimiento de los átomos en moléculas o sólidos a partir de las interacciones múltiples entre el ion y los átomos del blanco. Estas simulaciones nos permiten obtener una descripción detallada de prácticamente todos los átomos del cristal y del ion, tanto de su posición como de su velocidad, pero el coste computacional es tan alto que se requiere mucho tiempo para simular el recorrido de un solo ion. Además, esta técnica está limitada a la simulación de cascadas a bajas energías, dado que las altas energías implican celdas de simulación muy

grandes para poder contener la cascada de implantación. En consecuencia, MD no se suele emplear para simular muchas cascadas y ofrece una estadística bastante pobre. Por otro lado, las simulaciones de BCA describen el movimiento de un ion en un material a partir de una secuencia de interacciones binarias (entre el ion y el átomo del blanco) independientes. Evidentemente, BCA no es tan exacta como MD pero la modelización de la trayectoria del ion en el material mediante sucesivas colisiones del mismo con un número muy reducido de átomos del blanco no es tan costosa en tiempo de cálculo (minutos comparado con los días que MD puede tardar en simular una implantación completa) y sus resultados son aceptables. En estas simulaciones, se pueden usar celdas de simulación grandes y por tanto, simular cascadas de alta energía que penetren mucho en el material irradiado. Por todo ello, BCA es el método de simulación que se usa para modelar la implantación iónica de procesos en silicio. La clave es que, dentro de la simplificación que mantenga la eficiencia computacional, los modelos sean lo suficientemente exactos para recoger los mecanismos de interacción claves.

A lo largo de los últimos años, las aplicaciones que implican implantaciones iónicas a altas energías han comenzado a cobrar cada vez más importancia [12]. Sin embargo, los modelos existentes no describen correctamente estas irradiaciones. Ejemplo de ello son los datos proporcionados por la empresa Applied Materials [13], los cuales han motivado este trabajo, y que muestran las **discrepancias** entre los perfiles de dopantes obtenidos computacionalmente y experimentalmente con **Secondary Ion Mass Spectrometry (SIMS)**. Estos resultados se analizarán en profundidad en el capítulo 2.

Por último, aunque el presente trabajo aborde un tema, que en un principio, puede parecer muy específico, no debemos olvidar que la implantación iónica no es más que un caso particular de algo más genérico y fundamental en Física, que es la **interacción de la radiación con la materia** (concretamente, en el caso de la implantación iónica, las partículas incidentes son iones). Éste es un tema que ha sido muy estudiado desde comienzos del siglo pasado y prueba de ello son los innumerables estudios que se han llevado a cabo: desde Bohr, quien en 1912 propuso su modelo atómico en el que explicaba que la radiación absorbida o emitida por un átomo se producía en cuantos de energía [14]; pasando por Einstein, que estudió el efecto fotoeléctrico en 1905 [15] y por lo que recibió el premio Nobel de Física en 1921; hasta Bethe, quien en 1930 calculó el frenado electrónico del protón a altas energías [16]. En la actualidad, este tema sigue siendo objeto de estudio y ejemplo de ello son los trabajos de Schinner et al., publicados este mismo año [17]. La implantación iónica es por tanto, un tema importante no solo en Electrónica, sino también en la industria nuclear (radiación en los reactores nucleares), en medicina, en la industria aeroespacial y en Física Fundamental (CERN).

## 1.2. Objetivos

Con la realización del presente trabajo se persiguen las siguientes metas:

1. Analizar los datos experimentales de implantaciones de alta energía proporcionados por la empresa Applied Materials para entender la información que transmiten los experimentos e identificar discrepancias con los modelos.
2. Estudiar el estado del arte de los modelos usados actualmente para estudiar las implantaciones a altas energías y entender los diversos mecanismos por los que un ion va perdiendo su energía a medida que se desplaza por el material implantado.
3. Cuantificar estas pérdidas energéticas a lo largo de la trayectoria del ion.
4. Tratar de identificar los mecanismos físicos que no se están teniendo en cuenta en estos modelos para justificar así los datos experimentales.

## 1.3. Estructura de la memoria

Esta memoria está organizada de la siguiente forma: en el capítulo 1 se ha introducido el proceso de la implantación iónica y su gran interés científico, además de la importancia del modelado computacional.

Seguidamente, en el capítulo 2 se revisan los modelos existentes que describen los diferentes mecanismos físicos por los que el ion pierde energía a lo largo de la implantación.

Una vez comprendidos estos modelos, en el capítulo 3 se detalla la metodología empleada a lo largo de este trabajo para el posterior análisis de los datos experimentales proporcionados por la empresa Applied Materials y los obtenidos a través de las simulaciones realizadas.

Estos resultados se exponen y analizan en profundidad en el capítulo 4.

Por último, se presentan las conclusiones obtenidas de este estudio en el capítulo 5.



## Capítulo 2

# Estado del arte

En este capítulo comenzaremos analizando los resultados experimentales que motivaron la realización de este trabajo, facilitados por la empresa Applied Materials, para la posterior descripción de los modelos que tratan de explicar la interacción de la radiación con la materia. Por último, veremos qué modelos computacionales se emplean hoy en día para simular la implantación iónica.

### 2.1. Antecedentes experimentales

Los modelos empleados actualmente para describir la implantación iónica en el rango de bajas y medias energías (del orden de unas decenas o centenas de keV) funcionan correctamente. Prueba de ello es la Figura 2.1 [5] que muestra las concordancias entre los datos obtenidos experimentalmente con SIMS y computacionalmente con el simulador atomístico Sentaurus Atomistic, comercializado por la empresa estadounidense Synopsys Inc. (empresa líder en el modelado y desarrollo de la tecnología de los circuitos integrados a nivel mundial) [18].

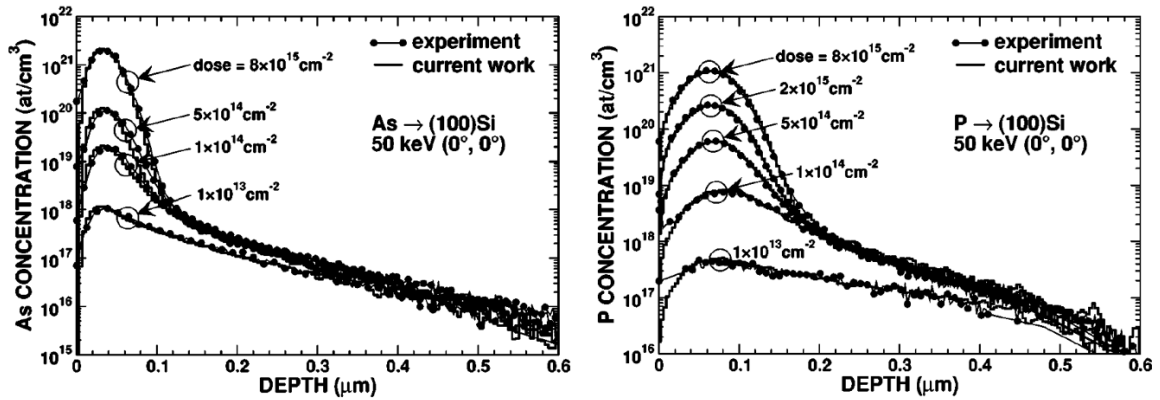


Figura 2.1: De izquierda a derecha, concentración (en at/cm<sup>3</sup>) de As y P implantados en función de la profundidad (en μm), bajo condiciones de acanalamiento en Si {100} a 50 keV para diferentes dosis de implantación. Los puntos representan los datos experimentales y las líneas continuas las curvas obtenidas con el simulador Sentaurus Atomistic de la empresa Synopsys Inc. (figuras extraídas de la referencia [5]).

En la Figura 2.1 se puede observar que los perfiles a bajas energías simulados con el código Sentauros Atomistic coinciden con los obtenidos experimentalmente. Éste y otros ejemplos de las concordancias entre los perfiles obtenidos computacional y experimentalmente se pueden encontrar en las referencias [4, 5, 7, 19]. Sin embargo, esto no ocurre en las simulaciones a altas energías.

En los simuladores más avanzados se han detectado discrepancias entre los datos experimentales y los resultados predichos por los mismos a altas energías. Un buen ejemplo de ello son las Figuras 2.2 y 2.3 [6]. En primer lugar, en la Figura 2.2 se muestra una comparativa entre los perfiles de dopantes para una implantación iónica de As bajo condiciones de acanalamiento en Si {100} con 3 MeV, obtenidos experimentalmente con SIMS y los calculados con el simulador Sentauros Atomistic, comercializado por Synopsys Inc., y con el código Ion Implant Simulator (IIS) [20], desarrollado en el Departamento de Electricidad y Electrónica de la Universidad de Valladolid. Se puede observar que ninguno de los dos simuladores predice adecuadamente el perfil de dopantes implantados, especialmente las colas del perfil. Mientras que la cola observada experimentalmente tiene una dependencia exponencial decreciente (línea recta en escala logarítmica), en los dos simuladores hay una meseta casi plana y después los perfiles finalizan abruptamente. Esa caída abrupta es la deseada para fabricar las uniones PN, pero no es la que se consigue experimentalmente.

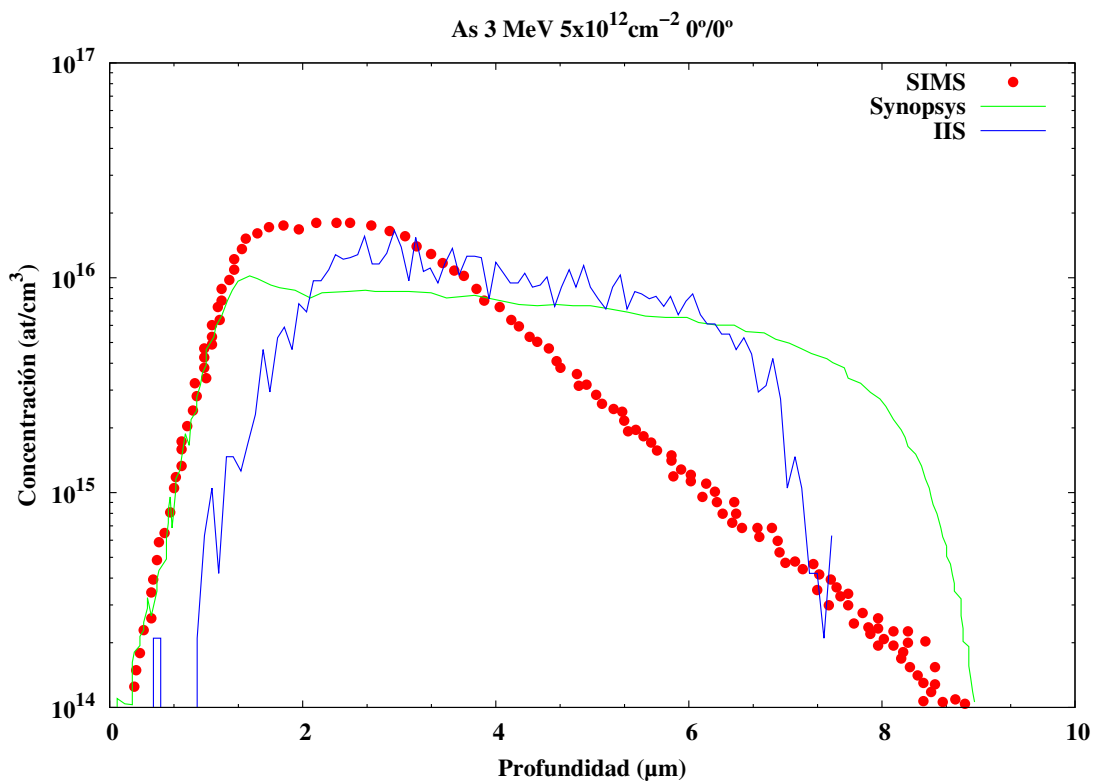


Figura 2.2: Concentración (en  $\text{at/cm}^3$ ) de As en función de la profundidad (en  $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento en Si {100} a 3 MeV y con una dosis de implantación igual a  $5 \times 10^{12} \text{ at/cm}^2$ . Datos obtenidos experimentalmente con SIMS (símbolos de color rojo), computacionalmente con el simulador Sentauros Atomistic (línea verde) de la empresa Synopsys Inc. (datos proporcionados por la empresa estadounidense Applied Materials) y con el código IIS (línea azul).

En segundo lugar, la Figura 2.3 muestra los perfiles de una implantación iónica de As, bajo diferentes condiciones de acanalamiento y desacanalamiento, en Si {100} con 3.1 MeV, obtenidos experimentalmente con SIMS y los simulados con SRIM e IMSIL. Nótese que los diferentes simuladores se detallarán en la sección 2.3 de este mismo capítulo. Esta figura nos indica que para conseguir esa caída exponencial observada experimentalmente, es necesario implantar con un cierto ángulo en vez de en condiciones de acanalamiento. La figura muestra que para  $0.6^\circ$  la cola de la distribución de dopantes obtenida computacionalmente es similar a los resultados experimentales.

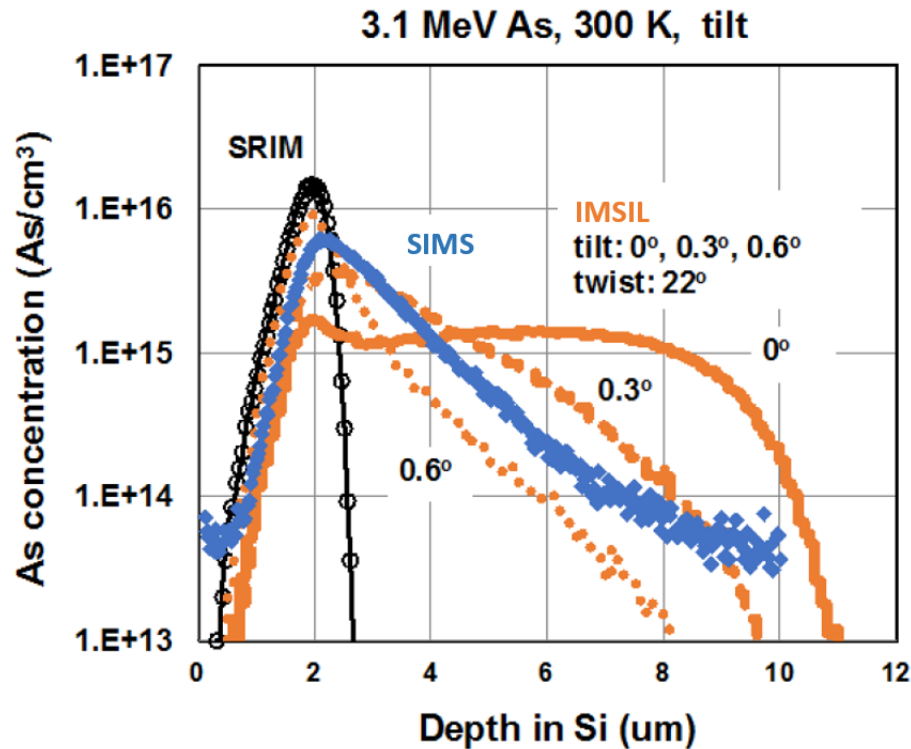


Figura 2.3: Concentración (en  $\text{at}/\text{cm}^3$ ) de As en función de la profundidad (en  $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento y desacanalamiento ( $0.3^\circ$  y  $0.6^\circ$ ) en Si {100} a 3.1 MeV y con una dosis de implantación igual a  $1 \times 10^{12} \text{ at}/\text{cm}^2$ . Datos obtenidos experimentalmente con SIMS en condiciones de acanalamiento (símbolos rellenos de color azul) y computacionalmente con los códigos SRIM (símbolos huecos de color negro) e IMSIL (diversos trazos naranjas) (figura extraída de la referencia [6]).

Aunque en este último caso la energía y la dosis de implantación no es exactamente la misma que en la Figura 2.2, esta comparación indica que independientemente del modelo que usemos, no se describe correctamente la implantación iónica a altas energías. Los experimentos muestran un perfil de dopantes con un pico o una pequeña meseta seguida de una cola exponencial mientras que los modelos predicen un perfil con una meseta mucho más extensa y una caída más abrupta. Esto significa que los modelos predicen un dopado más homogéneo donde gran parte de los iones implantados penetran profundamente en el material blanco. Sin embargo, los experimentos indican que los iones pierden su energía más rápido de lo previsto, se frenan mucho antes y pocos alcanzan la zona profunda. Hay entonces ciertas contribuciones en las pérdidas energéticas del ion que los modelos no están teniendo en cuenta o ciertos mecanismos de desacanalamiento que no se están recogiendo en los modelos existentes.

En la siguiente sección analizaremos los diferentes modelos que describen la interacción de la radiación con la materia para tratar de entender cuáles son estas posibles contribuciones a las que se deben las discrepancias entre los perfiles experimentales y los computacionales.

## 2.2. Modelado de la interacción de la radiación con la materia

A lo largo de la trayectoria que recorre el ion a través del material, se producen pérdidas energéticas debidas a interacciones del ion, tanto su núcleo atómico como la nube electrónica que tiene a su alrededor, con los núcleos y electrones del blanco. Por un lado, el proyectil sufre colisiones con los núcleos atómicos del blanco, durante las cuales pierde parte de su energía cinética de forma elástica transmitiéndosela así al blanco, lo que se conoce como *frenado elástico* o *nuclear*. Por otro lado, el ion pierde otra parte de su energía de manera inelástica interactuando con los electrones del medio a medida que avanza por éste, lo que se denomina *frenado inelástico* o *electrónico*. Este frenado electrónico puede darse cuando los electrones del ion interactúan con los electrones del blanco en una colisión, *frenado local*, o puede ocurrir mientras el ion viaja entre colisiones, *frenado no local*, es decir, cuando el núcleo del ion es decelerado por los electrones del blanco. Esta distinción entre frenado nuclear y electrónico fue propuesta por Bohr en 1948 [21] e implementada por Lindhard, Scharff y Schiott en los años 60 [22]. Además, los iones implantados son partículas cargadas que se desaceleran, por lo que también se emitirá radiación de frenado. Sin embargo, este mecanismo se puede considerar despreciable en las implantaciones iónicas ya que los iones se mueven a velocidades no relativistas [23]. La Figura 2.4 muestra un resumen esquemático de los mecanismos de pérdida de energía de un ion.

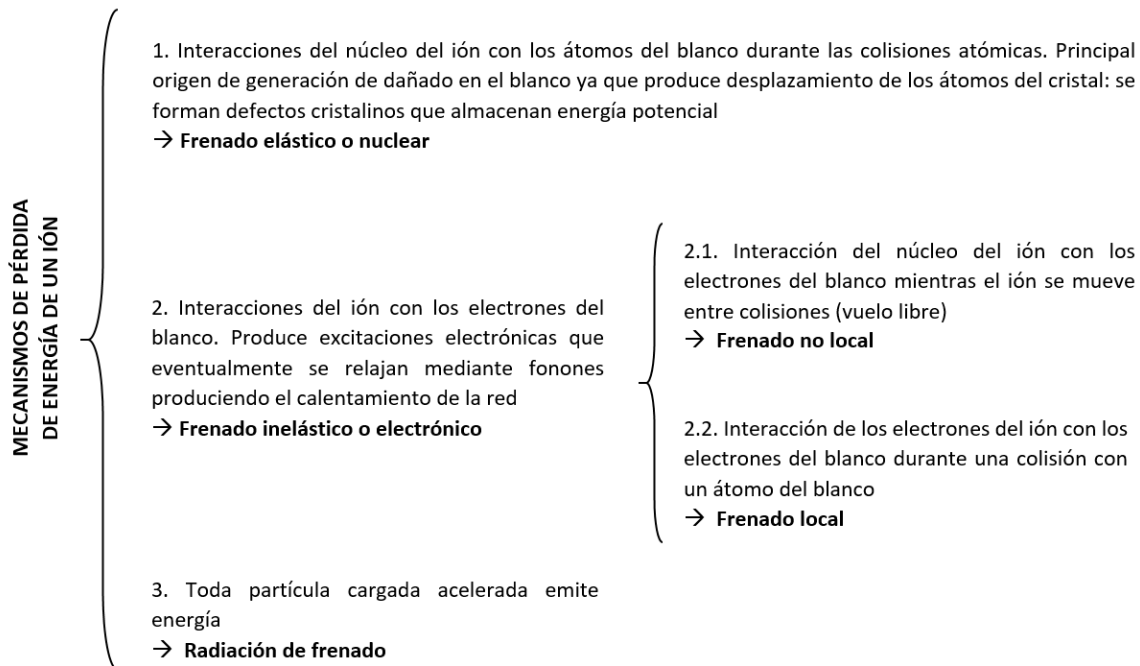


Figura 2.4: Esquema ilustrando los diferentes mecanismos de pérdida de energía de un ion.



