

**TÍTULO:** Implementación de un módulo de acumulación de  
dañado tridimensional para el simulador de  
implantación iónica IIS.  
**AUTOR:** Jorge Lázaró Ortega  
**TUTOR:** Jesús Manuel Hernández Mangas  
**DEPARTAMENTO:** Electricidad y Electrónica

### **Miembros del Tribunal**

**PRESIDENTE:** Luis Alberto Bailón Vega  
**VOCAL:** Martín Jaraíz Maldonado  
**SECRETARIO:** Jesús Manuel Hernández Mangas  
**SUPLENTE:** Lourdes Pelaz Montes  
**FECHA DE LECTURA:** 25 de junio de 2003  
**CALIFICACIÓN:**

### **RESUMEN DEL PROYECTO**

Se ha implementado un módulo de acumulación de daño en el programa IIS (Ion Implant Simulator) basado en el modelo de Kinchin-Pease modificado, de modo que el IIS es capaz de simular el proceso de amorfización de la red cristalina durante la implantación iónica. Con ello se consigue simular adecuadamente implantaciones de dosis altas, así como conocer el estado de amorfización del cristal tras la implantación, tanto en una como en tres dimensiones. El modelo de daño ha sido adecuado para conseguir mejores velocidades de ejecución del programa, y permite la ejecución en paralelo. Se ha desarrollado un algoritmo de división de dosis, y otro de réplica incondicional de iones en su versión tridimensional. También es capaz de simular implantaciones múltiples.

### **ABSTRACT**

A damage accumulation mechanism based on the Kinchin-Pease modified model has been implemented in the IIS (Ion Implant Simulator) code, so this program is now able to simulate the amorphization process of crystalline lattice during ion implantation. High dose implantations can be simulated by IIS, and the lattice amorphization state after implantations can be calculated in one and three dimensions. The damage model has been adapted in order to improve the calculation speed, and allows parallel execution in heterogeneous clusters. A dose division algorithm has been implemented, and an unconditional ion trajectory replication method, used in three-dimensional simulations, has been developed. The program is also able to simulate multiple implantations.

### **PALABRAS CLAVE**

Implantación iónica, acumulación de daño, simulación de procesos, Kinchin-Pease.



# Agradecimientos

*Me gustaría dar las gracias a mi tutor de proyecto, el Dr. D. Jesús Manuel Hernández Mangas, por su ayuda y disponibilidad, así como por sus constantes ánimos.*

*También quisiera agradecer al Dr. D. Luis Alberto Bailón Vega por ofrecerme la posibilidad de hacer este proyecto y su continuo interés sobre la marcha del mismo.*

*Mi gratitud también al Departamento de Electricidad y Electrónica por facilitarme la elaboración de este proyecto.*

*Quiero agradecer de manera especial a mis padres su continuo apoyo. Agradecimiento que extiendo al resto de mi familia. A ellos dedico este trabajo.*

*Este trabajo también lo dedico a mis amigos de Electrónica y resto de oscuros, que en poco más de dos años hemos pasado infinidad de buenos ratos juntos.*

*La dedicatoria incluye a los viejos amigos del colegio, su compañía ha conseguido que parezca mentira que hayan pasado más de veinte años desde que nos conocimos.*

*Quisiera extender mi dedicatoria a los amigos de Isar, que entre todos hemos conseguido que para nosotros signifique más que un pueblo.*

*Y por último, ampliar mi dedicatoria a todo el mundo que ha estado a mi lado de una u otra forma en todos estos años. A todos ellos, gracias.*



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>9</b>
1.1. La implantación iónica . . . . .	9
1.1.1. El implantador iónico . . . . .	11
1.1.2. Acanalamiento . . . . .	13
1.1.3. Métodos experimentales de caracterización . . . . .	17
1.1.4. Aplicaciones de la implantación iónica . . . . .	21
1.2. Distribuciones de impurezas en una implantación iónica . . . . .	25
1.2.1. Ajustes analíticos . . . . .	26
1.2.2. Simulación por ordenador . . . . .	29
1.3. Antecedentes . . . . .	30
1.4. Objetivos . . . . .	31
1.5. Medios . . . . .	31
<b>2. Dañado de un semiconductor durante una implantación iónica</b>	<b>33</b>
2.1. Ideas básicas . . . . .	33
2.2. Tipos de defectos . . . . .	33
2.3. Recocido . . . . .	36
2.4. Simulación de la acumulación de daño - Estado del arte . . . . .	38
2.4.1. Modelos basados en la fórmula de Kinchin-Pease modificada . . . . .	39
2.4.2. Kinetic Accumulative Damage Model (KADM) . . . . .	39
2.4.3. Modelo de daño utilizado en el <i>TRICSI</i> . . . . .	41
<b>3. Implementación del modelo de daño</b>	<b>45</b>
3.1. Elección del modelo de Kinchin-Pease para la implementación del módulo de simulación de acumulación de daño . . . . .	45
3.2. Modelo de Kinchin-Pease modificado . . . . .	46
3.2.1. Fórmula original de Kinchin-Pease . . . . .	46
3.2.2. Fase de generación de defectos . . . . .	47