### 2.2.1. Frenado elástico o nuclear

Las colisiones nucleares se definen como el choque elástico entre dos partículas, en este caso entre el núcleo de la partícula incidente (ion) y el del átomo del blanco. Durante este choque se produce una transferencia de energía y un cambio en la dirección de movimiento del ion.

En [BCA](#) el potencial de interacción  $V(r)$  entre el ion y el átomo del blanco se considera de tipo coulombiano apantallado:

$$V(r) = \frac{Z_{ion} Z_{blanco} e^2}{r} \phi(r/a_U) \quad (2.1)$$

con  $Z_{ion}$  el número atómico del ion implantado,  $Z_{blanco}$  el del átomo del blanco,  $e$  la carga del electrón y  $\phi(r/a_U)$  la función de apantallamiento. Existen muchas funciones de apantallamiento, como la de Thomas-Fermi o la de Molière, pero la más utilizada es la de [Ziegler-Biersack-Littmark \(ZBL\)](#) [24], también llamada universal, porque ha sido ajustada a un gran número de datos experimentales:

$$\begin{aligned} \phi(r/a_U) = & 0.1818 \exp(-3.2000r/a_U) + 0.50990 \exp(-0.9423r/a_U) \\ & + 0.2802 \exp(-0.4029r/a_U) + 0.02817 \exp(-0.2160r/a_U) \end{aligned} \quad (2.2)$$

siendo  $a_U$  la longitud de apantallamiento universal

$$a_U = \frac{0.8854}{Z_{ion}^{0.23} + Z_{blanco}^{0.23}} a_B \quad (2.3)$$

con  $a_B$  el radio de Bohr.

Tradicionalmente se asume que solo las colisiones elásticas son responsables de la generación de daño durante la implantación iónica. Estos choques se resuelven haciendo uso de la mecánica clásica, mediante las leyes de conservación de la energía y del momento, para evaluar la energía transferida elásticamente a los átomos del blanco. El esquema de la colisión en el sistema de referencia del centro de masas se representa en la Figura 2.5 [7]. Si consideramos que la masa del proyectil es  $M_{ion}$  y su velocidad inicial  $v_{ion}$ , mientras que  $M_{blanco}$  es la masa correspondiente al átomo del blanco (que inicialmente se encuentra en reposo),  $p$  el parámetro de impacto, y que ambos cuerpos interactúan a través del potencial  $V(r)$  (siendo  $r$  la distancia entre ellos), las únicas variables desconocidas son los ángulos de dispersión entre las trayectorias asintóticas de ambas partículas, es decir,  $\theta$  y  $\varphi$ . Una vez conocidas, la energía transferida elásticamente al átomo del blanco viene dada por:

$$T = \frac{4M_{ion}M_{blanco}}{(M_{ion} + M_{blanco})^2} E_0 \sin^2(\theta/2) \quad (2.4)$$

siendo  $E_0$  la energía del ion antes de la colisión [7].

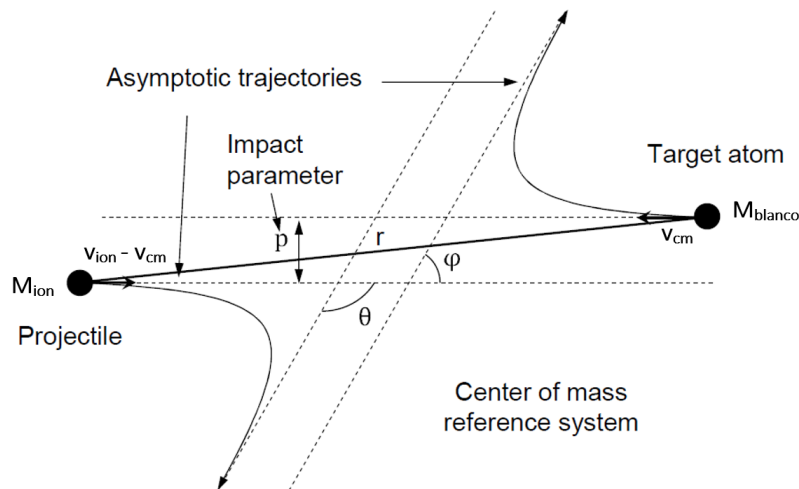


Figura 2.5: Esquema de una colisión binaria desde el sistema de referencia del centro de masas (figura extraída de la referencia [7]).

En las simulaciones de [BCA](#), para transferencias de energía  $T$  por encima de la *energía umbral de desplazamiento*,  $E_d$ , el átomo del blanco se pone en movimiento y crea una subcascada dejando atrás una vacante y generando un intersticial de Si donde se detiene. Así, el daño generado se describe en términos de pares intersticial-vacante, también conocidos como [Pares de Frenkel \(PF\)](#). Si la energía restante del proyectil es inferior a  $E_d$ , el proyectil se para. Para Si, se ha estimado experimentalmente que esta energía umbral de desplazamiento es próxima a 15 eV [4]. Tradicionalmente, esta energía inferior a 15 eV no generaba defectos y pasaba a fonones produciendo calentamiento en la muestra. Sin embargo, modelos mejorados han postulado que esta energía puede producir fusión local y la formación de pequeñas zonas amorfas [25].

### 2.2.2. Frenado inelástico o electrónico

El modelado de la interacción con electrones es mucho más complejo. A continuación, presentaremos los diferentes modelos que describen el frenado electrónico teniendo en cuenta que estas pérdidas energéticas se pueden separar en dos componentes [24, 26]:

1. *Frenado no local*. Aquellas pérdidas energéticas producidas por la interacción del núcleo atómico del ion con los electrones del blanco, ya que los proyectiles (partículas cargadas) se mueven dentro de un medio con electrones.
2. *Frenado local*. Aquellas pérdidas de energía producidas por una transferencia de momento entre los electrones del ion y los del átomo del blanco durante las colisiones.

Durante una interacción inelástica se produce una transferencia de energía pero al contrario que en una colisión elástica, la dirección de movimiento del ion no varía.

### Frenado no local

Estudiando la dependencia del frenado electrónico en función de la velocidad instantánea del ion incidente, se ha demostrado que existen tres regiones bien definidas, tal y como se puede observar en la Figura 2.6 [8]. Observamos que el frenado elástico o nuclear domina a muy bajas energías de implantación y a medida que la energía del ion aumenta, las pérdidas energéticas se deben fundamentalmente al frenado inelástico o electrónico. Se aprecia un aumento lineal del frenado electrónico con la velocidad del ion en la región III (de bajas energías) hasta alcanzar el pico de Bragg (en la región II de transición) y a partir de ahí comienzan a disminuir (región I de altas energías), ya que llega un momento en el que el ion pasa tan rápido que apenas se ve afectado por los campos potenciales de los electrones de la red.

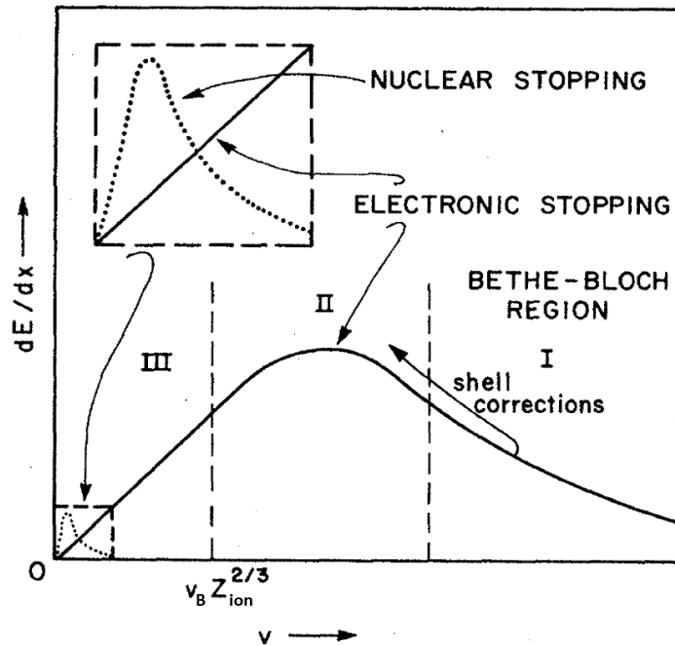


Figura 2.6: Dependencia del frenado electrónico no local con la velocidad del ion (figura extraída de la referencia [8]).

#### REGIÓN I (DE ALTAS ENERGÍAS)

En cuanto al comportamiento del frenado electrónico no local en la región I, es decir, a altas energías (como podría ser en el caso de rayos gamma o partículas alfa), comienzan a aparecer efectos cuánticos y el frenado deja de ser proporcional a la velocidad de la partícula incidente. A altas energías apenas se producen colisiones, ya que los iones pasan tan rápido que no se ven afectados por los campos potenciales de los electrones del medio.

Desde un punto de vista mecanocuántico, el poder de frenado electrónico por unidad de longitud se puede calcular como

$$-\left. \frac{dE_e^{nl}}{dx} \right|_{Bethe} = \mathcal{N} \sum_n \int (E_n - E_0) d\sigma_{0n} \quad (2.5)$$

donde  $\mathcal{N}$  es la densidad atómica del blanco y  $d\sigma_{0n}$  es la sección eficaz de la excitación entre los estados fundamental y n-ésimo excitado del electrón del blanco, con energías  $E_0$  y  $E_n$

respectivamente [27]. Esta sección eficaz puede calcularse con una aproximación perturbativa de primer orden, lo que se conoce como *primera aproximación de Born*. La interacción se describe mediante el hamiltoniano perturbado  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ , donde  $\hat{H}_0$  es el hamiltoniano del sistema electrónico del blanco sin perturbar y  $\hat{H}' = \hat{V} = -\sum_i^N \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|}$  es la perturbación introducida por la interacción entre el proyectil y los  $N$  electrones del blanco. Si la partícula es rápida y su carga no es muy grande, esta perturbación es pequeña y se puede resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en el primer orden perturbativo. Además, para velocidades muy altas del proyectil es válido suponer que la interacción tiene lugar mediante una colisión con un electrón libre y en reposo del blanco, con lo que los cálculos se simplifican y se obtiene la conocida ecuación de Bethe [16]

$$-\left. \frac{dE_e^{nl}}{dx} \right|_{Bethe} = \frac{\omega_p^2}{v_{ion}^2} \ln \left( \frac{2v_{ion}^2}{\omega_p} \right) \quad (2.6)$$

donde  $\omega_p = (3/r_s^3)^{1/2}$  es la frecuencia del plasma del gas de electrones. El frenado electrónico no local sería entonces la integral de esta expresión a lo largo de toda la trayectoria del ion.

Si la velocidad de la partícula incidente es próxima a la velocidad de la luz, es necesario hacer uso de correcciones relativistas [28].

### REGIÓN III (DE BAJAS ENERGÍAS)

Analicemos ahora el frenado electrónico en la región III de bajas energías, región en la cual se producen las colisiones entre el ion y los electrones de la red. En esta zona, la probabilidad de captura del electrón aumenta y es necesario entonces incluir correcciones sobre las capas electrónicas de los átomos del blanco [8]. Bohr [29] sugirió que un electrón del blanco se liga al ion si la velocidad del ion es menor que la velocidad orbital del electrón en su estado ligado. Para el primer electrón K, la velocidad crítica es  $\sim v_B Z_{ion}$ , donde  $v_B$  es la velocidad de Bohr. Para los electrones más externos, la velocidad crítica es  $v_B$  y para un ion con carga  $Q$ , Bohr propuso una velocidad crítica de valor  $Qv_B/Z_{ion}$ . Este criterio de Bohr se ha mejorado y actualmente se considera que la velocidad crítica de un ion con carga  $Q$  viene dado por la velocidad de Thomas-Fermi  $v_B Z_{ion}^{2/3}$ , que es el límite que aparece en la Figura 2.6.

Existen dos teorías que tratan de explicar el frenado electrónico no local en esta región, la teoría de [Lindhard-Scharff-Schiott \(LSS\)](#) y la de [Brandt-Kitagawa \(BK\)](#).

La teoría [LSS](#) [22] fue la primera en la que se distinguieron los diferentes mecanismos que intervienen en el frenado del ion, es decir, la separación entre las pérdidas nucleares y las electrónicas. En esta teoría el frenado electrónico no local es proporcional a la velocidad del ion

$$-\left. \frac{dE_e^{nl}}{dx} \right|_{LSS} = k_L \sqrt{E} \quad (2.7)$$

donde el coeficiente  $k_L$  tiene la siguiente forma

$$k_L = \frac{1.216007 Z_{ion}^{7/6} Z_{blanco}}{\left( Z_{ion}^{2/3} + Z_{blanco}^{2/3} \right)^{3/2} M_{ion}^{1/2}} \quad (2.8)$$

En este modelo las pérdidas electrónicas no locales no dependen de la dirección de avance ni de las colisiones que tenga. Es un modelo que presupone que el ion se mueve en un gas

de electrones uniforme. Se trata entonces de una teoría promedio que no tiene en cuenta las propiedades de la red cristalina, sino que la considera isótropa.

En cuanto al modelo de BK, para modelar correctamente esta inhomogeneidad de la densidad electrónica del material sobre el que se implanta, se emplea la *Local Density Approximation* (LDA) que supone que el proyectil atraviesa un gas de electrones cuya densidad varía muy lentamente, de manera que se puede considerar localmente constante [30]. Dentro de dicha aproximación, el cálculo de las pérdidas energéticas no locales,  $\Delta E_e^{nl}$ , consta de dos pasos. El primero de ellos consiste en cuantificar el *frenado electrónico del protón*, es decir, las pérdidas energéticas por unidad de longitud de un protón,  $\left(-\frac{dE_p}{dx}\Big|_e\right)$ , que se mueve a la misma velocidad que nuestro ion en un gas de electrones uniforme cuya densidad electrónica,  $\rho(\mathbf{x})$ , es la misma que encontraría nuestro ion en el material blanco. Para ello, se emplea el modelo teórico de Echenique et al. [31]. Y, dado que los iones utilizados en las implantaciones son más pesados que un protón, el siguiente paso consiste en hacer uso de las reglas de escalado del modelo de BK [32] para obtener el *factor de escalado o carga efectiva del ion*,  $Z_{ion}^*$ . Así pues, las pérdidas energéticas no locales de un ion que se desplaza con velocidad constante  $v_{ion}$  se expresarán como:

$$\Delta E_e^{nl} = \int_{trayectoria} [Z_{ion}^*(v_{ion}, r_s)]^2 \left(-\frac{dE_p}{dx}\Big|_e\right) dx \quad (2.9)$$

donde la integral recorre toda la trayectoria del ion y  $r_s$  es el radio de un electrón, entendiendo como tal el radio de una esfera que en su volumen contenga una carga eléctrica igual a la de un electrón, calculado a partir de la densidad electrónica del blanco  $r_s = [3/(4\pi\rho(\mathbf{x}))]^{1/3}$ .

Dado que la carga efectiva del ion es función de la densidad electrónica del material y, por tanto, del radio de un electrón, podemos encontrar un valor medio  $r_s^0$  de  $r_s$  tal que la ecuación (2.9) se pueda reescribir como:

$$\Delta E_e^{nl} = [Z_{ion}^*(v_{ion}, r_s^0)]^2 \int_{trayectoria} \left(-\frac{dE_p}{dx}\Big|_e\right) dx \quad (2.10)$$

Si la carga efectiva es una función que varía muy lentamente en el espacio, el valor de  $r_s^0$  nos daría entonces una idea del número promedio de electrones libres contenidos en ese gas de electrones y nos permitiría determinar la *superficie de Fermi*. A partir de aquí, podemos enunciar la siguiente relación entre la velocidad de Fermi y  $r_s^0$

$$v_F = \frac{1}{\alpha r_s^0} v_B \quad (2.11)$$

donde  $\alpha = [4/(9\pi)]^{1/3}$ . Nótese que a lo largo de toda la memoria se emplean unidades atómicas, luego  $v_B = 1$ . Notemos que  $r_s^0$  es el único parámetro ajustable en el modelo.

Para poder describir entonces este modelo de frenado no local con detalle, habrá que abordar tres puntos: el frenado electrónico del protón, el factor de escalado o carga efectiva del ion y la densidad electrónica del material.

### Frenado electrónico del protón

Como se puede observar en la Figura 2.6, en la región de bajas energías el frenado no local es, aproximadamente, proporcional a la velocidad del ion. La expresión de las pérdidas energéticas se puede escribir entonces como

$$-\left. \frac{dE_p}{dx} \right|_e = f(r_s) \frac{v_{ion}}{v_F} \quad (2.12)$$

donde  $v_F$  es la *velocidad de Fermi* de los electrones del gas (que es proporcional a  $v_B$ , como se mostrará más adelante) y  $f(r_s)$  es una constante de proporcionalidad que solo depende de  $r_s$  y que denominamos *factor de proporcionalidad*.

Diversos autores han tratado de encontrar este factor de proporcionalidad  $f(r_s)$ . El primero de ellos fue Ritchie [33] y se basó en la teoría de respuesta dieléctrica lineal obteniendo así la siguiente expresión

$$f_R(r_s) = \frac{2v_F}{3\pi} \left[ \ln(1 + \pi v_F) - \left(1 + \frac{1}{\pi v_F}\right)^{-1} \right] \quad (2.13)$$

Unos años más tarde, Lindhard y Winther [34] utilizaron una aproximación ligeramente distinta y obtuvieron

$$f_{LW}(r_s) = \frac{2v_F}{3\pi} \left\{ \ln \left[ \pi v_F \left(1 + \frac{2}{3\pi v_F}\right) \right] - \frac{3\pi v_F - 1}{3\pi v_F + 2} \right\} \left(1 - \frac{1}{3\pi v_F}\right)^{-2} \quad (2.14)$$

Sin embargo, no fue hasta 1986 con la publicación de los resultados de estudios *ab initio* de Echenique et al. [31] que se demostró que la teoría de respuesta lineal tan solo describía correctamente el frenado no local para velocidades del protón mayores que la velocidad de Fermi. Para velocidades por debajo de la velocidad de Fermi se necesitaba hacer uso de la teoría no lineal. Por ello, estos autores emplearon la **Density Functional Theory (DFT)** para resolver la ecuación de Schrödinger y obtener así la densidad electrónica alrededor del protón. A partir de ella, calcularon el potencial de apantallamiento debido a la interacción entre el protón y los electrones del gas para finalmente, calcular el frenado no local como un fenómeno de dispersión de los electrones por dicho potencial. En la Figura 2.7 se muestran los resultados de Echenique et al. junto con los factores de corrección de Ritchie y Lindhard-Winther. Puede verse que ninguno de los dos factores de corrección describe adecuadamente los resultados de Echenique.

El resultado de la teoría de Echenique et al. no tenía una expresión sencilla como las vistas anteriormente. En su lugar, el correspondiente factor de proporcionalidad debía obtenerse a partir de una función de ajuste y el primer autor que trató de ajustar estos puntos fue Azziz et al. [35] a partir de la teoría de Ritchie. Posteriormente, en 1995 se publicó la tesis doctoral de J. Arias [30] donde aparecía una función que proporcionaba un mejor ajuste a los resultados de Echenique et al. y que permite obtener el factor de proporcionalidad a partir de la teoría de Lindhard-Winther:

$$f_{JA}(r_s) = f_{LW}(r_s) \left\{ 1.644 \exp \left[ \frac{-(r_s - 2.197)^2}{15.8} \right] \right\} \quad (2.15)$$

Esta expresión presenta ciertas ventajas desde el punto de vista numérico, además de un buen ajuste a la teoría de Echenique et al. Entre ellas, cabe destacar que por tratarse de una gaussiana, el factor  $f_{JA}(r_s)$  siempre es positivo mientras que en la aproximación de Azziz et

al., el factor  $f_A(r_s)$  puede tomar valores negativos, lo que en las simulaciones implicaría que se produce una aceleración de los proyectiles en vez de su frenado.

Por último, Cai et al. [36] han obtenido otro factor de proporcionalidad. Estos autores tratan de corregir la constante de proporcionalidad de Ritchie, y no la de Lindhard-Winther, de manera que

$$f_C(r_s) = f_R(r_s) G(r_s) = f_R(r_s) [1.00 + 0.717r_s - 0.125r_s^2 - 0.0124r_s^3 + 0.00212r_s^4] \quad (2.16)$$

Se puede observar que, efectivamente, los factores de proporcionalidad calculados por J. Arias y Cai et al. se ajustan especialmente bien, sobre todo el de Cai et al. para valores de  $r_s$  próximos a 1.

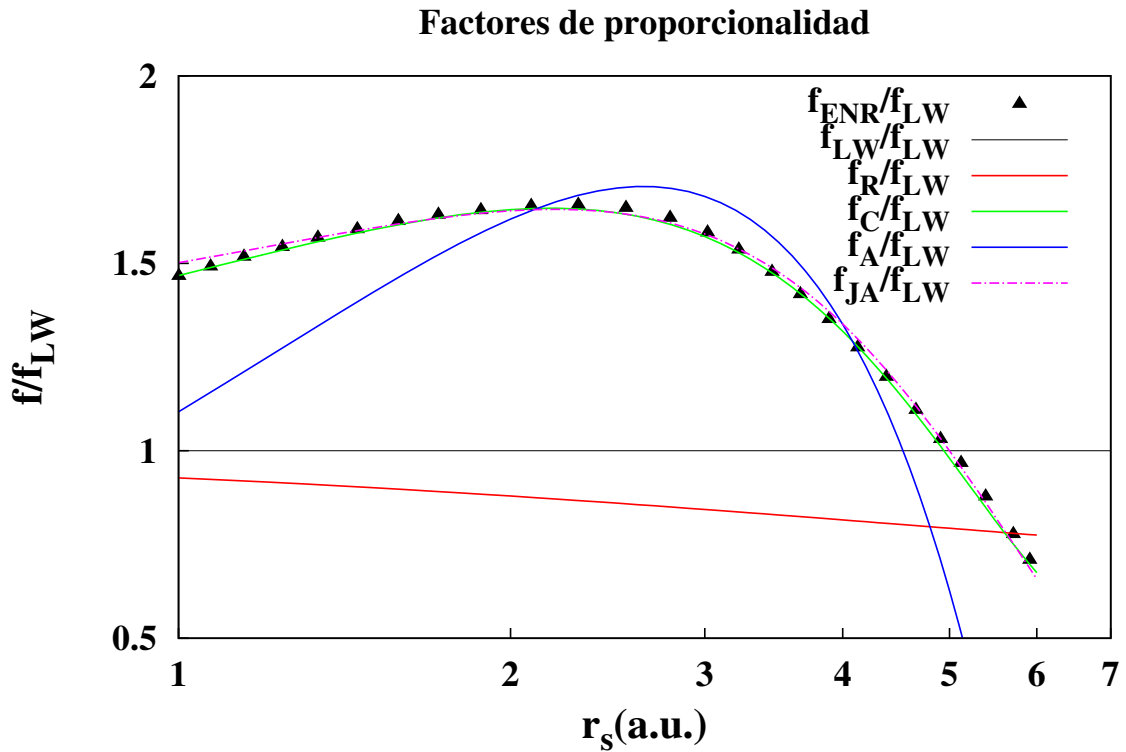


Figura 2.7: Comparativa de varias aproximaciones al método teórico desarrollado por Echenique et al. para el frenado electrónico del protón. Los símbolos rellenos representan los puntos obtenidos por Echenique et al. y las líneas continuas los diferentes ajustes.

#### Factor de escalado o carga efectiva del ion

El ion puede ganar o perder electrones a medida que atraviesa el material blanco. El valor de su carga es lo que se denomina *carga efectiva* y dicho concepto fue introducido por primera vez en la descripción del modelo atómico de Bohr [14].

La teoría BK modela la carga efectiva del ion según la expresión

$$Z_{ion}^* = Z_{ion} \gamma(v_{ion}, \bar{r}_s) \quad (2.17)$$

y haciendo uso de la ecuación (2.10) descrita anteriormente, esta dependencia con  $\bar{r}_s$  se identifica con la dependencia del valor medio  $r_s^0$ . En consecuencia, la carga efectiva  $Z_1^*$  tiene un carácter no local, espacialmente, y depende entonces de la superficie de Fermi. En cuanto al parámetro  $\gamma(v_{ion}, \bar{r}_s)$ , éste se denomina *fracción de carga efectiva* y en la teoría BK viene dado por

$$\gamma(v_{ion}, \bar{r}_s) = q(v_{ion}) + C(\bar{r}_s)(1 - q(v_{ion})) \ln \left[ 1 + \left( \frac{4\Lambda}{\bar{r}_s} \right)^2 \right] \quad (2.18)$$

donde  $q$  es el *estado de carga* o la *fracción de ionización* del ion, que es la relación entre su carga y su número atómico,  $q = Q/Z_{ion} = (Z_{ion} - N)/Z_{ion}$ . En el caso del protón, suponemos  $q = 1$ . En cuanto al parámetro  $C(\bar{r}_s)$ , éste depende del blanco y tiene un valor próximo a 0.5.

En esta teoría se emplea un modelo estadístico simple para describir la carga efectiva del ion, de manera que se considera que un ion con  $N = Z_{ion} - Q$  electrones ligados contiene una densidad de carga con simetría esférica de la forma

$$\rho_e = \frac{N}{4\pi\Lambda^2 r} \exp\left(-\frac{r}{\Lambda}\right) \quad (2.19)$$

suponiendo que la carga electrónica se extiende hasta un radio  $\Lambda$  desde el núcleo del ion. Este parámetro  $\Lambda$  depende de la fracción de ionización, de manera que los electrones del medio que sufran colisiones con un parámetro de impacto mayor que  $\Lambda$  encontrarán un ion con una carga  $Q$  mientras que si el parámetro de impacto es menor, los electrones del blanco verán una carga apantallada  $qZ_{ion}$ .

Para calcular la energía total de los electrones se ha de tener en cuenta por un lado, la energía de Coulomb ya que los electrones se encuentran sometidos al campo eléctrico del núcleo y por otro lado, la interacción electrón-electrón derivada de la aproximación de Hartree. Haciendo uso de una aproximación variacional en la que se minimiza la energía total de los electrones, se llega a la siguiente dependencia del tamaño del ion con la fracción de ionización

$$\Lambda = \frac{2a_0(1 - q)^{2/3}}{Z_{ion}^{1/3}[1 - (1 - q)/7]} \quad (2.20)$$

donde  $a_0 = 0.24005$ . Es posible encontrar el cálculo detallado de esta expresión en la referencia [32].

Por último, nos queda por evaluar la fracción de carga del ion. Según el criterio de Bohr [29], el ion se desprende de aquellos electrones cuya velocidad orbital sea menor que la velocidad del ion. Sin embargo, este criterio ha sido revisado por Kreussler, Varelas y Brandt [37] y afirman que el ion se desprende de aquellos electrones cuya velocidad orbital es menor que la velocidad relativa entre el ion y los electrones del medio. Esta velocidad relativa  $v_r$  se obtiene calculando el promedio entre la velocidad del ion  $v_{ion}$  y la velocidad de los electrones  $v_e$ , suponiendo que los electrones de conducción están en un gas de electrones libres. Así, la fracción de ionización se puede expresar como

$$q = 1 - \exp\left(0.803y_r^{0.3} - 1.3167y_r^{0.6} - 0.38157y_r - 0.008983y_r^2\right) \quad (2.21)$$

la cual ha sido obtenida experimentalmente por Ziegler, Biersack y Littmark [24], tomando como variable de escalado de la velocidad relativa

$$y_r = \frac{v_r}{v_B Z_1^{2/3}} \quad (2.22)$$



### Densidad electrónica del material

El último elemento que nos falta para completar la descripción del modelo BK es la distribución de carga  $\rho(\mathbf{x})$  para los átomos que constituyen la red cristalina del blanco. Existen tres diferentes representaciones de la distribución de carga:

1. *Densidad electrónica radial*. Es una distribución de carga atómica Hartree-Fock de estado sólido, que tiene simetría esférica ya que está promediada en todas las direcciones del cristal.
2. *Densidad electrónica 3D*. Es una densidad de carga de estado sólido que no ha sido promediada y que representa el mapeado tridimensional de los enlaces existentes entre los diferentes átomos de la red cristalina calculados via el método de energía total con pseudo-potenciales ab-initio.
3. *ISolated atom Density Superposition (ISDS)*. Esta distribución de carga está formada por la superposición de densidades 3D de átomos aislados previamente calculadas con el programa GAMESS [38].

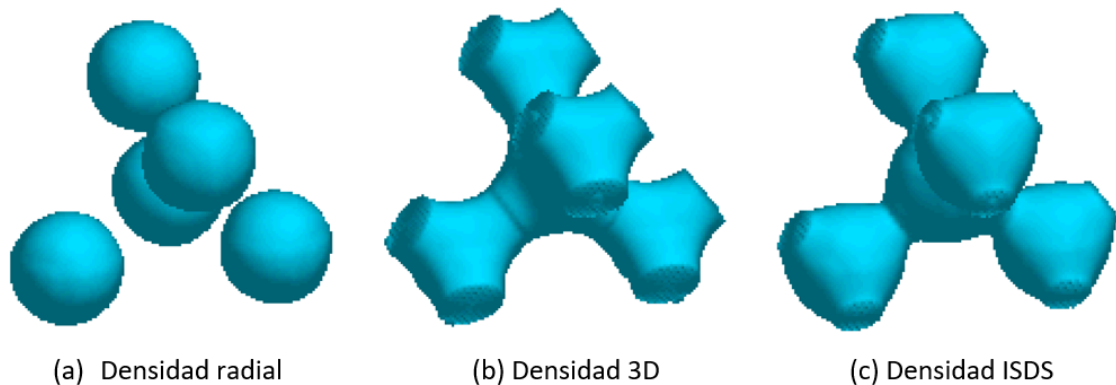


Figura 2.8: Isosuperficies que representan las diferentes densidades electrónicas (figura extraída de la referencia [7]).

## REGIÓN II (DE TRANSICIÓN)

En cuanto a la región II, realmente no hay una teoría que describa la transición de bajas a altas energías, por lo que cada código [BCA](#) lo hace de una manera diferente. Por ejemplo, el código [IIS](#) lo resuelve de la siguiente manera: para cada densidad electrónica, es decir, para cada valor de  $r_s$ , se calcula la energía correspondiente al máximo de las pérdidas energéticas, que será aquel valor de la energía para el cual los dos modelos (el de bajas y el de altas energías) den las mismas pérdidas. Para aquellas energías que sean inferiores a dicho valor se utilizará el modelo de bajas energías, mientras que para aquellas que sean superiores se empleará la fórmula de Bethe. Esto se ejemplifica en la Figura 2.9 para el caso de un protón [7].

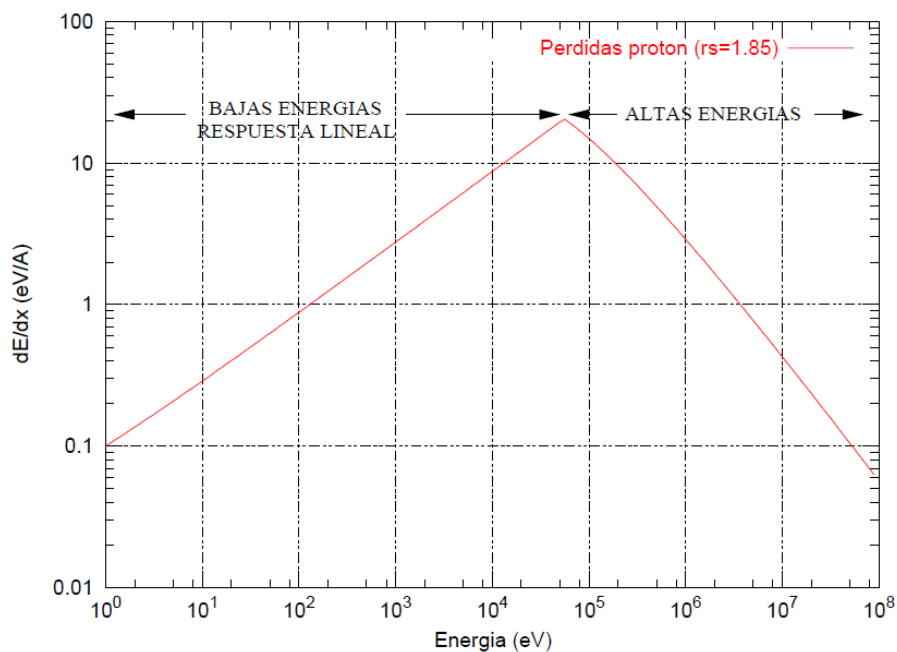


Figura 2.9: Pérdidas energéticas por unidad de longitud (en  $\text{eV}/\text{Å}$ ) para un protón contenido en un gas de electrones con  $r_s = 1.85$  a.u. en función de su energía (en eV) (figura extraída de la referencia [7]).

Por otra parte, en el código Sentauros Atomistic se usa una expresión que recoge la zona de energías bajas, medias y altas [5].

Además de estos modelos que tratan de describir el frenado electrónico no local tanto en materiales amorfos como cristalinos, se encuentran [TRIM](#) y [SRIM](#) [24], que son ajustes a un gran número de datos experimentales realizados sobre materiales amorfos.

Conviene destacar que, a pesar de que las referencias mencionadas a lo largo de esta sección son bastante antiguas, el adecuado modelado del frenado electrónico es un tema de gran interés actualmente, como indican los trabajos del grupo de Sigmund [39, 40, 41, 42].

### Frenado local

El frenado electrónico local, como ya mencionamos al comienzo de este capítulo, es la energía transferida directamente a los electrones del blanco durante la colisión del ion con el átomo del blanco. Este frenado tan solo aparecería en la región III de bajas energías de la Figura 2.6 ya que, a diferencia de las pérdidas electrónicas no locales que se producen durante el vuelo libre (es decir, durante el viaje entre colisiones), estas pérdidas locales se dan durante la propia colisión atómica. Para modelar estas pérdidas energéticas, se suelen emplear los modelos de [Oen-Robinson \(OR\)](#) [43] y [Firsov](#) [44].

Por un lado, [OR](#) estima que las pérdidas energéticas locales son proporcionales al frenado electrónico no local descrito por el modelo [LSS](#) junto con un decaimiento exponencial:

$$\Delta E_e^{loc} \propto - \left. \frac{dE_e^{nl}}{dx} \right|_{LSS} \exp(-p/a) \quad (2.23)$$

donde  $a$  se define como el parámetro de apantallamiento, con dimensiones de longitud. Esta expresión nos indica que cuanto más cerca estén los electrones del proyectil de los del átomo blanco, es decir, cuanto menor sea el parámetro de impacto de la colisión, mayor transferencia de energía habrá a los electrones del blanco. Y, al contrario, cuanto más alejados se encuentren los respectivos electrones, menor será la transferencia de energía. El problema de este modelo es que únicamente depende del parámetro de impacto y no tiene en cuenta las propiedades del medio a lo largo de la trayectoria del ion.

Por otro lado, [Firsov](#) evalúa la energía de excitación media que se transmite a los electrones del blanco durante las colisiones. Con el método de [Firsov](#), las pérdidas energéticas se determinan mediante un cálculo del flujo neto de electrones a través de un plano construido como se muestra esquemáticamente en la Figura 2.10 perpendicularmente a la línea que une los dos núcleos implicados en la colisión [44]. Para poder asumir que esta superficie es, aproximadamente, perpendicular al vector  $\vec{R}$ , es necesario que los números atómicos  $Z_{ion}$  y  $Z_{blanco}$  no difieran en más de un factor 4. Teniendo esto en cuenta, se supone que cuando un electrón pasa del campo potencial de un átomo al del otro, es decir, cuando cruza el plano  $S$ , hay una transferencia de momento igual a  $m_e v$ , donde  $v$  es la velocidad relativa del ion con respecto a la velocidad del gas de electrones. [Firsov](#) calcula la densidad de electrones  $n_e$  y su velocidad media  $v'$  en la superficie  $S$  haciendo uso del modelo de [Thomas-Fermi \(TF\)](#), y estima que la pérdida total de energía inelástica local en una colisión viene dada entonces por la integral del flujo de electrones a través de la superficie  $S$ , obteniendo así

$$\Delta E_e^{loc} = \frac{4.3 \cdot 10^{-8} (Z_{ion} + Z_{blanco})^{5/3} v}{[1 + 0.31 (Z_{ion} + Z_{blanco})^{1/3} p]^5} \quad (2.24)$$

con  $v$  en  $cm/s$  y  $p$  en  $\text{Å}$ .

[Kishinevskii](#) [45] logró modificar esta expresión para suprimir la limitación del factor 4 de los números atómicos. Esta expresión es la que emplean [Schinner](#) y [Sigmund](#) en su código [DPASS](#) [46].