3.2.3. Fase de acumulación de daño . . . . .	48
3.2.4. Interacción con el daño previo . . . . .	48
3.3. Implementación del modelo . . . . .	50
3.3.1. Modelo de Kinchin-Pease rápido . . . . .	55
3.3.2. Implantación múltiple . . . . .	57
3.3.3. Algoritmo de división de dosis . . . . .	58
3.3.4. Paralelización del modelo 1D . . . . .	60
<b>4. Simulación del proceso de daño en tres dimensiones</b>	<b>67</b>
4.1. Implementación del modelo . . . . .	68
4.1.1. Peso efectivo de daño $W_{eff}$ . . . . .	68
4.1.2. Réplica incondicional de iones . . . . .	71
4.1.3. Otras prestaciones de la versión tridimensional . . . . .	73
4.1.4. Réplica condicional de iones . . . . .	74
<b>5. Resultados</b>	<b>75</b>
5.1. Boro en silicio . . . . .	75
5.2. Arsénico en silicio . . . . .	76
5.3. Fósforo en silicio . . . . .	79
5.4. Antimonio en silicio . . . . .	79
<b>6. Evaluación económica</b>	<b>87</b>
<b>7. Conclusiones</b>	<b>89</b>
7.1. Posibles mejoras . . . . .	90
<b>A. Manual de referencia del módulo de daño</b>	<b>93</b>
A.1. Palabras clave . . . . .	93
A.2. Opciones de compilación . . . . .	96
A.3. Listado de ejemplo . . . . .	97
A.4. Salidas del programa . . . . .	98
<b>B. Publicaciones</b>	<b>101</b>
B.1. Cumulative damage model in atomistic ion implant simulation . . . . .	103
B.2. Statistical 3D damage accumulation model for ion implant simulators . . . . .	109
B.3. Parallelization of a statistical 3D damage accumulation model for ion implant simulation . . . . .	115

---

B.4. Dose division algorithm: improvements of damage accumulation on ion implant simulators . . . . .	121
<b>C. Congresos</b>	<b>125</b>
C.1. 6 <sup>th</sup> International Conference on computer Simulation of Radiation Effects in Solids ( <i>COSIRES</i> ) . . . . .	127
C.2. 13 <sup>th</sup> International Conference on Ion Beam Modification of Materials ( <i>IBMM</i> ) .	129
C.3. 4 <sup>a</sup> Conferencia de Dispositivos Electrónicos ( <i>CDE</i> ) . . . . .	131
C.4. 4 <sup>a</sup> Conferencia de Dispositivos Electrónicos ( <i>CDE</i> ) . . . . .	135
<b>D. Código fuente</b>	<b>139</b>
D.1. Modelo unidimensional . . . . .	139
D.1.1. Archivo de cabecera de la versión 1D . . . . .	139
D.1.2. Archivo de funciones de la versión 1D . . . . .	141
D.2. Modelo tridimensional . . . . .	146
D.2.1. Archivo de cabecera de la versión 3D . . . . .	146
D.2.2. Archivo principal de la versión 3D . . . . .	148





# Índice de figuras

1.1. Esquema de un implantador iónico típico . . . . .	12
1.2. Vista de distintas posibilidades de acanalamiento . . . . .	14
1.3. Distribución de impurezas activadas en función del ángulo de rotación . . . . .	15
1.4. Tipos de frenado y situaciones en que son predominantes . . . . .	16
1.5. Simulación de los efectos del daño sobre el acanalamiento . . . . .	18
1.6. Esquema de un sistema de medida SIMS. . . . .	19
1.7. Espectro de energías resultado de una medida RBS . . . . .	21
1.8. Esquema del autoalineamiento de puerta en la fabricación de un MOSFET . . . . .	23
1.9. Esquema de la implantación de ajuste de la tensión umbral y de la implantación HALO . . . . .	24
1.10. Comparativa experimento-ajuste de una implantación de boro sobre un blanco de silicio amorfo . . . . .	28
2.1. Esquema la formación de daño en función del peso del proyectil . . . . .	35
2.2. Dependencia de la dosis crítica con la temperatura . . . . .	36
2.3. Activación de impurezas en función de la dosis y la temperatura . . . . .	38
3.1. Esquema de la división del cristal en cajas . . . . .	52
3.2. Diagrama de flujo del funcionamiento del algoritmo de acumulación de daño unidimensional (versión secuencial) . . . . .	53
3.3. Perfil de impurezas según se use o no la energía de corte . . . . .	54
3.4. Perfil de daño según se use o no la energía de corte . . . . .	54
3.5. Mejora de la resolución con el algoritmo de división de dosis . . . . .	60
3.6. Diagrama de flujo del funcionamiento del algoritmo de acumulación de daño unidimensional (versión paralela) . . . . .	61
3.7. Variación de la velocidad de cálculo con el número de procesos . . . . .	65
4.1. Esquema de la división del cristal en cajas . . . . .	68