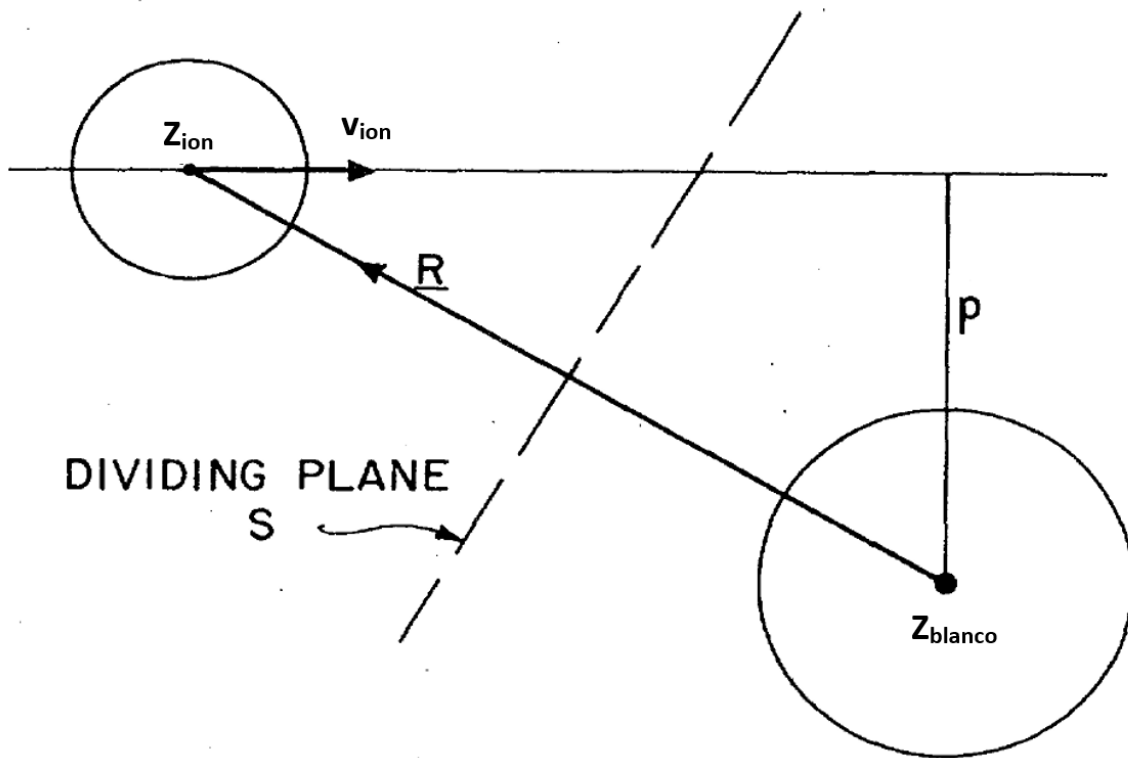


Figura 2.10: Ilustración de los parámetros envueltos en el cálculo del frenado electrónico local con el método de Firsov (figura extraída de la referencia [8]).

### Síntesis de los modelos de frenado electrónico

Una vez que ya hemos analizado los diferentes modelos que se emplean para tratar de describir la interacción de la radiación con la materia. Recordemos que este trabajo se centra en el estudio del frenado electrónico en la región III de bajas energías, ya que es en dicho rango de energías en el que se producen colisiones entre el ion y los átomos del blanco. Nótese que aunque ahora hablemos de bajas energías para referirnos a las región III de la Figura 2.6, se trata de energías de implantación que van desde cientos o miles de keV hasta decenas de MeV. Un resumen de los modelos que describen el frenado electrónico en este rango de energías se muestra en la Tabla 2.1.

Región III (bajas energías)			
Frenado electrónico	Modelo	Ventajas	Inconvenientes
Frenado no local	LSS [22]	No utiliza la LDA ya que el frenado es proporcional a la velocidad del ion e independiente de su dirección de avance, por lo que es menos costoso computacionalmente.	No tiene en cuenta la anisotropía del medio.
	BK [32]	Tiene en cuenta la anisotropía del medio, lo cual es clave para trabajar en condiciones de acanalamiento.	Más costoso computacionalmente porque emplea la LDA. Además, es necesario calcular el frenado electrónico del protón y después escalarlo al ion que se desea implantar.
	TRIM/SRIM [24]	Ajustados a muchos datos experimentales.	Válidos únicamente para simulaciones en implantaciones con materiales amorfos.
Frenado local	OR [43]	Menor coste computacional	Menor fundamento físico porque estima que el frenado es proporcional al frenado electrónico de LSS junto con un decaimiento exponencial.
	Firsov [44]	Modelo semiempírico, mayor fundamento físico.	Mayor coste computacional porque tiene que calcular el flujo neto de electrones.

Tabla 2.1: Diferentes modelos que se emplean para describir tanto el frenado electrónico no local como local en el rango de bajas energías (desde cientos o miles de keV hasta decenas de MeV).

Por último, veamos cuál es el efecto del frenado electrónico. Para comprenderlo, es clave tener en mente el diagrama de bandas del Si (Figura 2.11) [9]. Recordemos que el gap del Si es indirecto, es decir, que el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia no se dan para el mismo valor del momento  $k$ . En este caso, el electrón necesita por una parte, ganar energía igual al ancho de la banda prohibida para pasar de la banda de valencia a la banda de conducción y además, cambiar el vector de onda del electrón.

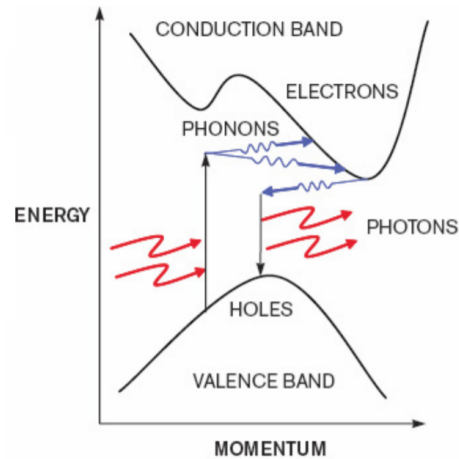


Figura 2.11: Diagrama de bandas del Si, en el que se representa la energía  $E$  en función del momento  $k$  (figura extraída de la referencia [9]).

Cuando el núcleo del ion implantado realiza el vuelo libre, éste sufre una deceleración por la presencia de los electrones del Si y por tanto, se emite radiación. Esta radiación es absorbida por los electrones de valencia del Si de manera que éstos son excitados y en consecuencia, saltan a niveles de mayor energía en la banda de conducción. En estas transiciones se debe conservar la energía y el momento:

$$E_{ef} = E_{ei} \pm E_{cuanto}$$

$$k_{ef} = k_{ei} \pm k_{cuanto}$$

con el signo + cuando se absorbe un cuanto y el - cuando se emite [9].

Todas estas pérdidas electrónicas excitan electrones del blanco:

- Por un lado, las locales a los electrones del átomo con el que se colisiona.
- Por otro lado, las no locales al sistema electrónico en general. En este caso, existen modelos en los que estas pérdidas electrónicas calientan el sistema electrónico, que al relajarse mediante la interacción electrón-fonón calientan la red, que puede llegar a fundir localmente si las condiciones son las adecuadas. Esta es la aproximación fundamental del **Two-Temperature Model (Modelo de Dos Temperaturas) (TTM)** [47, 48]. Este modelo permite explicar la formación de daño en materiales aislantes asociada a las pérdidas por frenado electrónico.

## 2.3. Simuladores atomísticos

Seguidamente describiremos brevemente los diversos simuladores existentes basados en la técnica de simulación [BCA](#). No obstante, si el lector busca una lectura más extensa sobre los métodos de simulación mencionados a lo largo de la memoria, puede consultar la referencia [\[11\]](#).

En función de si el material blanco es amorfo o cristalino, se han desarrollado dos modelos para tratar el problema de la implantación iónica.

Por un lado, [TRansport of Ions in Matter \(TRIM\)](#) y [Stopping and Range of Ions in Matter \(SRIM\)](#) son dos versiones diferentes de un mismo programa, el cual fue escrito por Ziegler, Biersack y Littmark [\[24\]](#) en 1985. Estos códigos permiten simular la implantación iónica únicamente en materiales amorfos. Utilizan el concepto de recorrido libre medio para la generación aleatoria de átomos blancos y el cálculo de las pérdidas electrónicas se hace mediante funciones ajustadas a datos experimentales. Es por eso, que reproduce bastante bien los experimentos en las condiciones en que ha sido ajustado [\[7\]](#).

Por otro lado, [MARLOWE](#) [\[49, 50\]](#) fue el primer programa que simuló la implantación iónica en materiales cristalinos en los que el material presentaba canales y el comportamiento de los proyectiles en su interior no era isótropo. Escrito por M.T. Robinson et al. en lenguaje FORTRAN, permite también la implantación en materiales amorfos. Emplea modelos de frenado poco elaborados y que requieren un buen número de parámetros ajustables para cada condición de implantación, proyectiles, etc. En particular, el frenado electrónico no local se modela con [LSS](#) y el local con [OR](#). En esta aproximación y al contrario que en [TRIM/SRIM](#), se busca una aproximación lo más detallada posible de lo que ocurre dentro del cristal, aunque dentro de la *grosera* aproximación de las colisiones binarias. Este programa ha dado lugar a multitud de versiones y modificaciones como, por ejemplo, el código [IIS](#) y el código Sentaurs Atomistic que comercializa Synopsys Inc. Además, estos códigos combinan [BCA](#) con [Kinetic Monte Carlo \(KMC\)](#) para simular en un tiempo razonable el proceso de la implantación iónica y posterior recocido térmico en la simulación de procesos tecnológicos completos en la fabricación de uniones en dispositivos electrónicos.

El programa [IIS](#) se desarrolló durante la realización de la tesis doctoral de Jesús M. Hernández-Mangas [\[7\]](#) en el Departamento de Electricidad y Electrónica de la Universidad de Valladolid. Trata el frenado electrónico no local a partir del modelo de [BK](#) y calcula las pérdidas electrónicas locales según el método de Firsov.

Otra versión modificada del programa [MARLOWE](#) fue propuesta en 2003 por Tian [\[5\]](#) y constituye el código Sentaurs Atomistic, comercializado por Synopsys Inc. Este modelo es una combinación del modelo de [LSS](#), que describe el frenado electrónico no local, y el modelo de [OR](#) modificado, para la parte local. Para cada una de las colisiones que sufre el ion a lo largo de su trayectoria, las pérdidas energéticas debidas al frenado inelástico total vienen

dadas por:

$$\Delta E_e = \Delta E_e^{nl} + \Delta E_e^{loc} \quad (2.25)$$

$$\Delta E_e^{nl} = NLS_e \left[ x^{nl} + x^{loc} \left( 1 + \frac{p_{max}}{a} \right) \exp \left( -\frac{p_{max}}{a} \right) \right] \quad (2.26)$$

$$\Delta E_e^{loc} = S_e \frac{x^{loc}}{2\pi a^2} \exp(-p/a) \quad (2.27)$$

donde  $x^{nl} + x^{loc} = 1$ ,  $0 \leq x^{nl} \leq 1$  y  $0 \leq x^{loc} \leq 1$ .  $N$  y  $L$  son las densidades atómicas del material blanco y la longitud de la trayectoria de vuelo del proyectil, respectivamente.  $p_{max}$  es el máximo parámetro de impacto, que se elige para ser la mitad de la constante de red.  $a = fa_U/0.3$ , siendo  $f$  un parámetro que depende del ion implantado tal que

$$f = \frac{1.45}{Z_{ion}^{2/5}} \quad (2.28)$$

La particularidad de este modelo es que extiende el cálculo del frenado electrónico no local con el modelo LSS (ecuaciones (2.7) y (2.8)) a altas energías para incluir así el pico de Bragg. Esta contribución viene dada por el término

$$S_e = \alpha k_{LS} \sqrt{E_m} \times \left[ \frac{1}{[E/E_m \ln(E/E_m + E_m/E + e - 2)]^{\delta/2} + (E_m/E)^{\delta/2}} \right]^{1/\delta} \quad (2.29)$$

donde  $e$  es la base del logaritmo natural,  $\delta (= 1.425)$  un parámetro de ajuste y  $\alpha$  un factor de corrección tal que para  $E \ll E_m$ ,  $\alpha = 1$ .  $E_m$  es el valor de la energía para el cual se obtiene el máximo de las pérdidas energéticas (el máximo en la Figura 2.9).

En la Tabla 2.2 se muestra un resumen de los principales programas de simulación basados en BCA.

Técnica de simulación BCA			
Simulador	Material	Frenado electrónico no local	Frenado electrónico local
MARLOWE	Cristal/Amorfo	LSS	OR
Sentaurus	Cristal/Amorfo	LSS	OR modificado
IIS	Cristal/Amorfo	BK	Firsov
TRIM/SRIM	Amorfo	Fit	

Tabla 2.2: Simuladores atomísticos basados en la técnica de simulación BCA.



## Capítulo 3

# Metodología

En el capítulo anterior hemos descrito las diversas teorías existentes que tratan de explicar la interacción de la radiación con la materia durante el proceso de la implantación iónica. Debemos reparar en que esto ha implicado una lectura bibliográfica de las principales referencias sobre este asunto, lo cual nos ha permitido entender los fundamentos físicos de estos modelos y tratar de identificar las posibles limitaciones de los mismos.

Además de una revisión bibliográfica, hemos analizado los datos proporcionados por la empresa Applied Materials, obtenidos con el código Sentaurus Atomistic, y los hemos comparado con los resultados de nuestras propias simulaciones atomísticas realizadas con el código IIS y bajo las mismas condiciones experimentales. A pesar de que ambos códigos muestran discrepancias entre los perfiles de impurezas obtenidos computacional y experimentalmente (Figura 2.2), al menos el código IIS se fundamenta en el modelo BK para simular el frenado electrónico no local que, a diferencia del modelo LSS, sí tiene en cuenta la anisotropía del medio, lo cual es una condición más que necesaria para modelar implantaciones acanaladas.

El simulador IIS implementado se ha escrito en lenguaje C++ y su funcionamiento, basado en la técnica BCA, se esquematiza en la Figura 3.1. A medida que el proyectil se desplaza por el material implantado, se buscan los posibles blancos entre los átomos más próximos. Por un lado, puede ocurrir que no se encuentren átomos vecinos, por lo que el proyectil seguirá su trayectoria y sufrirá pérdidas por vuelo libre, ya que el núcleo se verá decelerado debido a la presencia de electrones en el blanco. Otra posibilidad es que existan átomos vecinos, en este caso el ion colisionará con ellos y el código calculará las pérdidas energéticas nucleares y electrónicas debidas al choque. Durante las colisiones elásticas, si la transferencia de energía,  $T$ , al átomo del blanco es superior a la energía de enlace,  $E_b$ , el átomo será arrancado de su posición de red y se generará una subcascada. Si esta transferencia de energía es menor que la energía de enlace, el átomo permanecerá en reposo. En cuanto al proyectil, si la energía restante,  $E_{ion}$ , es inferior a la energía umbral de desplazamiento,  $E_d = 15$  keV, el programa considera que el ion se ha frenado, pone fin a la cascada y se pregunta si quedan más iones por implantar. Si la respuesta es negativa, se pone fin a la simulación pero si es positiva, se lanza otra cascada. Si, por el contrario, la energía restante del ion es superior a la energía umbral de desplazamiento, se repite el proceso completo de búsqueda de vecinos para calcular sus posibles colisiones. El programa finaliza cuando todos los iones implantados se encuentren parados.

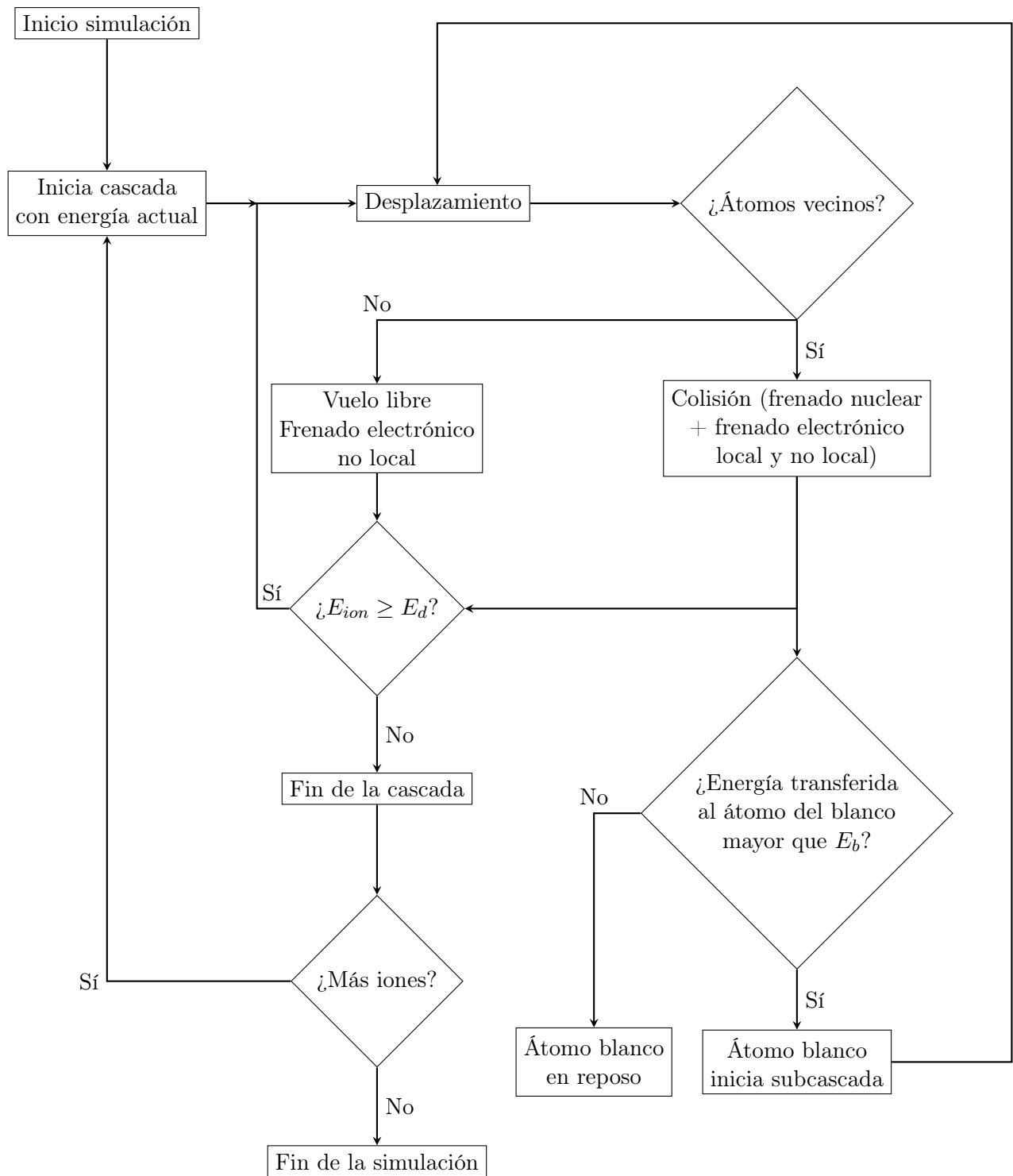


Figura 3.1: Diagrama de flujo que ilustra el funcionamiento del código IIS basado en la técnica BCA.

Una vez que ya conocemos, a grandes rasgos, el funcionamiento del código IIS, pasemos a describir la estructura de los ficheros de entrada y los diferentes parámetros que podemos controlar en estas simulaciones, y que se muestran en la Figura 3.2.

```

1 // Fichero de entrada: As_Si_10500.in
2 // Implantación acanalada de As a 10.5 MeV en Si, con una dosis de 5.0e12 at/cm^2
3
4 RecombinationFactor 0
5 DisplacementEnergy 15.0 eV
6
7 ENERGY 10500000 eV
8 NumberOfImplants 2835
9 Tha 0 degrees (tilt)
10 Phi 0 degrees
11 Dose 5.0e12
12 LevelOfSimulation 1
13
14 Temperature 300 kelvin
15
16 Atom As 33 75.000 519.0
17 Atom Si 14 28.086 519.0
18 Projectiles 1 0
19
20 ABC 1 0 0
21
22 // Si <100>
23 XTal 2 6 0.00 0.00 0.00 15 // Si
24 XTal 2 6 0.25 0.25 0.25 15 // Si
25 Amorphous 0

```

Figura 3.2: Estructura del fichero de entrada para el código IIS.

**RecombinationFactor** Cuando este parámetro está igualado a cero significa que no se tiene en cuenta la acumulación de dañado. Al fin y al cabo, estamos trabajando con dosis pequeñas ( $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>) donde las cascadas son independientes, una cascada no ve el dañado que deja otra porque están en regiones diferentes, suficientemente separadas.