4.2. Comparativa de la resolución de dañado en la versión que no usa el peso efectivo	
$W_{eff}$ . . . . .	69
4.3. Esquema del funcionamiento de la réplica incondicional de iones . . . . .	72
4.4. Comparativa de resultados entre modelo 3D sin réplica incondicional y con ella .	73
5.1. Perfiles de impurezas de implantaciones de B sobre Si<100> a varias energías . .	77
5.2. Perfiles de dañado de implantaciones de B sobre Si <100> a varias energías . . .	77
5.3. Perfiles de impurezas de dos implantaciones de As sobre Si <100> a 50 keV . . .	78
5.4. Perfil de dañado de una implantación de As sobre Si <100> a 50 keV . . . . .	78
5.5. Perfiles de impurezas de dos implantaciones de As sobre Si <100> a 100 keV . .	80
5.6. Perfil de dañado de una implantación de B sobre Si <100> a 100 keV . . . . .	80
5.7. Perfiles de impurezas de dos implantaciones de P sobre Si <100> a 50 keV . . .	81
5.8. Perfiles de dañado de dos implantaciones de P sobre Si <100> a 50 keV . . . . .	81
5.9. Perfiles de impurezas de dos implantaciones de P sobre Si <100> a 80 keV . . .	82
5.10. Perfiles de dañado de dos implantaciones de P sobre Si <100> a 80 keV . . . . .	82
5.11. Perfiles de impurezas de una implantación de Sb sobre Si <100> a 20 keV . . . .	83
5.12. Perfiles de dañado de dos implantaciones de Sb sobre Si <100> a 20 keV . . . .	83
5.13. Perfiles de impurezas de una implantación de Sb sobre Si <100> a 50 keV . . . .	85
5.14. Perfiles de dañado de dos implantaciones de P sobre Si <100> a 50 keV . . . . .	85
A.1. Visualización de un corte bidimensional de la concentración 3D de dopantes . . .	99
A.2. Visualización de un corte bidimensional del porcentaje de amorfización 3D . . . .	100

# Capítulo 1

## Introducción

La implantación iónica se ha convertido en el proceso tecnológico más empleado para impurificar el silicio durante los últimos 35 años sin que, a corto plazo, haya técnicas alternativas que amenacen seriamente esta supremacía [1, 2].

A grandes rasgos, el funcionamiento de esta técnica consiste en acelerar iones a energías en un rango entre varios keV's y algún centenar de keV's para que choquen contra un material blanco (que puede ser amorfo o cristalino), de modo que los iones penetren en él. Si el blanco sobre el que impactan es cristalino, los proyectiles dañan la estructura del cristal, pues en su recorrido pueden llegar a desplazar de su posición a gran cantidad de átomos constituyentes de la red, generando defectos en ella.

El estudio del dañado producido en el transcurso de una implantación es relevante para conocer qué propiedades del material se han visto afectadas o qué tratamientos (por ejemplo, de tipo térmico) deben ser aplicados para recuperar las propiedades de dicho material.

Para conocer mejor el proceso tecnológico de la implantación iónica se puede utilizar la simulación, y con este fin existe una variedad de programas en el mercado que siguen distintas técnicas. Algunos de estos programas son capaces de simular también el mecanismo de amorfización de la red cristalina.

### 1.1. La implantación iónica

Como ya se indicó, la implantación iónica se basa en acelerar unos iones para que impacten contra un blanco y penetren en él [1, 2].

A diferencia de otros procesos, como la difusión, es un método muy preciso para introducir una cierta cantidad de impurezas en un semiconductor, y además se puede efectuar a temperatura ambiente. La profundidad de penetración es bastante pequeña y dependiente de la energía de implantación. El máximo de concentración de impurezas se produce a una cierta distancia

de la superficie, otra diferencia frente a la difusión.

El número de átomos introducido (la dosis de la implantación) es fácilmente controlable, y depende del tiempo durante el que esta implantación se lleva a cabo y de la corriente del haz iónico.

A pesar de esto, la trayectoria de cada átomo individual introducido no es controlable ni predecible, pues la implantación iónica es un proceso estadístico. En su recorrido dentro del cristal la impureza va chocando con los átomos de la red y transfiriéndoles su energía hasta que ésta cae por debajo de un umbral y la impureza se detiene. Sin embargo, el promedio de los recorridos de un número elevado de proyectiles sí es controlable y predecible, y es lo que hace de esta técnica un proceso viable en la industria de los semiconductores, y que se pueda simular su comportamiento con programas basados en la aproximación de colisiones binarias, como el UT-MARLOWE [3], el UVA-MARLOWE [4], el IIS [5], y con programas basados en dinámica molecular, como el REED, el MD-RANGE, ...

La longitud total del recorrido que los iones efectúan a lo largo del cristal se llama rango  $R$ . Este recorrido no es rectilíneo y lo que interesa a efectos prácticos es la distancia del proyectil a la superficie, a lo que se llama rango proyectado  $R_p$ . La distribución de las impurezas dentro del cristal depende principalmente de:

- la energía suministrada a los iones en la implantación.
- la naturaleza del proyectil implantado. De este modo, los iones pesados penetran menos que los ligeros para una misma energía de implantación.
- la orientación de la red cristalina del blanco sobre el que se efectúa la implantación.

Mientras que en la difusión los proyectiles penetraban prácticamente lo mismo lateral que longitudinalmente, en la implantación no es así, y la distancia recorrida en la dirección del haz incidente es mucho mayor que la recorrida en las direcciones ortogonales a dicho haz.

Las principales ventajas de la implantación iónica son:

1. Permite un control muy preciso de la dosis, con independencia de la distribución de impurezas.
2. Es un proceso fácilmente reproducible, lo que resulta indispensable en la industria de los semiconductores.
3. Es un proceso muy rápido (una oblea de 16" se puede implantar en 6 segundos).
4. Se puede efectuar a temperatura ambiente.

donde  $I$  es la corriente del haz,  $A$  el área de implantación,  $t$  el tiempo de integración y  $q$  la carga del ion. Hay factores que afectan a la correcta medida de la dosis, como las partículas que impactan contra el material habiéndose neutralizado, o si en los choques se emiten electrones secundarios. Incluso se podría tener sputtering si átomos extraños provenientes, por ejemplo, de las paredes de la cámara de vacío son arrancados y penetran en el cristal.

### 1.1.2. Acanalamiento

El acanalamiento es un fenómeno que debe ser muy tenido en cuenta a la hora de simular el proceso de amorfización del cristal, pues afecta enormemente a la trayectoria de los proyectiles implantados. La disposición de los átomos de la red de los blancos cristalinos es tal que hay espacios abiertos por los que pueden circular los iones que están siendo implantados sin que apenas sufran colisiones. De estos iones se dice que están acanalados, pues a los espacios por los que se mueven se les llama canales. Debido a esta ausencia de colisiones de importancia, los iones no pierden tanta energía en su recorrido, y alcanzan rangos mayores.

La figura 1.2 muestra varias posibilidades de orientación del cristal. En la vista superior izquierda se representan los canales  $\langle 110 \rangle$ , que son los más amplios de la red cristalina del silicio. En el caso de que el cristal sea implantado en esta dirección, los proyectiles circulan acanalados (como en la situación 2 de la figura 1.4) y apenas sufren choques. Los casos superior derecho e inferior izquierdo representan otras direcciones de acanalamiento de canales más estrechos. Si el cristal es implantado según la orientación del caso inferior derecho de la figura 1.2, el ion entrará en el cristal colisionando continuamente, con lo que su trayectoria será mucho más aleatoria (como en la situación 1 de la figura 1.4), y los efectos del acanalamiento serán mucho menores que en los otros tres casos.

Según las condiciones de acanalamiento se obtienen unos perfiles más o menos profundos y con una forma característica que se muestra en la figura 1.3, donde se ve cómo la cola de acanalamiento va siendo mayor a medida que la dirección de implantación se alinea con el canal.

A medida que un ion penetra en el cristal va perdiendo su energía. Según el modelo de Lindhard, Scharff y Schott (modelo *LSS*) [1, 2], el proyectil pierde su energía mediante dos tipos de interacciones. Una de ellas es el *frenado electrónico*, en que la pérdida de energía es similar a la de una partícula moviéndose en un medio viscoso. El otro tipo de interacción es el *frenado nuclear*, en que la pérdida de energía se produce debido a las colisiones entre partículas cargadas, cuyos potenciales están apantallados por las nubes electrónicas.