**DisplacementEnergy** Es la energía umbral de desplazamiento (en eV). Se debe ajustar para cada material implantado, para el Si se toma un valor de 15 eV.

**ENERGY** La energía inicial de implantación (en eV) de cada uno de los iones implantados.

**NumberOfImplants** Define el número de iones implantados. Cuantos más átomos implantemos, mejor será la estadística pero se consumirá más tiempo.

**Tha** Ángulo polar (de inclinación) con respecto al eje principal del canal de implantación (en grados sexagesimales). Se ilustra en la Figura 3.3.

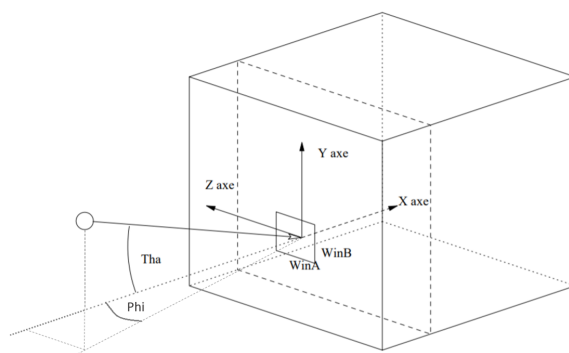


Figura 3.3: Ilustración de los ángulos de inclinación de implantación.

**Phi** Ángulo azimutal (de rotación) con respecto al eje principal del canal de implantación (en grados sexagesimales). Se ilustra en la Figura 3.3

En las gráficas que se muestran en el capítulo 4, los ángulos de inclinación se escriben como  $\Theta/\Phi$ , es decir, que para implantaciones acanaladas tendremos  $0^\circ/0^\circ$  mientras que si son desacanaladas, encontraremos  $8^\circ/30^\circ$  para As y  $7^\circ/30^\circ$  para P y B.

**Dose** Define la dosis de implantación (en  $\text{at}/\text{cm}^2$ ), que combinada con el número de átomos implantados define el área implantada.

**LevelOfSimulation** Este parámetro igualado a 1 indica que el programa sólo sigue la trayectoria del proyectil primario (el ion implantado), no sigue la trayectoria de todos los proyectiles secundarios que se van generando a lo largo de la implantación. Esto implica un ahorro computacional. Si estuviese igualado a 0 sí seguiría la trayectoria de todos los proyectiles secundarios.

**Temperature** Indica la temperatura a la que se encuentra el material blanco (en K).

**Atom As 33 75.000 519.0**

**Atom Si 14 28.086 519.0** Define los átomos envueltos en el problema. La sintaxis es la siguiente:

atom\_name atomic\_number atomic\_mass(en a.m.u.) Debye\_temp(en K)

Es común en los códigos [BCA](#) utilizar el modelo de Debye para estimar la amplitud de las oscilaciones térmicas de los átomos del blanco. La amplitud de oscilación,  $\langle d \rangle$ , se relaciona con la temperatura de Debye,  $T_D$ , mediante la siguiente relación [8]

$$\langle d \rangle = 12.1 \left( \frac{\phi(T_D/T) + \frac{1}{4}}{M_{\text{blanco}} T_D} \right)^{1/2} \text{ \AA} \quad (3.1)$$

con  $\phi(T_D/T)$  la función de Debye evaluada en  $(T_D/T)$ . En este caso, se trabaja con una temperatura de Debye de 519 K.

**Projectiles** Define el número de proyectiles diferentes envueltos en la implantación (en este caso, 1 porque solo implantamos As). La lista tiene que acabar con 0.

**ABC 1 0 0 [100]** define el eje X de la simulación. Coincide con la dirección cristalográfica {100}.

**XTal 2 6 0.00 0.00 0.00 15**

**XTal 2 6 0.25 0.25 0.25 15** Define cada posición atómica en la celdilla unidad. La sintaxis es:

XTal n\_atom type xpos ypos zpos binding\_energy

donde

n\_atom es el número del átomo que forma el material blanco según la lista que introdujimos anteriormente. En este caso, el átomo 1 sería As y el 2 Si.

type hace referencia a los tipos de celdilla unidad:

1: primitiva

2: centrada en el cuerpo (body centered, bc)

- 3: centrada en las bases A
- 4: centrada en las bases B
- 5: centrada en las bases C
- 6: centrada en las caras (face centered, fc)

xpos ypos zpos son las coordenadas relativas (medidas en parámetros de red) con respecto al origen de la celdilla unidad.

binding\_energy es la energía (en eV) necesaria para romper un enlace de la red.

**Amorphous** El valor 0 indica que el material blanco posee una red cristalina perfecta. Si su valor fuese 1, se trataría de un material policristalino y si fuese 2, de un material amorfo.

Además de estos parámetros, cabe indicar también que en el código **IIS** se emplea la distribución de carga **ISDS**.

En cuanto a las condiciones de simulación, las implantaciones se han simulado para tres tipos de iones diferentes, concretamente As, P y B, con una dosis de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>, a temperatura ambiente (300 K) y en condiciones de acanalamiento ( $\Theta = \Phi = 0^\circ$ ) a través del canal {100} del Si. El rango de energías simulado comprende desde 3 MeV hasta 10.5 MeV, aunque también se han realizado simulaciones a 100 keV.

A partir de las cascadas simuladas a lo largo de toda la implantación iónica, se obtendrá una gran cantidad de información que será procesada y analizada posteriormente. En particular, este estudio permitirá:

- Conocer las posiciones de los intersticiales y vacantes generados para tener una idea del daño generado en la muestra. Aunque en este trabajo no desarrollaremos este aspecto ya que no nos interesa el daño generado en la muestra sino los mecanismos físicos que producen el frenado del ion.
- Determinar las posiciones finales de los iones implantados y obtener el perfil en profundidad de las concentraciones de iones, que podrá ser comparado con el perfil obtenido experimentalmente con **SIMS** para verificar la validez de la simulación.
- Cuantificar la energía perdida por el ion para extraer el perfil en profundidad de la energía depositada por unidad de longitud, y entender entonces cómo el ion va perdiendo la energía y cuáles son los eventos principales en los que se pierde la energía. Estos eventos se corresponden con los diferentes mecanismos físicos que se producen durante el viaje del ion y son:
  - La energía que el ion cede al átomo del blanco durante una colisión nuclear o elástica. A este evento lo identificamos a partir de ahora con la etiqueta E.
  - Las pérdidas inelásticas locales durante la colisión. A este evento lo identificamos a partir de ahora con la etiqueta L.
  - Las pérdidas inelásticas no locales durante la colisión. A este evento lo identificamos a partir de ahora con la etiqueta N.
  - Las pérdidas inelásticas no locales durante el vuelo libre del ion. A este evento lo identificamos a partir de ahora con la etiqueta F.
- Evaluar las pérdidas electrónicas promedio locales y no locales, y representarlas en función de la energía instantánea del ion.

Los resultados obtenidos tras el análisis de las simulaciones realizadas se muestran en el capítulo siguiente.

# Capítulo 4

## Resultados

En este capítulo expondremos los resultados obtenidos a partir del procesado de la información recogida en las diversas simulaciones. En primer lugar, analizaremos los perfiles de la concentración de iones en profundidad. Más adelante, presentaremos los perfiles de energía depositada para evaluar el peso de cada uno de los posibles eventos que se dan durante una colisión atómica en función del rango de la energía de implantación. Finalmente, nos centraremos en el estudio de las pérdidas electrónicas y las caracterizaremos.

### 4.1. Perfiles de dopantes

El propio código [IIS](#) nos permite conocer las posiciones finales de los iones implantados para obtener así el perfil en profundidad de las concentraciones de iones. Además, es posible comparar este perfil con el obtenido experimentalmente con [SIMS](#) y de esta manera, observar si los resultados predichos por el modelo coinciden, o no, con lo que ocurre realmente. Con este fin, comencemos analizando los perfiles en profundidad de los iones de As a distintas energías de implantación dentro del rango de los MeV (Figura [4.1](#)).

Se puede observar que existe una apreciable diferencia entre los perfiles computacionales y experimentales del As. Por un lado, en el perfil simulado aparece un pico (a unos  $3 \mu\text{m}$  de profundidad para 3 MeV), que indica la profundidad en la cual se han parado la mayor parte de los iones implantados, el cual se va acentuando y desplazando hacia la derecha a medida que aumenta la energía. Esto tiene sentido, ya que cuando la energía de implantación es mayor, los iones son capaces de penetrar más profundamente en el material. Este pico está seguido de una meseta, la cual indicaría que los iones van perdiendo energía lentamente y todos al mismo ritmo, es decir, que aun se encuentran acanalados. Finalmente, se produce una caída muy abrupta en la concentración de iones. Por otro lado, en el perfil experimental sí que se ve representado el comportamiento de ese primer pico pero se produce un descenso de la concentración de iones mucho más suave, aparece una cola con tendencia exponencial en vez de una meseta casi plana.

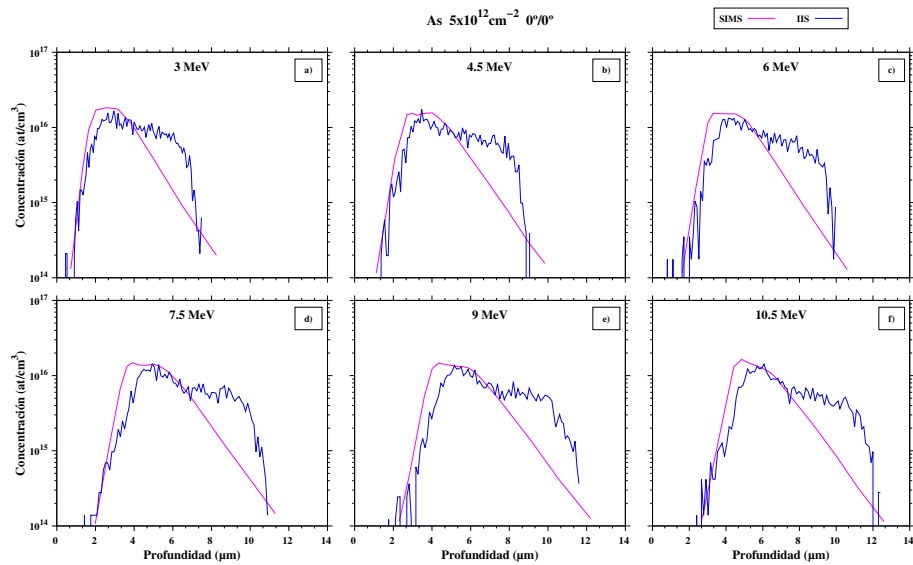


Figura 4.1: Concentración (en  $\text{at}/\text{cm}^3$ ) de As en función de la profundidad (en  $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento en Si  $\{100\}$ , con una dosis de implantación igual a  $5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  y con energías de implantación de: a) 3 MeV, b) 4.5 MeV, c) 6 MeV, d) 7.5 MeV, e) 9 MeV y f) 10.5 MeV. Datos obtenidos experimentalmente con SIMS y proporcionados por la empresa estadounidense Applied Materials (línea rosa) y obtenidos computacionalmente con el código IIS (línea azul).

Procedamos a analizar ahora los perfiles de dopantes cuando se trata de una implantación de P (Figura 4.2).

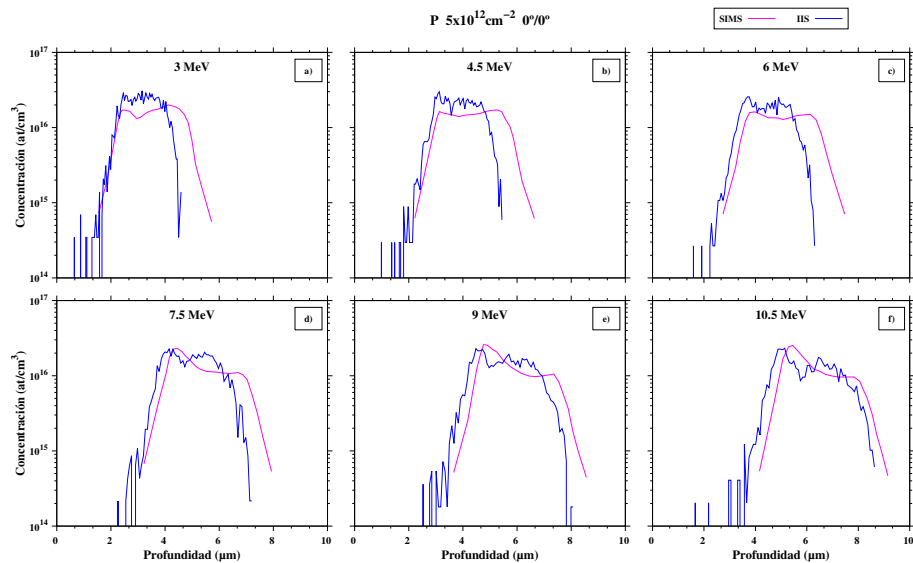


Figura 4.2: Concentración (en  $\text{at}/\text{cm}^3$ ) de P en función de la profundidad (en  $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento en Si  $\{100\}$ , con una dosis de implantación igual a  $5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  y con energías de implantación de: a) 3 MeV, b) 4.5 MeV, c) 6 MeV, d) 7.5 MeV, e) 9 MeV y f) 10.5 MeV. Datos obtenidos experimentalmente con SIMS y proporcionados por la empresa estadounidense Applied Materials (línea rosa) y obtenidos computacionalmente con el código IIS (línea azul).



En el caso del P vemos que la forma del perfil simulado se aproxima más al experimental a medida que aumenta la energía de implantación del ion. Esto podría deberse a que el P es similar en tamaño al Si y que el código IIS esté optimizado para el Si.

Por último, veamos qué ocurre con los perfiles de las implantaciones de B (Figura 4.3).

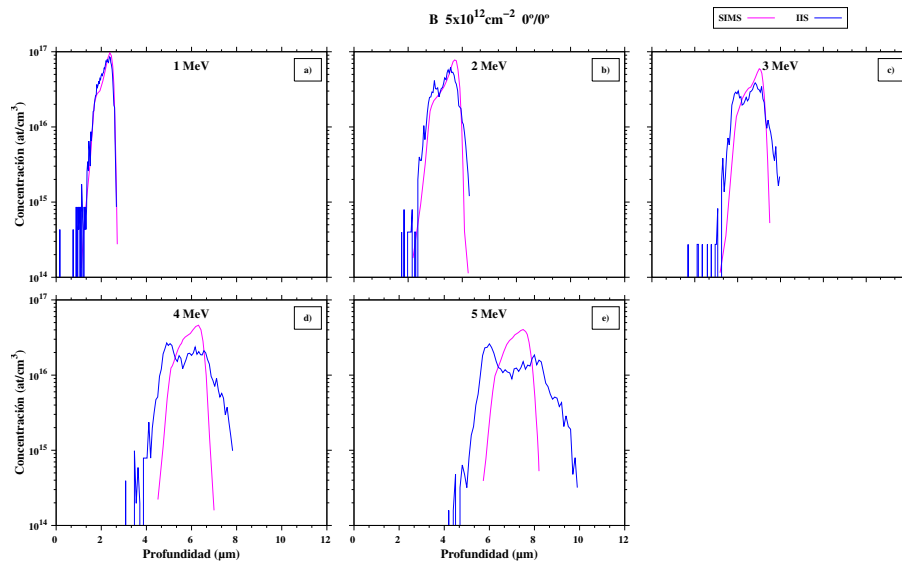


Figura 4.3: Concentración (en  $\text{at}/\text{cm}^3$ ) de B en función de la profundidad (en  $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento en Si  $\{100\}$ , con una dosis de implantación igual a  $5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  y con energías de implantación de: a) 1 MeV, b) 2 MeV, c) 3 MeV, d) 4 MeV y e) 5 MeV. Datos obtenidos experimentalmente con SIMS y proporcionados por la empresa estadounidense Applied Materials (línea rosa) y obtenidos computacionalmente con el código IIS (línea azul).

Se puede observar que a medida que aumenta la energía del ion, el modelo teórico predice un aumento en la concentración de iones en el primer pico mientras que en el perfil experimental, éste se muestra prácticamente invariante. Además, el perfil obtenido computacionalmente se va ensanchando mucho más rápido de lo que lo hace el perfil experimental. En el caso de B, esta predicción empeora al aumentar la energía de implantación.

Además, en este caso no tenemos esa cola exponencial en el perfil experimental como vimos en el del As. Esto podría deberse a que el B es mucho más ligero que el As por lo que los propios iones del B se ven menos afectados por las colisiones, alcanzan una mayor profundidad y, por tanto, no se produce desacanalamiento en la red cristalina.

Tras el análisis de los perfiles en profundidad de estos tres iones podemos afirmar que el modelo computacional falla a la hora de simular las implantaciones con iones pesados, como es el caso del As, y falla también con iones ligeros al aumentar la energía, como se ha mostrado en las implantaciones de B. Ambos fallos apuntan a las condiciones en las que domina el frenado electrónico frente al nuclear. Para confirmar esta suposición, cuantifiquemos la energía perdida por el ion para cada uno de los posibles eventos.

## 4.2. Perfiles de energía depositada

Representamos pues las pérdidas energéticas por unidad de longitud de cada uno de los posibles eventos que se pueden producir en una de las colisiones de BCA en función de la profundidad que alcanza el ion implantado. Si se integran estas pérdidas a lo largo de toda la trayectoria del ion, se obtienen las pérdidas energéticas totales del ion. Comencemos analizando lo que ocurre a bajas energías.

### 4.2.1. Bajas energías

Representaremos los perfiles de energía depositada para las implantación de As, P y B a 100 keV en Si {100} en condiciones de acanalamiento (Figura 4.4).

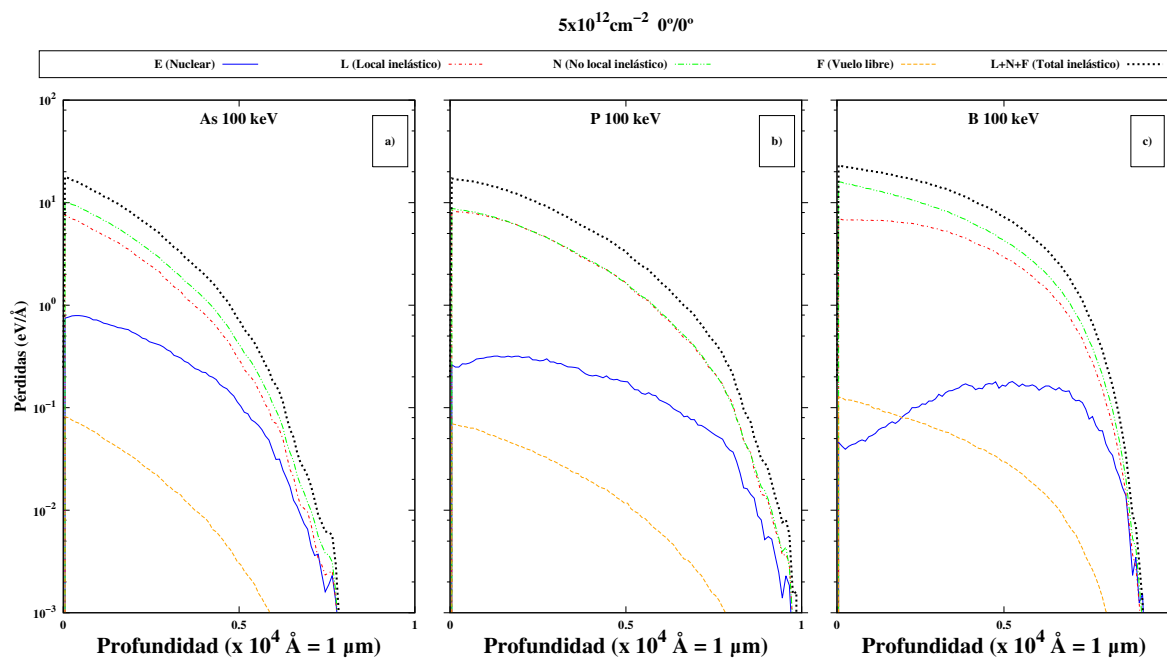


Figura 4.4: Pérdidas energéticas por unidad de longitud (en  $\text{eV}/\text{\AA}$ ) en función de la profundidad (en  $\mu\text{m}$ ) durante la implantación de a) As, b) P y c) B a 100 keV en Si {100}, con una dosis de  $5 \times 10^{12}$   $\text{at}/\text{cm}^2$  y en condiciones de acanalamiento, para cada uno de los posibles eventos que se pueden producir en una colisión.