En la figura 1.4 se muestran tres situaciones y la relevancia que en cada una de ellas tiene cada tipo de frenado. El frenado electrónico tiene relevancia cuando el número de colisiones

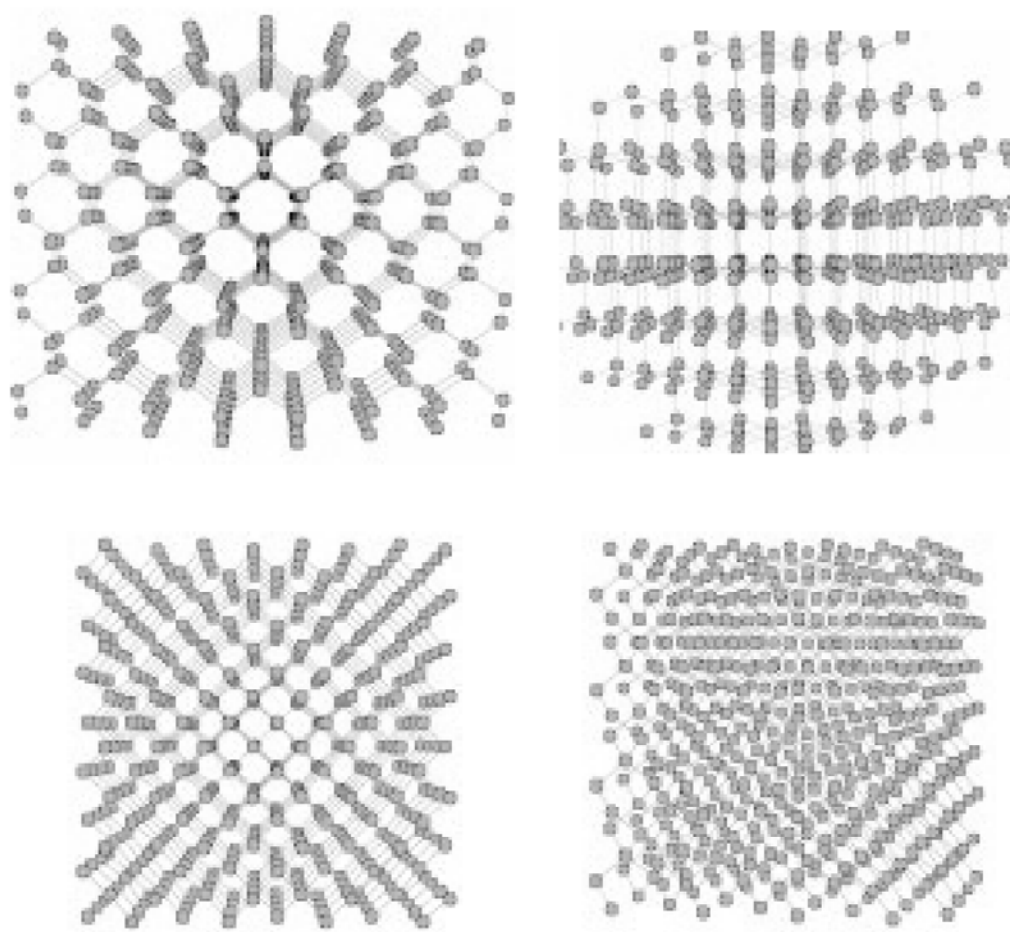


Figura 1.2: La figura muestra varias orientaciones del cristal de una red cristalina de silicio. En la vista superior izquierda los canales son amplios, lo que permite un mayor acanalamiento que en el caso inferior derecho [1].

es escaso, como se ve en la situación 2. Esto ocurre en los casos en que el proyectil se mueve acanalado. El caso opuesto aparece cuando hay colisiones fuertes contra los átomos de la red, lo que se representa en la situación 3: se transfiere gran cantidad de energía a dichos átomos, que se pueden llegar a poner en movimiento originando subcascadas. En la situación 1 se representa el caso intermedio, en que el proyectil va chocando casi aleatoriamente, y va perdiendo tanta cantidad de energía mediante frenado electrónico como mediante frenado nuclear.

La energía transferida a los átomos de la red puede provocar que éstos se pongan en movimiento, perjudicando la estructura cristalina del cristal y generando defectos que en un primer momento pueden ser vacantes e intersticiales aislados y que, posteriormente, se pueden agregar formando estructuras de defectos más complejas. La importancia del daño puede ser

son bajas (hasta  $5 \cdot 10^{13}$  at/cm<sup>2</sup>, que es además en el momento en que el dañado empieza a ser apreciable, como se ve en la figura 1.5-inferior), a medida que la dosis aumenta los perfiles son exactamente iguales en forma, pero desplazados en el eje de ordenadas. Sin embargo, con dosis mayores, la cola de acanalamiento es idéntica en todos los casos, mientras que los máximos de concentración sí corresponden a concentraciones más altas.

### 1.1.3. Métodos experimentales de caracterización

Las medidas experimentales que se utilizan a lo largo de esta memoria para las comparativas con los resultados de las simulaciones han sido obtenidas mediante las técnicas de espectrometría de masas de iones secundarios (SIMS) y de espectrometría de retrodispersión de Rutherford (RBS). En los dos siguientes apartados se ofrece una breve descripción de estas técnicas.

#### Espectrometría de masas de iones secundarios (SIMS)

Su nombre en inglés es Secondary Ion Mass Spectrometry, y es el principal método de medición de concentraciones de impurezas en el ámbito de la microelectrónica [6, 8]. Esta técnica es destructiva (produce daños irreparables en la muestra) y ofrece unas sensibilidades muy buenas (ver cuadro 1.1), válidas para la medición de concentraciones de dopantes y/o átomos contaminantes habituales en la microelectrónica. Su resolución espacial es también bastante buena.

Elemento	Especie primaria	Especie detectada	Límite de detección
B	O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	<sup>11</sup> B <sup>+</sup>	10 <sup>15</sup> at/cm <sup>3</sup>
Al	O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	<sup>27</sup> Al <sup>+</sup>	10 <sup>15</sup> at/cm <sup>3</sup>
P	Cs <sup>+</sup>	<sup>31</sup> P <sup>-</sup>	10 <sup>16</sup> at/cm <sup>3</sup>
As	Cs <sup>+</sup>	<sup>75</sup> As <sup>-</sup>	10 <sup>16</sup> at/cm <sup>3</sup>
Sb	Cs <sup>+</sup>	<sup>125</sup> Sb <sup>-</sup>	10 <sup>16</sup> at/cm <sup>3</sup>

Cuadro 1.1: Límites de detección de las medidas SIMS para algunas especies de interés en la implantación [6].

Su funcionamiento se basa en el uso de un haz primario de iones altamente focalizado que arranca átomos del material a analizar mediante un proceso de sputtering. Si los iones incidentes tienen energías bajas (entre 0.5 y 1.5 keV) los átomos arrancados son de las capas más externas. Si dichos átomos quedan ionizados, se les podrá acelerar mediante un campo eléctrico, y posteriormente se les podrá pasar a través de un analizador magnético.

Sólo una pequeña fracción de los átomos arrancados quedan ionizados, por lo que se procura elegir un haz primario adecuado de modo que la ionización sea la mayor posible y además se evite la formación de compuestos espurios que puedan afectar a la medida. Para ello, se suele