En un primer vistazo, el perfil de As indica que se pierde bastante energía por frenado nuclear desde el principio y va disminuyendo con la profundidad. En el caso de P, este frenado nuclear está más extendido en profundidad pero es menos intenso. Por último, el perfil de B presenta un máximo en el frenado nuclear.

En cuanto a las pérdidas electrónicas, en la implantación de As se puede apreciar que el frenado electrónico total (suma de los eventos L (inelástico local), N (inelástico no local) y F (vuelo libre)) es un orden de magnitud superior al frenado nuclear (evento E). Mientras que en la implantación de P, esta diferencia alcanza casi los dos órdenes de magnitud y en el caso

del B, incluso se supera.

Por último, se puede observar también que el P penetra más que el As al ser más ligero. En principio el B debería penetrar aún más por ese mismo argumento pero a 100 keV el frenado electrónico del B es muy elevado y se extiende más (en As y P cae más rápido), de forma que el ion pierde más energía y por tanto le queda menos energía cinética para seguir penetrando en el material.

Analicemos ahora las implantaciones a altas energías y veamos si aumenta la contribución de las pérdidas electrónicas.

#### 4.2.2. Altas energías

En la Tabla 4.1 se muestran los diferentes perfiles de energía depositada para las implantaciones de As a 10.5 MeV, P a 10.5 MeV y B a 5 MeV (máximas energías experimentales de implantación) bajo condiciones de acanalamiento (columna izquierda) y desacanalamiento (columna derecha).

A simple vista, se puede apreciar que el frenado nuclear (línea azul) tiene un aspecto similar para los tres iones. Sin embargo, el frenado electrónico no local (línea roja) muestra comportamientos distintos en función del ion implantado. En el caso del As, las pérdidas electrónicas no locales comienzan a crecer desde el comienzo de la implantación mientras que en la implantación de P, este frenado comienza a una profundidad de  $2\mu\text{m}$  y para el B, aún más profundo, en torno a  $4\mu\text{m}$ . Este hecho se debe a que el B es mucho más ligero que el As y el P por lo que los propios iones del B se ven menos afectados por las colisiones y por eso, estas pérdidas son casi cero cerca de la superficie del material implantado.

Observamos también que en condiciones de no acanalamiento, la profundidad máxima alcanzada por el ion ha disminuido comparada con la alcanzada en condiciones de acanalamiento. Este resultado era de esperar ya que si implantamos un ion en condiciones de desacanalamiento, sufrirá más colisiones al comienzo de la implantación que si se hubiese implantado bajo condiciones de acanalamiento. Estas colisiones iniciales son las que conllevan una mayor transferencia de energía, ya que es cuando el ion es más energético y por tanto, el ion se parará antes.

Si comparamos estos perfiles con los obtenidos a bajas energías, podemos observar que, independientemente del ion que se implante, las pérdidas nucleares han disminuido un orden de magnitud pero ahora las pérdidas electrónicas han aumentado un orden de magnitud. Además, podemos afirmar que a altas energías las pérdidas inelásticas se deben en gran parte a la componente no local. No obstante, para ver más claramente que las contribuciones de las pérdidas electrónicas aumentan a altas energías, representemos el cociente entre las pérdidas electrónicas y nucleares (únicamente para la implantación de As, ya que el comportamiento es similar para los tres iones), tanto a bajas como a altas energías (Figura 4.5).

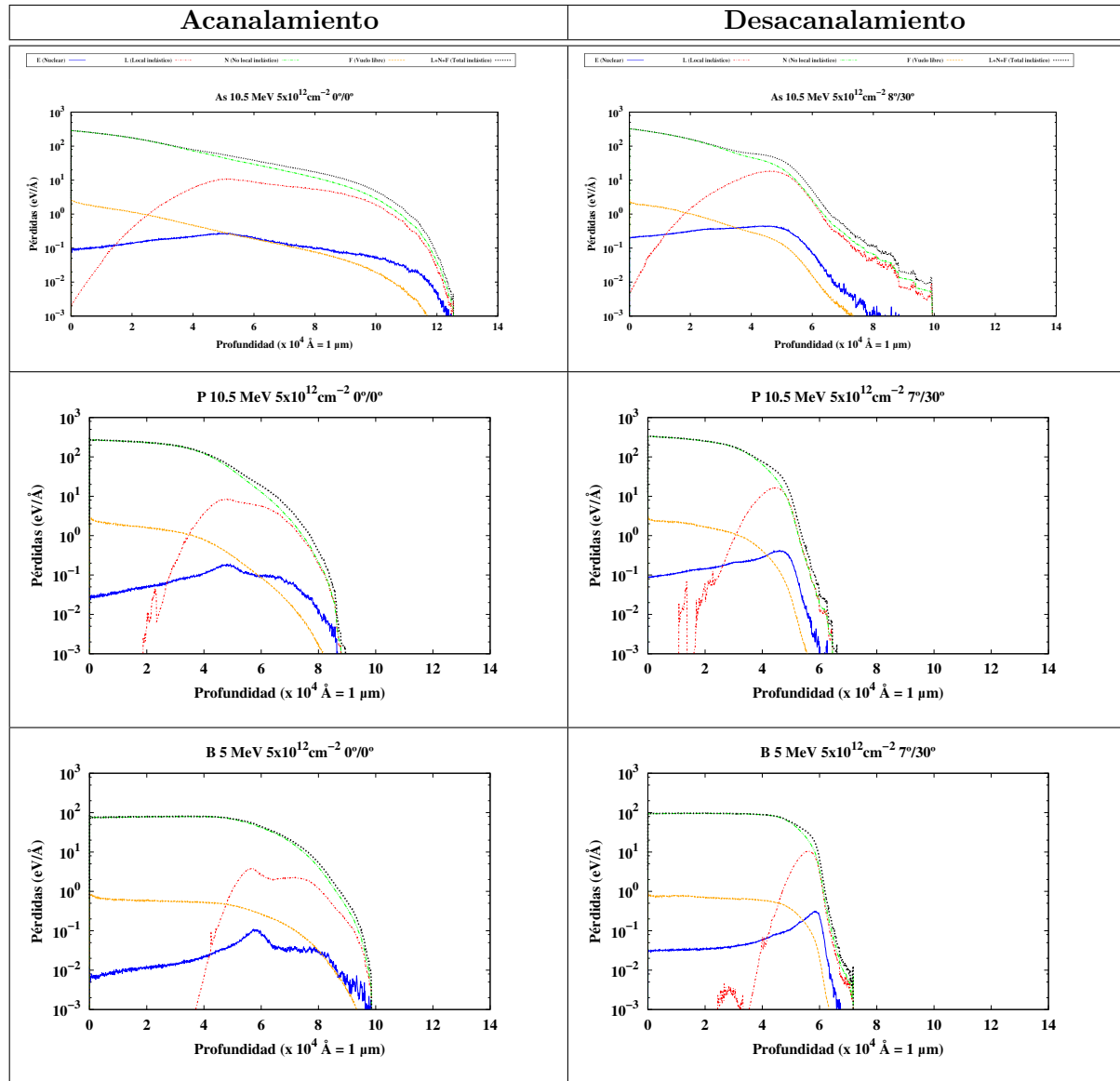


Tabla 4.1: Pérdidas energéticas por unidad de longitud (en  $\text{eV}/\text{Å}$ ) en función de la profundidad (en  $\mu\text{m}$ ) durante la implantación de: As a 10.5 MeV, P a 10.5 MeV y B a 5 MeV en Si {100}, con una dosis de  $5 \times 10^{12} \text{at}/\text{cm}^2$  y en condiciones de acanalamiento (columna izquierda) y desacanalamiento (columna derecha), para cada uno de los posibles eventos que se pueden producir en una colisión. Las pérdidas elásticas (evento E) se representan en color azul, las pérdidas electrónicas locales (evento L) en color rojo, las pérdidas electrónicas no locales (evento N) en color verde, el vuelo libre (evento F) en color naranja y las pérdidas electrónicas totales (eventos L+N+F) en color negro.

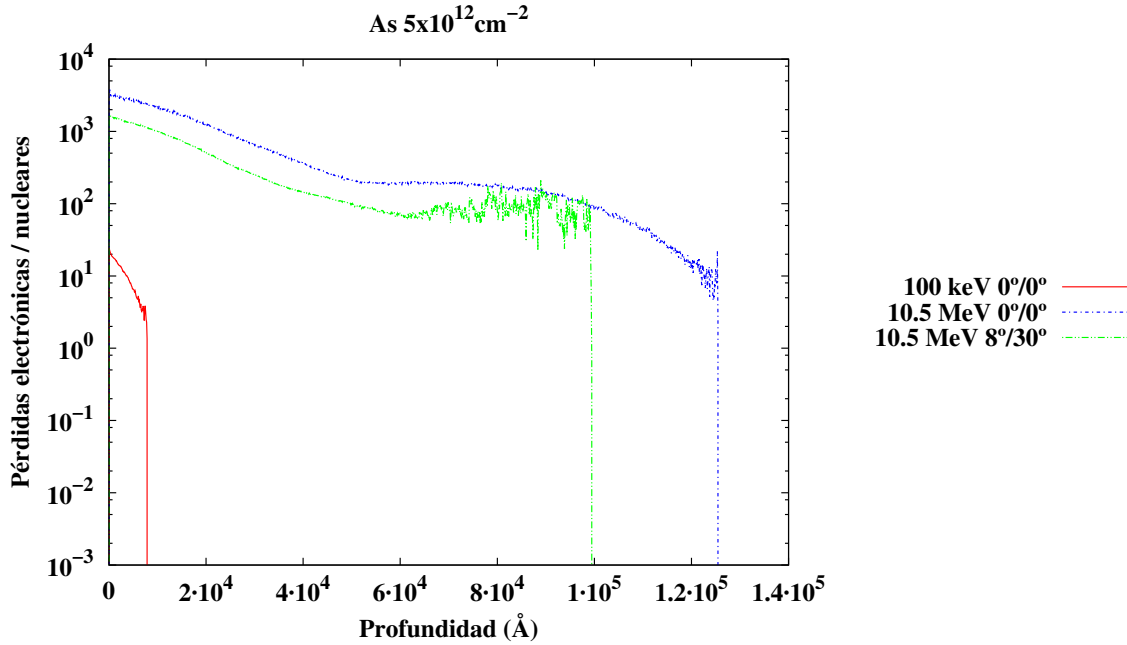


Figura 4.5: Cociente entre las pérdidas electrónicas y nucleares en función de la profundidad (en Å) durante la implantación de As en Si {100}, con una dosis de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>, para: 100 keV en condiciones de acanalamiento (línea roja), 10.5 MeV en condiciones de acanalamiento (línea azul) y 10.5 MeV en condiciones de desacanalamiento (línea verde).

A partir de esta gráfica podemos afirmar entonces que a altas energías, el frenado inelástico domina el nuclear en 3 o 4 órdenes de magnitud. De ahí que los modelos funcionen apreciablemente bien a bajas energías, ya que aunque las pérdidas inelásticas no estén debidamente modeladas, éstas tienen una menor contribución que a altas energías. Procedamos entonces a caracterizar estas pérdidas electrónicas más en detalle, separando las contribuciones locales y no locales.

### 4.3. Caracterización de las pérdidas electrónicas

A diferencia de los resultados mostrados en las secciones anteriores, que eran representaciones de los datos proporcionados directamente por la propia simulación, los resultados que se muestran a continuación han sido obtenidos con una serie de programas escritos en C y desarrollados durante este trabajo, y que pueden encontrarse como material suplementario a esta memoria en un fichero PDF.

Pasemos a cuantificar estas pérdidas inelásticas con algo más de detalle. En primer lugar, comenzaremos con las pérdidas inelásticas no locales.

#### 4.3.1. Pérdidas electrónicas no locales

En las Figuras 4.6 y 4.7 se representan los valores promedios de las pérdidas inelásticas no locales en función de la energía instantánea del ion para condiciones de acanalamiento y desacanalamiento, respectivamente. Concretamente para las máximas energías experimentales de implantación de nuestros iones (B 5 MeV, P 10.5 MeV y As 10.5 MeV), con una dosis de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>. Además, se comparan con SRIM.

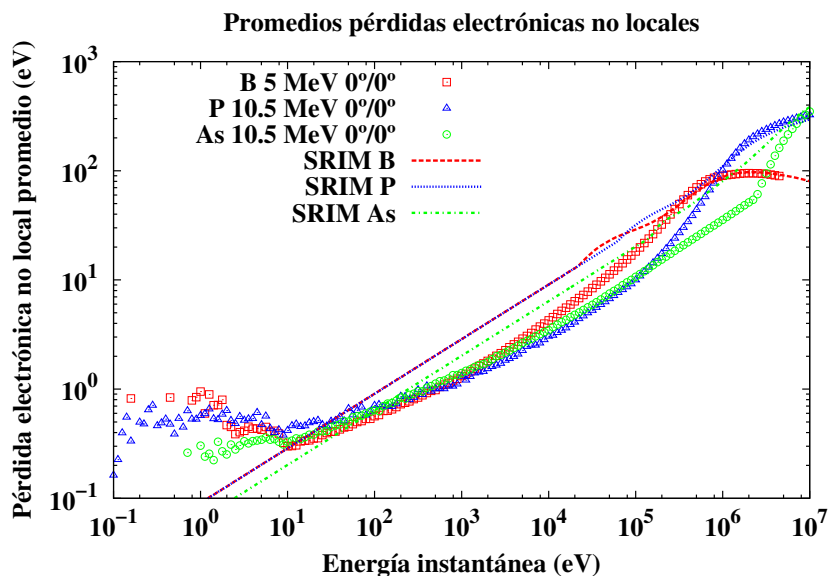


Figura 4.6: Valor promedio de las pérdidas electrónicas no locales (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (símbolos huecos en color rojo), P a 10.5 MeV (símbolos huecos en color verde) y As a 10.5 MeV (símbolos huecos en color azul) en Si {100}, con una dosis de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup> y en condiciones de acanalamiento. Las líneas discontinuas ilustran los valores obtenidos con SRIM para implantaciones de B (en color rojo), P (en color azul) y As (en color verde) en Si.

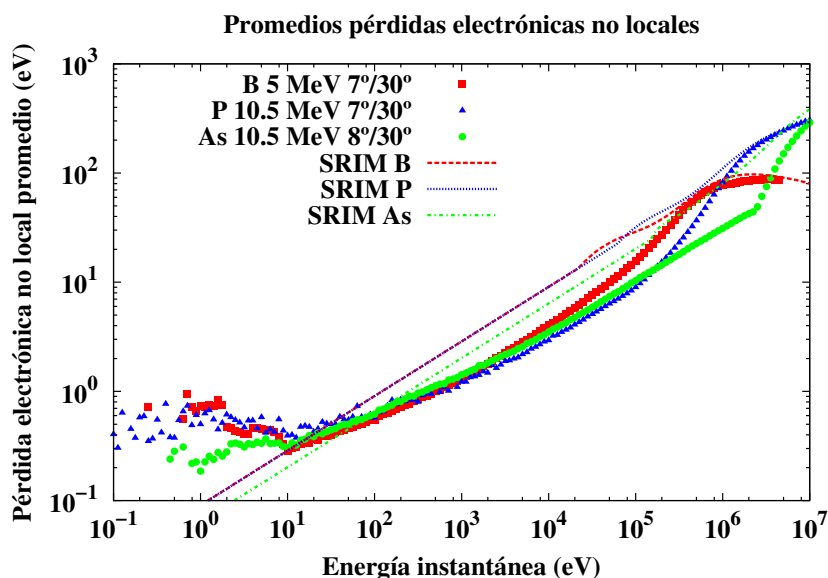


Figura 4.7: Valor promedio de las pérdidas electrónicas no locales (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (símbolos huecos en color rojo), P a 10.5 MeV (símbolos huecos en color verde) y As a 10.5 MeV (símbolos huecos en color azul) en Si {100}, con una dosis de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup> y en condiciones de desacanalamiento. Las líneas discontinuas ilustran los valores obtenidos con SRIM para implantaciones de B (en color rojo), P (en color azul) y As (en color verde) en Si.

Se puede observar que a bajas energías los promedios de las pérdidas inelásticas no locales prácticamente coinciden para B, P y As pero que difieren a altas energías. La pendiente a bajas energías es prácticamente la misma, lo cual indicaría que la energía transferida por el ion no depende de su masa atómica. Además, estas figuras nos indican que las pérdidas energéticas no locales se corresponden con la curva descrita en la región III (de bajas energías) que aparece en la Figure 2.6, ya que muestran un comportamiento, aproximadamente, creciente linealmente a medida que aumenta la energía instantánea del ion (y por tanto, su velocidad) hasta que alcanza el pico de Bragg y luego comienzan a disminuir. Además, se puede observar que las pérdidas simuladas con el modelo de BK siguen la tendencia descrita por SRIM. Las pérdidas energéticas calculadas con SRIM se obtienen del ajuste a una gran cantidad de datos obtenidos experimentalmente, es decir, es un comportamiento promedio de lo que le ocurre a un cierto ion en un medio de diferente densidad electrónica. Este frenado no local está entonces en el orden de magnitud esperado.

Para finalizar el análisis de estas pérdidas inelásticas no locales, podemos comparar los valores promedios obtenidos en cada una de las implantaciones, tanto en condiciones de acanalamiento como de desacanalamiento. La Figura 4.8 indica que apenas hay diferencias entre las pérdidas electrónicas no locales bajo condiciones de acanalamiento y desacanalamiento.