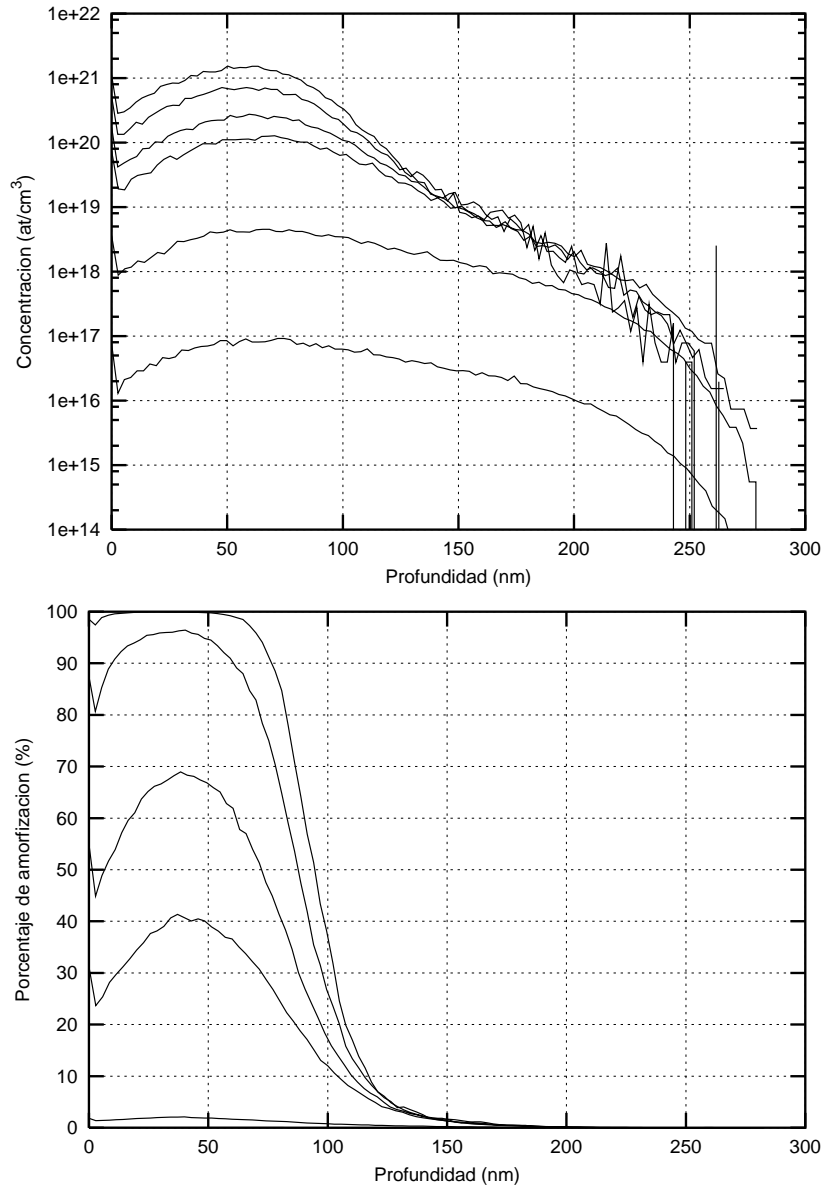


Figura 1.5: Simulación de los efectos del daño sobre el acanalamiento. La gráfica superior muestra los perfiles de impurezas, y la de la inferior los perfiles de daño. Corresponden a una implantación de boro en silicio ( $0^\circ, 0^\circ$ ) sobre la dirección  $\langle 100 \rangle$  con 15 keV. Las dosis implantadas son  $10^{12}$ ,  $5 \cdot 10^{13}$ ,  $10^{15}$ ,  $2 \cdot 10^{15}$ ,  $5 \cdot 10^{15}$  y  $10^{16}$  at/cm².



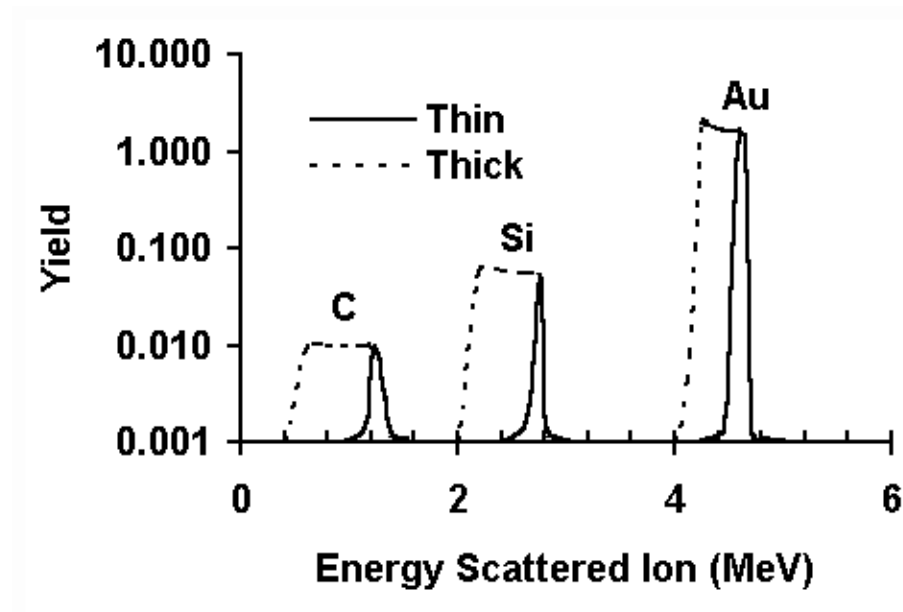


Figura 1.7: Espectro de energías resultado de una medida RBS.

#### 1.1.4. Aplicaciones de la implantación iónica

La implantación iónica se puede utilizar con muy distintos fines, no sólo en la industria de los semiconductores. A continuación se muestran algunas de ellas, profundizando en las que sí tienen relación con la electrónica [2, 4, 9], aunque en un último apartado se recogen aplicaciones de otro tipo.

##### Impurificación de semiconductores

Es la aplicación más extendida de la implantación iónica. Utilizando esta técnica se puede dopar el cristal con una gran variedad de especies. Se recuerdan algunas de las particularidades de la implantación especialmente ventajosas para la impurificación de semiconductores:

- La cantidad y distribución de impurezas implantada es controlable.
- Es un proceso homogéneo y repetible.
- El proceso se puede llevar a cabo a temperatura ambiente.
- Se pueden conseguir uniones muy estrechas, y distribuciones con una dispersión lateral muy pequeña.

Debido a su gran precisión y resolución es un elemento indispensable para la fabricación de los dispositivos de muy alta escala de integración (VLSI).

También se usa la implantación iónica para dopar el polisilicio, de modo que la resistencia por cuadro  $R_{\square}$  disminuya.

Otra aplicación dentro de la impurificación es la predeposición de impurezas para una posterior difusión, aunque sólo se debe utilizar con este fin si las necesidades de los dispositivos a fabricar justifican los altos incrementos de coste que conlleva.

### Ajuste de la tensión umbral en un MOSFET

Fue la primera aplicación comercial de la implantación iónica en la microelectrónica, hacia 1970.