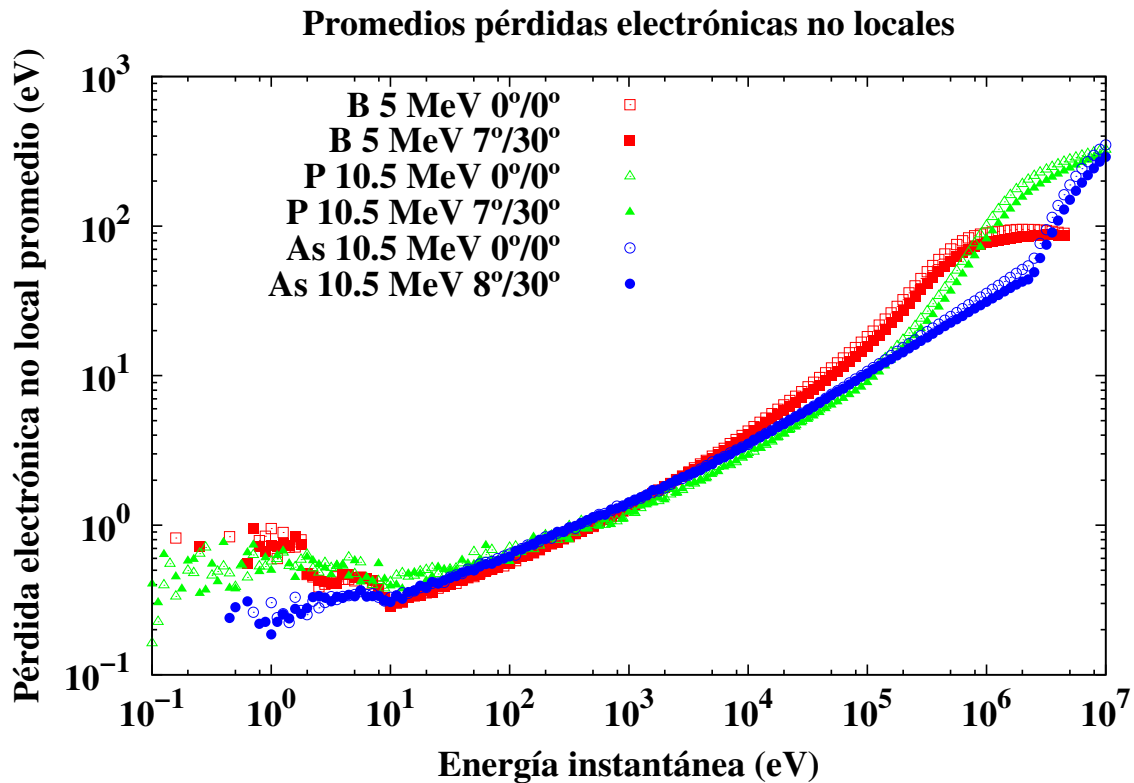


Figura 4.8: Valor promedio de las pérdidas electrónicas no locales (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (en color rojo), P a 10.5 MeV (en color verde) y As a 10.5 MeV (en color azul) en Si {100}, con una dosis de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>, en condiciones de acanalamiento (símbolos huecos) y de desacanalamiento (símbolos rellenos).

A continuación, realizaremos este mismo análisis para las pérdidas inelásticas locales.

### 4.3.2. Pérdidas electrónicas locales

En el histograma de la Figura 4.9 se representa el valor promedio de las pérdidas inelásticas locales en función de la energía instantánea del ion, con las máximas energías experimentales de implantación (B 5 MeV, P 10.5 MeV y As 10.5 MeV), con una dosis de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup> y en condiciones de acanalamiento (símbolos huecos) y desacanalamiento (símbolos rellenos).

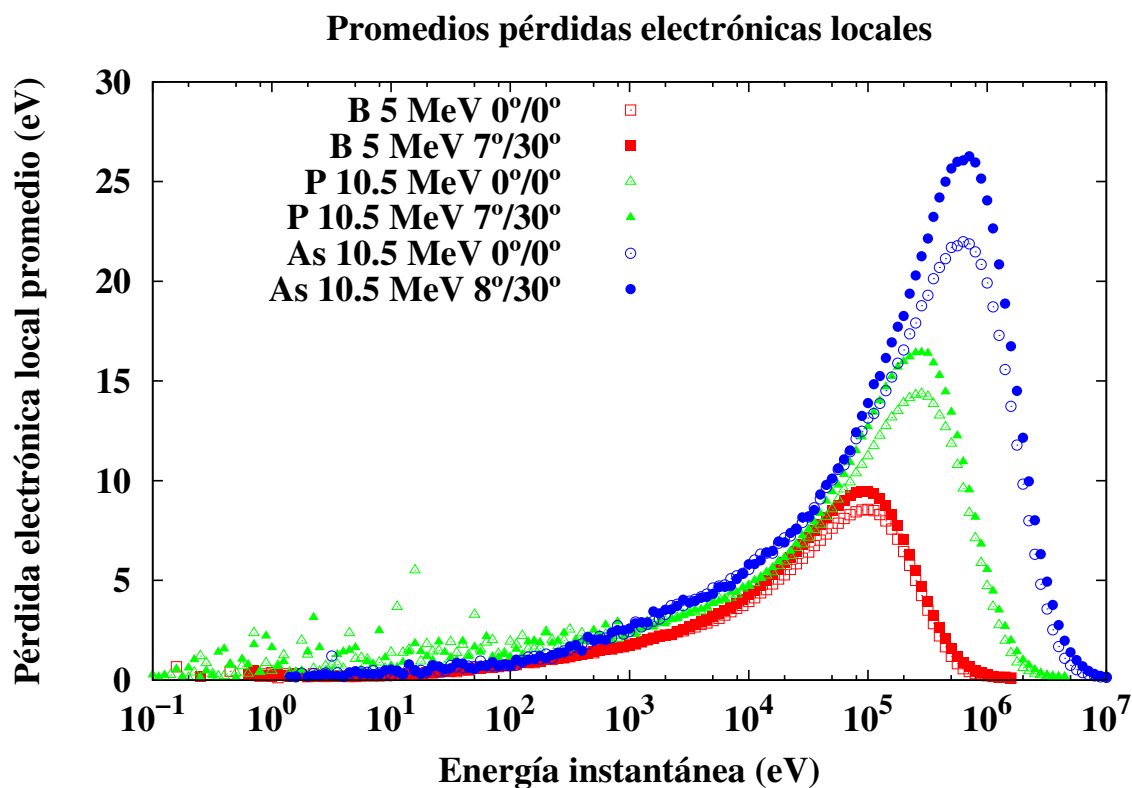


Figura 4.9: Valor promedio de las pérdidas electrónicas locales (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (en color rojo), P a 10.5 MeV (en color verde) y As a 10.5 MeV (en color azul) en Si {100}, con una dosis de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>, en condiciones de acanalamiento (símbolos huecos) y de desacanalamiento (símbolos rellenos).

Se puede observar que, independientemente del ion implantado, a medida que aumenta la energía instantánea del ion, las pérdidas inelásticas locales aumentan y luego comienzan a descender para llegar incluso a desaparecer.

Estas pérdidas electrónicas locales son más grandes en la implantación de As que en la de P, y éstas más grandes que las de B. Es decir, que estas pérdidas electrónicas locales tienen una mayor contribución para iones pesados.

En la Figura 4.10 se muestra esta misma representación de las pérdidas electrónicas locales pero con el eje Y en escala logarítmica.



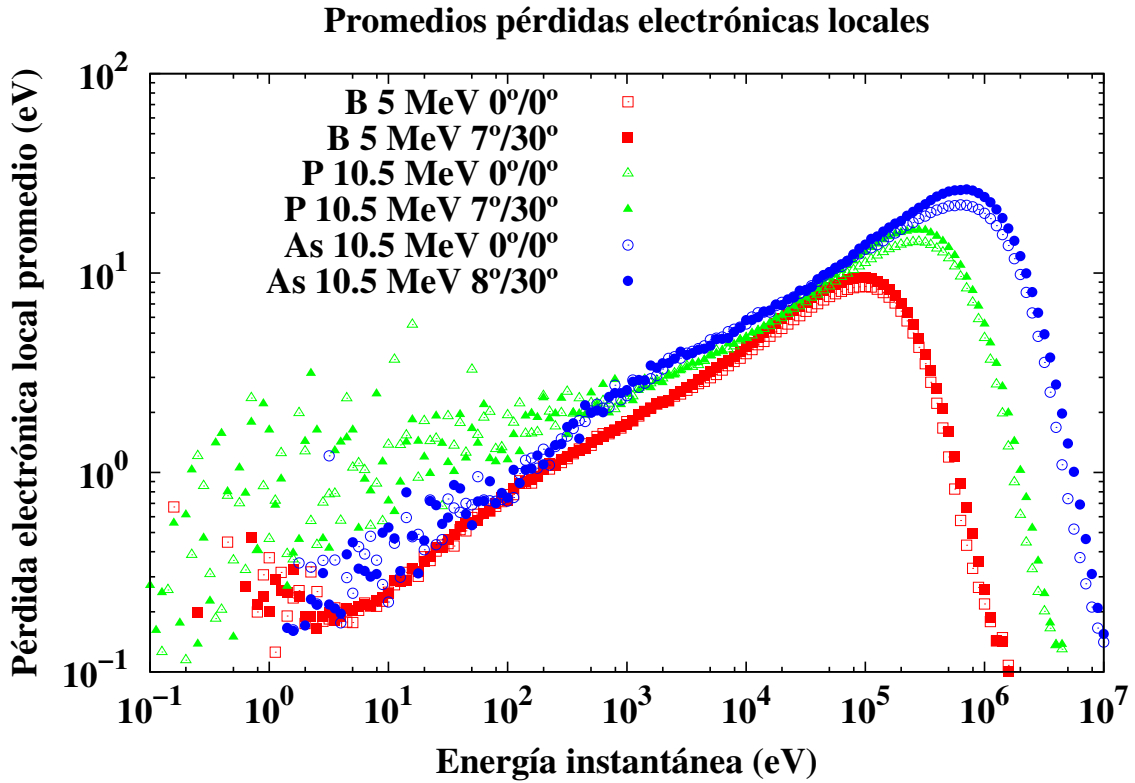


Figura 4.10: Valor promedio de las pérdidas electrónicas locales, en escala logarítmica, (en eV) en función de la energía instantánea del ion (en eV) para el B a 5 MeV (en color rojo), P a 10.5 MeV (en color verde) y As a 10.5 MeV (en color azul) en Si {100}, con una dosis de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>, en condiciones de acanalamiento (símbolos huecos) y de desacanalamiento (símbolos rellenos).

En estos histogramas se puede apreciar que, al contrario que con las pérdidas inelásticas no locales, los valores promedios de las pérdidas inelásticas locales calculados en condiciones de acanalamiento son menores que los obtenidos en una red desacanalada. Esto era de esperar ya que si el ion se implanta en un material acanalado, encontrará menos obstáculos a su paso y, por tanto, sufrirá menos colisiones con los átomos del blanco que si se implanta en condiciones de desacanalamiento donde es muy probable que empiece a chocar con los átomos del blanco desde el comienzo de la implantación.

Aun podemos profundizar un poco más en el estudio de estas pérdidas inelásticas locales,  $E_L$ , y tratar de ajustar la parte lineal al modelo de Firsov, que da cuenta de la energía promedio de excitación electrónica en las colisiones atómicas [44] y que viene dado por la siguiente expresión

$$E_L = \frac{(Z_{ion} + Z_{blanco})^{5/3}}{\left[1 + 3.1 \cdot 10^7 (Z_{ion} + Z_{blanco})^{1/3} R_0\right]^5} 4.3 \cdot 10^{-8} v_{ion} \quad (4.1)$$

donde  $v_{ion}$  recordamos que es la velocidad del ion (en cm/s) y  $R_0$  es la distancia mínima entre los núcleos durante la colisión (en cm).

La caída a altas energías se puede modelar mediante una función de tipo Fermi-Dirac, de manera que se puede utilizar la siguiente expresión para ajustar las curvas de la Figura 4.10

$$\left\{ \frac{(Z_{ion} + Z_{blanco})^{5/3} 4.3 \cdot 10^{-8} \cdot 100 \sqrt{2E_{actual}e}}{\left[1 + 0.31 (Z_{ion} + Z_{blanco})^{1/3} R_0\right]^5 \sqrt{M_{ion}}} \right\} \left( \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{actual}}{E_p}\right)} \right) \quad (4.2)$$

donde  $E_{actual}$  es la energía instantánea del ion (en eV),  $e$  es la carga del electrón (para pasar de eV a J),  $M_{ion}$  es la masa del ion (en kg),  $R_0$  (en Å) vendría a ser la distancia promedio de todas las colisiones y  $E_p$  es la energía que caracteriza el decrecimiento exponencial (en eV).

Al utilizar la ecuación (4.2) para tratar de ajustar los datos de la Figura 4.10, los únicos parámetros de ajuste son  $R_0$  y  $E_p$ . Los resultados que se obtienen de los ajustes son los siguientes

	B	P	As
$R_0(\text{Å})$	$1.149 \pm 0.003$	$1.086 \pm 0.006$	$1.034 \pm 0.003$
$E_p(\text{keV})$	$134.4 \pm 1.2$	$375 \pm 7$	$894 \pm 10$
$E_p/E_B$	0.50	0.49	0.48

Tabla 4.2: Parámetros de ajuste de la ecuación (4.2) para representar los datos de la Figura 4.10.

Con  $E_B$  la energía del ion desplazándose con la velocidad de Bohr

$$E_B = \frac{1}{2} M_{ion} v_B^2$$

$$v_B = \frac{e^2}{4\pi\xi_0\hbar}$$

A partir de este ajuste se puede observar que por un lado,  $E_p$  aumenta con la masa del ion y por otro,  $R_0$  disminuye al aumentar la masa del ion (durante la colisión el ion se acerca más al átomo de la red), tal y como se ilustra en la Figura (4.11) en la que se representa el parámetro  $R_0$  frente a la masa atómica de los iones implantados (B 10.81 a.m.u., P 30.97 a.m.u. y As 74.952 a.m.u.).

Si ajustamos entonces las pérdidas electrónicas locales con el modelo de Firsov junto con una función de Fermi-Dirac, obtenemos la Figura 4.12.

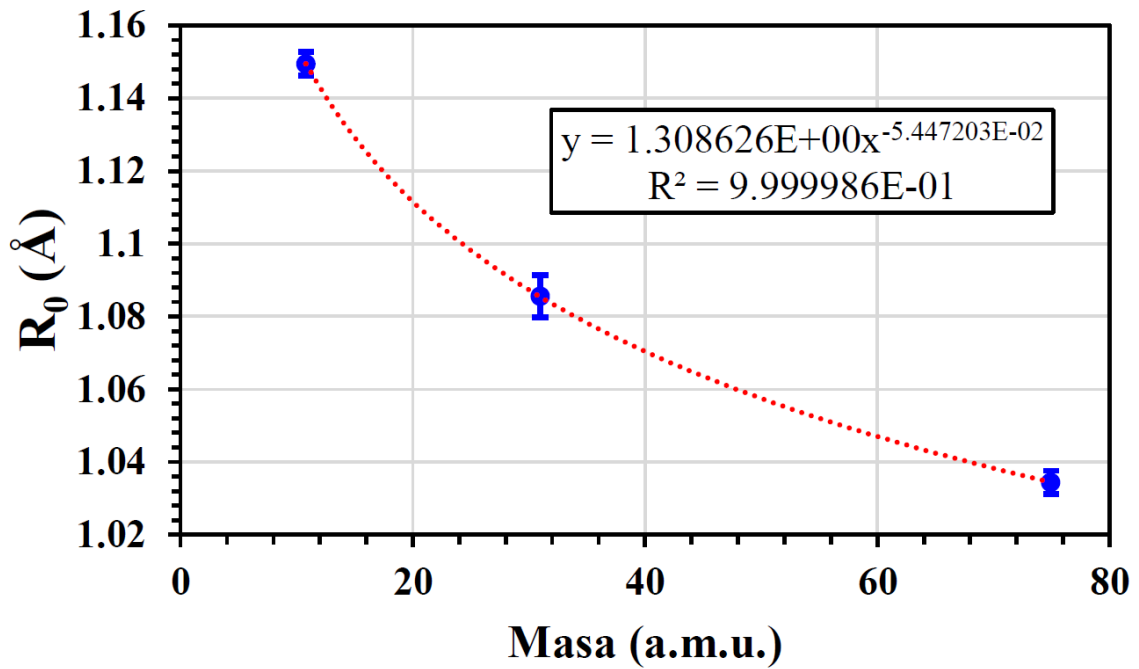


Figura 4.11: Parámetro  $R_0$  (en Å) frente a la masa atómica (en a.m.u.) de los iones implantados (B 10.81 a.m.u., P 30.97 a.m.u. y As 74.952 a.m.u.).

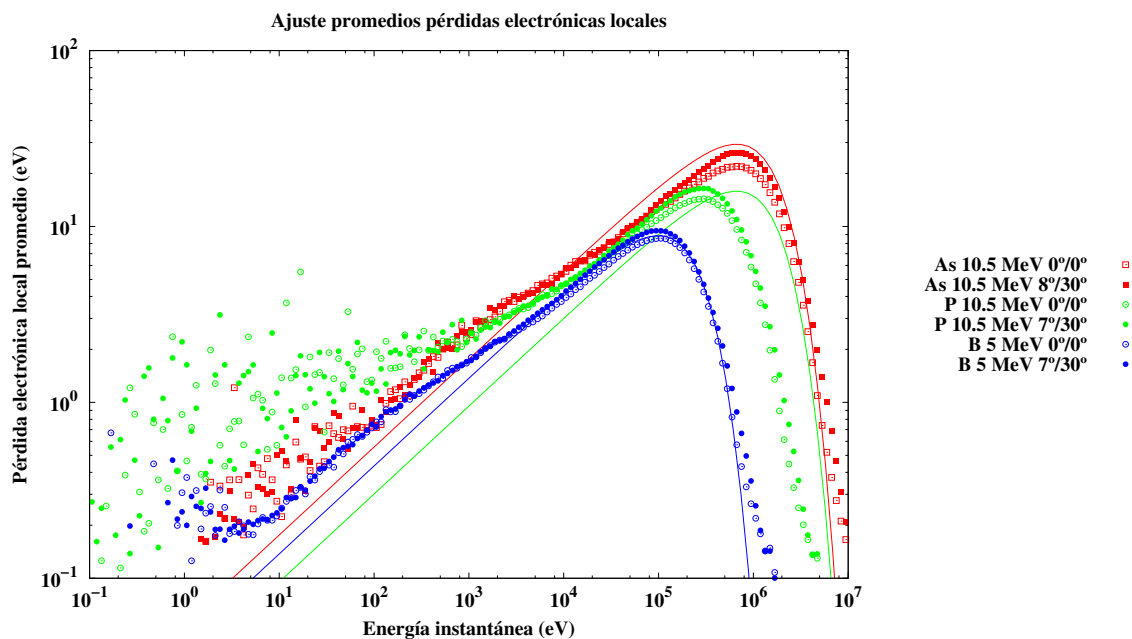


Figura 4.12: Ajuste de las pérdidas electrónicas locales con el modelo de Firsov junto con una función de Fermi-Dirac.

## 4.4. Mecanismos de desacanalamiento

Por un lado, los perfiles de dopantes analizados al comienzo de este capítulo muestran que los átomos se desacanalán más de lo predicho por los modelos. Por otro lado, los perfiles de energía depositada indican que la contribución del frenado electrónico es mucho mayor a altas energías y tras haber caracterizado las diferentes pérdidas electrónicas, podemos confirmar que éstas son mayores para iones pesados que ligeros. Todo esto nos lleva a pensar que puede haber un desacanalamiento asociado a una excitación electrónica. Los mecanismos de desacanalamiento podrían tener varias causas:

- Se genera más daño de lo esperado (el daño desordena la red y los canales dejan de ser perfectos) pero esto tendría efecto tan solo a dosis elevadas, no a dosis tan bajas como nos encontramos ( $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>) donde las cascadas son independientes unas de otras, es decir, que una cascada no ve el daño que deja otra porque están muy separadas entre sí. Esta discrepancia en los resultados se tiene que deber entonces a un fenómeno que genere daño desde el principio de la implantación, produciendo así un desacanalamiento.
- Otra posible razón de este desacanalamiento es que la excitación electrónica producida por las pérdidas electrónicas no locales podría contribuir a elevar la temperatura de la muestra, por acoplamiento electrón-fonón. Sin embargo, el TTM indica que esta interacción es demasiado lenta (entre 0.2ps y 1ps [51, 52]) y para cuando llega la energía al fonón, el ion ya ha pasado (se estima que el tiempo de frenado del ion es del orden de  $10^{-14}$ s= 0.01ps [43]) y por tanto, no vería su efecto de desacanalamiento.
- Por último, este desacanalamiento podría deberse a que los enlaces se debiliten y los átomos oscilasen respecto a su posición de equilibrio más de lo previsto, estrechando así el canal de implantación y aumentando la probabilidad de desacanalamiento.

Como una forma empírica de obtener desacanalamiento, se realizan una serie de simulaciones para el caso de As (ya que es el ion para el cual se observa una mayor discrepancia entre el perfil experimental y el simulado) a 10.5 MeV, con una dosis de implantación de  $5 \times 10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>, para diferentes temperaturas de Debye (200 K, 300 K, 400 K y 519K (recordamos que en el código IIS se emplea una temperatura de Debye de 519 K)), obtenemos la Figura 4.13.

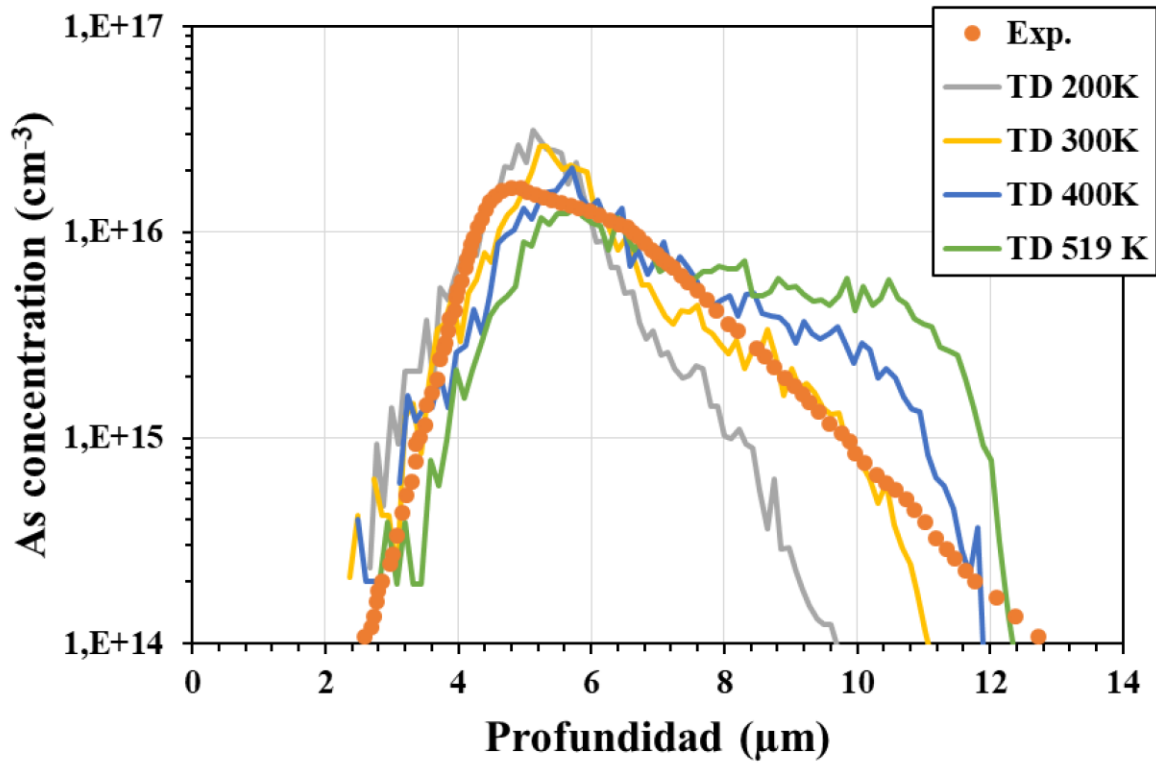


Figura 4.13: Concentración (en  $\text{at}/\text{cm}^3$ ) de As en función de la profundidad (en  $\mu\text{m}$ ), bajo condiciones de acanalamiento en Si {100}, con una dosis de implantación igual a  $5 \times 10^{12}$   $\text{at}/\text{cm}^2$  y con una energía de implantación de 10.5 MeV. Datos obtenidos experimentalmente con SIMS (puntos naranjas) y computacionalmente con el código IIS para diferentes temperaturas de Debye: 200 K (línea gris), 300 K (línea amarilla), 400 K (línea azul) y 519 K (línea verde, esta es la temperatura que se emplea por defecto).

En esta gráfica se puede mostrar que la cola exponencial se reproduce mejor con una temperatura de Debye menor que la que se usa por defecto (519 K). En particular, la de 300 K es la que mejor reproduce la cola, lo que sugiere que los iones se desacanalan por unas vibraciones atómicas de mayor amplitud. Esto podría ser por un lado, efecto del calentamiento de la muestra durante la irradiación (mayor temperatura implica mayor amplitud de oscilación en las vibraciones atómicas). O por otro lado, podría ser efecto del debilitamiento de enlaces por el frenado electrónico. Los modelos de desestabilización desarrollados para excitación láser, sugieren una desestabilización directa de la red cuando se excitan los electrones de valencia que forman los enlaces, y esto sería un proceso mucho más rápido, compatible con las observaciones (aunque solo sería relevante en alta energía, cuando la excitación electrónica es significativa, local y rápida) [53].



## Capítulo 5

# Conclusiones

En el presente trabajo hemos estudiado las condiciones experimentales de irradiación a altas energías proporcionadas por la empresa Applied Materials con el fin de analizar las discrepancias existentes entre los perfiles experimentales y los predichos por los actuales simuladores atomísticos. Los perfiles experimentales han mostrado que los átomos se desacanalán más de lo que predicen los modelos.

Hemos analizado el fundamento de estos simuladores y en concreto el del código [IIS](#), que ha sido el empleado en las simulaciones, para tratar de entender cuáles son las limitaciones de estos modelos y comprender la física que hay detrás del proceso de implantación iónica.

Además, hemos realizado una extensa revisión bibliográfica de los diferentes modelos empleados para describir los diversos mecanismos por los que el ion pierde su energía a medida que atraviesa la muestra.

Posteriormente, hemos procedido a simular diversas implantaciones de As, P y B a bajas energías (cientos de keV) y, fundamentalmente, a altas energías ( $\sim$  MeV), tanto en condiciones de acanalamiento como de desacanalamiento, para evaluar las diferentes contribuciones a las pérdidas energéticas del ion.

De esta manera, hemos confirmado que el frenado electrónico domina frente al frenado nuclear a altas energías. Esto pone de manifiesto que aunque existe frenado electrónico a bajas energías, su contribución es lo suficientemente despreciable como para que el modelo funcione correctamente a bajas energías sin tener en cuenta este tipo de pérdidas. Sin embargo, este frenado electrónico es clave para el correcto simulado de las implantaciones a altas energías, lo cual nos lleva a suponer que el desacanalamiento que se observa experimentalmente se tiene que deber a mecanismos electrónicos.

Hemos realizado una serie de simulaciones variando la temperatura de Debye del Si, que nos han permitido mejorar la caída en la concentración de iones al disminuir la temperatura de Debye de 519 K a 300 K, lo que ha implicado un aumento en la amplitud de oscilación de los átomos de la red y por tanto, un mayor desacanalamiento.

Hemos analizado diversos mecanismos de desacanalamiento. Por un lado, la excitación electrónica, a través del acoplamiento electrón-fonón, que calentaría la muestra y produciría desacanalamiento ha sido excluida porque el tiempo de transferencia electrón-fonón es dos órdenes de magnitud superior al tiempo de frenado del ion, de manera que el ion pasa tan

rápido que no vería el efecto de desacanalamiento.

Por otro lado, el desacanalamiento causado por una acumulación de dañado es poco relevante dado que las implantaciones se realizan a tan bajas dosis, que las cascadas están aisladas.

Finalmente, hemos postulado que este desacanalamiento podría deberse a que los átomos oscilasen respecto a su posición de equilibrio más de lo previsto debido al debilitamiento de los enlaces por excitación de los electrones de valencia.

En futuros trabajos de investigación se tratará de entender este mecanismo de desacanalamiento y poder implementarlo en un modelo eficiente de [BCA](#) que describa correctamente la implantación iónica a altas energías. La mejora de estos modelos permitirá un mayor control del dopado de un gran rango de dispositivos que se someten a la implantación iónica a altas energías como son, por ejemplo, las zonas activas de las células solares o los detectores de radiación, lo que a largo plazo conllevará un ahorro en costes y tiempos de fabricación.

Asimismo, este trabajo entronca con varias asignaturas impartidas a lo largo del Grado en Física. Entre ellas, destacan las asignaturas de Física de Materiales, Física del Estado Sólido y Electrónica con el estudio de la estructura cristalina, los diversos defectos que en ella se pueden dar y la importancia del dopado en los dispositivos electrónicos. No podemos olvidar el estudio de la radiación de frenado en la asignatura de Electrodinámica Clásica que ha permitido comprender lo que ocurre con la radiación de frenado. Importante ha sido también la asignatura de Física Computacional, ya que en ella se han adquirido las nociones básicas de programación que han permitido lanzar las simulaciones y escribir los diversos programas para el procesado de las mismas.

El tema abordado en este trabajo no solo es de gran interés científico sino también académico, ya que se trata de un tema multidisciplinar que, sin duda, permite al estudiante poner en práctica sus conocimientos en diversas ramas de la Física y poder profundizar en dicho aprendizaje.



## Apéndice A

# Programas en C

Los códigos desarrollados a lo largo de este trabajo e implementados en C para llevar a cabo la caracterización de las pérdidas electrónicas se encuentran adjuntos a esta memoria en un fichero PDF. Al comienzo de cada programa se describe brevemente para qué se ha empleado, además de diversos comentarios sobre los puntos más importantes del código.

- *PerdQ\_Eactual\_LN.c* Programa que representa las pérdidas electrónicas locales L y no locales N en función de la energía instantánea del ion.
- *Promedios\_Desviacion\_PerdQ\_Eactual\_QLIM\_L.c* Programa que calcula los promedios y las desviaciones estándar de las pérdidas debidas a los eventos L en función de la energía actual del ion.
- *Promedios\_Desviacion\_PerdQ\_Eactual\_QLIM\_N.c* Programa que calcula los promedios y las desviaciones estándar de las pérdidas debidas a los eventos N en función de la energía actual del ion.



# Bibliografía

- [1] L. Rubin and J. Poate, “Ion Implantation in Silicon Technology,” *American Institute of Physics*, vol. 9, pp. 12–15, 2003.
- [2] N. Teranishi, G. Fuse, and M. Sugitani, “A review of ion implantation technology for image sensors †,” *Sensors*, vol. 18, no. 7, 2018.
- [3] G. Virdi and D. Kaushik, *An Introduction to VLSI Technology*. 04 2015.
- [4] J. M. Hernández-Mangas, J. Arias, L. Bailón, M. Jaraíz, and J. Barbolla, “Improved binary collision approximation ion implant simulators,” *Journal of Applied Physics*, vol. 91, no. 2, pp. 658–667, 2002.
- [5] S. Tian, “Predictive Monte Carlo ion implantation simulator from sub-keV to above 10 MeV,” *Journal of Applied Physics*, vol. 93, pp. 5893–5904, 05 2003.
- [6] M. Current, Y. Kawasaki, G. Hobler, and M. Sugitani, “Channeled MeV B, P and As Profiles in Si(100): Monte-Carlo Models and SIMS,” *2018 22nd International Conference on Ion Implantation Technology (IIT)*, pp. 251–254, 2018.
- [7] J. M. Hernández-Mangas, *Simulación de la implantación iónica en semiconductores*. PhD thesis, Universidad de Valladolid, 2000.
- [8] D. S. Gemmell, “Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 46, pp. 129–227, Jan 1974.
- [9] “UPCommons.” [https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2117/189647/3.-\\_semiconductores-4826.pdf](https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2117/189647/3.-_semiconductores-4826.pdf).
- [10] “International Technology Roadmap for Semiconductors - ITRS 2.0.” <http://www.itrs2.net/>.
- [11] K. Nordlund, “Historical review of computer simulation of radiation effects in materials,” *Journal of Nuclear Materials*, vol. 520, pp. 273–295, 2019.
- [12] G. Fuse, K. Watanabe, H. Sasaki, and M. Sugitani, “Significant roles of ultra-high energy ion implanter for high performance image sensing devices,” pp. 1–4, 05 2014.
- [13] “Applied Materials | Semiconductor, Display and Solar.” <https://www.appliedmaterials.com/>.
- [14] N. Bohr, “On the Constitution of Atoms and Molecules, Part I,” *Philosophical Magazine*, vol. 26, pp. 1–25, 1913.
- [15] A. Einstein, “On a Heuristic Viewpoint Concerning the Production and Transformation of Light,” *Annalen der Physik*, vol. 17, pp. 132–148, 1905.

- [16] H. Bethe, *Theory of the Passage of Fast Corpuscular Rays Through Matter*, pp. 77–154. *Annalen der Physik*.
- [17] A. Schinner, V. I. Shulga, and P. Sigmund, “Threshold behavior and isotope effect in low-energy electronic stopping of light ions,” *Journal of Applied Physics*, vol. 129, no. 18, p. 185304, 2021.
- [18] “Synopsys | EDA Tools, Semiconductor IP and Application Security Solutions.” <https://www.synopsys.com/silicon/tcad/device-simulation/sentaurus-device.html>.
- [19] G. Balamurugan, B. Obradovic, G. Wang, Y. Chen, and A. Tasch, “New analytic models and efficient parameter extraction for computationally efficient 1-d and 2-d ion implantation modeling,” in *International Electron Devices Meeting 1998. Technical Digest (Cat. No.98CH36217)*, pp. 517–520, 1998.
- [20] “Ion Implant Simulator.” <https://www.ele.uva.es/~jesman/iis.html>.
- [21] N. H. D. Bohr, “The penetration of atomic particles through matter,” 1948.
- [22] J. Lindhard and M. Scharff, “Energy dissipation by ions in the kev region,” *Phys. Rev.*, vol. 124, pp. 128–130, Oct 1961.
- [23] CSN, *Aceleradores de partículas. Parte I*. CSN.
- [24] J. Ziegler, J. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids*. Stopping and ranges of ions of matter, Pergamon, 1985.
- [25] I. Santos, L. A. Marqués, and L. Pelaz, “Modeling of damage generation mechanisms in silicon at energies below the displacement threshold,” *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 174115, Nov 2006.
- [26] J. Ziegler, *Ion Implantation : Science and Technology*. Academic Press, 2nd ed. ed., 1988.
- [27] P. de Vera Gomis, “Cálculo de la superficie de Bethe a partir de medidas de reflectancia: aplicación al frenado de partículas energéticas en perovskitas de alta constante dieléctrica,” Master’s thesis, Universidad de Alicante, Alicante, 2011.
- [28] J. Lindhard and A. H. Sørensen, “Relativistic theory of stopping for heavy ions,” *Phys. Rev. A*, vol. 53, pp. 2443–2456, Apr 1996.
- [29] N. Bohr, “Scattering and Stopping of Fission Fragments,” *Phys. Rev.*, vol. 58, pp. 654–655, Oct 1940.
- [30] J. A. Alvarez, *Simulación de la implantación iónica en cristales incluyendo baja energía y acumulación de dañado*. PhD thesis, Universidad de Valladolid, 1995.
- [31] P. M. Echenique, R. M. Nieminen, J. C. Ashley, and R. H. Ritchie, “Nonlinear stopping power of an electron gas for slow ions,” *Phys. Rev. A*, vol. 33, pp. 897–904, Feb 1986.
- [32] W. Brandt and M. Kitagawa, “Effective stopping-power charges of swift ions in condensed matter,” *Phys. Rev. B*, vol. 25, pp. 5631–5637, May 1982.
- [33] R. H. Ritchie, “Interaction of Charged Particles with a Degenerate Fermi-Dirac Electron Gas,” *Phys. Rev.*, vol. 114, pp. 644–654, May 1959.

- [34] J. Lindhard, A. Winther, and K. D. videnskabernes selskab, *Stopping Power of Electron Gas and Equipartition Rule*. Matematisk-fysiske meddelelser, Munksgaard, 1964.
- [35] N. Azziz, F. Hajnal, W. M. Lowder, and P. Murley, “Stopping Power and the Concept of Effective Ion Charge at Low Energies,” *Radiation Research*, vol. 132, no. 3, pp. 277–281, 1992.
- [36] D. Cai, N. Gronbech-Jensen, C. M. Snell, and K. M. Beardmore, “Phenomenological electronic stopping-power model for molecular dynamics and Monte Carlo simulation of ion implantation into silicon,” *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. 17147–17157, Dec 1996.
- [37] S. Kreussler, C. Varelas, and W. Brandt, “Target dependence of effective projectile charge in stopping powers,” *Phys. Rev. B*, vol. 23, pp. 82–84, Jan 1981.
- [38] M. W. Schmidt, K. K. Baldrige, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K. A. Nguyen, S. Su, T. L. Windus, M. Dupuis, and J. A. Montgomery Jr, “General atomic and molecular electronic structure system,” *Journal of Computational Chemistry*, vol. 14, no. 11, pp. 1347–1363, 1993.
- [39] P. Sigmund, *Particle Penetration and Radiation Effects: General Aspects and Stopping of Swift Point Charges*. 01 2006.
- [40] P. Sigmund, *Particle Penetration and Radiation Effects Volume 2: Penetration of Atomic and Molecular Ions*. 2014.
- [41] P. Sigmund and A. Schinner, “Is electronic stopping of ions velocity-proportional in the velocity-proportional regime?,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 440, 10 2018.
- [42] P. Sigmund and A. Schinner, “The bloch correction, key to heavy-ion stopping,” *Journal of Applied Physics*, vol. 128, no. 10, p. 100903, 2020.
- [43] O. S. Oen and M. T. Robinson, “Slowing-down time of energetic ions in solids,” *Journal of Applied Physics*, vol. 46, no. 12, pp. 5069–5071, 1975.
- [44] O. B. Firsov, “A qualitative interpretation of the mean electron excitation energy in atomic collisions,” *Soviet Physics JETP-USSR*, vol. 36, p. 1076–1080, 11 1959.
- [45] L. M. Kishinevskii *Bull. Acad. Sci. USSR, Phys. Ser. (Engl. Transl.)*, vol. 26, p. 11433, 1962.
- [46] “DPASS.” <https://www.sdu.dk/en/dpass>.
- [47] M. Murat, A. Akkerman, and J. Barak, “Can swift heavy ions create latent tracks in silicon?,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 269, no. 22, pp. 2649–2656, 2011.
- [48] C. Dufour and M. Toulemonde, “Models for the description of track formation,” in *Ion Beam Modification of Solids*, pp. 63–104, Springer, 2016.
- [49] M. T. Robinson and I. M. Torrens, “Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation,” *Phys. Rev. B*, vol. 9, pp. 5008–5024, Jun 1974.

- 
- [50] M. T. Robinson, “Computer simulation studies of high-energy collision cascades,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 67, no. 1, pp. 396–400, 1992.
- [51] E. Zarkadoula, G. Samolyuk, H. Xue, H. Bei, and W. J. Weber, “Effects of two-temperature model on cascade evolution in ni and nife,” *Scripta Materialia*, vol. 124, pp. 6–10, 2016.
- [52] E. Zarkadoula, G. Samolyuk, and W. J. Weber, “Effects of the electron-phonon coupling activation in collision cascades,” *Journal of Nuclear Materials*, vol. 490, pp. 317–322, 2017.
- [53] L. A. Marqués, M. Aboy, P. López, I. Santos, L. Pelaz, and G. Fisicaro, *Atomistic modeling of laser-related phenomena*. Editors Fuccio Cristiano and Antonino La Magna (Woodhead Publishing), 2021.