En los MOSFET la tensión umbral  $V_t$  viene dada por la relación:

$$V_t = \phi_{MS} + \phi_B - \frac{Q_f}{C_{ox}} - \frac{Q_B}{C_{ox}}$$

donde  $\phi_{MS}$  es la función trabajo metal-semiconductor,  $\phi_B$  la barrera de potencial,  $Q_f$  la carga fija dentro del óxido,  $Q_B$  una carga dependiente de la impurificación del sustrato y  $C_{ox}$  la capacidad por unidad de área del óxido, considerándolo como una capa plano-paralela.

Si en la interfaz entre óxido y semiconductor se introdujera una carga  $Q_I$ , la tensión umbral  $V_t$  cambiaría en un valor:

$$\Delta V_t = \frac{Q_I}{C_{ox}} \quad (1.1)$$

En una implantación iónica es imposible que todos los proyectiles se paren justo en el mismo punto, de modo que aquéllos que no cruzan toda la capa de óxido no se ionizan y no cambian la tensión umbral. Por otra parte, los que sobrepasan esa interfaz y llegan a la zona neutra del silicio, tampoco afectan a  $V_t$ . Sólo las impurezas que se quedan en la zona de la interfaz provocan un cambio de la tensión umbral, de modo que para cambiarla conviene efectuar implantaciones que originen perfiles muy estrechos centrados en esa interfaz. En ese caso se pueden efectuar cálculos en base a la ecuación 1.1, aunque únicamente como primera aproximación, pues las condiciones adecuadas de implantación se deben encontrar experimentalmente. La implantación para ajustar la tensión umbral se debe efectuar en la zona indicada con la flecha en la figura 1.9.

Otra manera de ajustar la tensión umbral es efectuar implantaciones con bajas energías y corrientes de implantación antes de efectuar el crecimiento del óxido de puerta.

### Autoalineamiento de puerta en MOSFET

La litografía presenta unas tolerancias que en aspectos críticos como en el del canal de un MOSFET pueden resultar muy perjudiciales. Si la puerta se solapa con el drenador y/o con

- En semiconductores III-V el daño genera trampas que capturan portadores libres, convirtiendo el material en aislante.
- Mejora la velocidad de ataque, que puede llegar a ser hasta 5 veces mayor.
- Provocar *gettering*, para eliminar impurezas nocivas. Así, se produce daño en la parte posterior de las obleas mediante implantación y posteriormente se efectúa un tratamiento térmico. De este modo, las impurezas nocivas se pueden difundir por todo el cristal y quedan atrapadas en los defectos de la parte posterior de la oblea, dejando con menos concentración de impurezas nocivas la parte anterior de la oblea, que es la utilizada para construir los dispositivos.

### Aplicaciones en otros campos

La implantación iónica también se emplea en otros ámbitos, como en tratamientos de materiales para mejorar sus características físicas o químicas. Así, se ha demostrado que propiedades como la dureza, la resistencia a la fatiga, el coeficiente de fricción, la adherencia o la resistencia a la corrosión pueden ser mejoradas notablemente mediante la implantación iónica [10].

La implantación iónica ha encontrado repercusión, sobre todo, en el sector de la medicina. Se utiliza esta tecnología (usando habitualmente nitrógeno como ion) para disminuir el deterioro provocado por la fatiga en elementos metálicos que se implantan en el organismo en operaciones de caderas, de rodillas, implantes dentales, implantes de tornillos, filtros ópticos, espejos de rayos X, etc. Esta tecnología se puede aplicar sin problemas a la medicina porque los elementos que se implantan en estos casos son biocompatibles.

Otro ámbito en el que también se usa la implantación iónica es el tratamiento de metales para herramientas industriales de corte, filos de cuchillos, etc.

Hay otras aplicaciones que actualmente no son explotadas pero en las que ha demostrado su potencial, como en la industria de la automoción (principalmente en elementos de los motores, como cilindros, pistones, etc.), la aeroespacial (cojinetes, hélices de las turbinas).

Finalmente, otro ámbito en que la implantación iónica también tiene perspectivas es en el tratamiento de materiales no metálicos. De este modo se puede utilizar en componentes cerámicos de motores de combustión interna, tratamiento de plásticos, vidrios, etc.

## 1.2. Distribuciones de impurezas en una implantación iónica

En el momento de llevar a cabo una implantación iónica es deseable conocer cuáles van a ser los resultados de dicho experimento, es decir, se desea conocer la distribución final de impurezas

y cómo va a ser afectado el orden cristalino de dicha red. Para ello se utilizan métodos analíticos y numéricos.

Los métodos analíticos se basan en ajustar a distribuciones estadísticas los perfiles de impurezas. Dependiendo de las condiciones experimentales de la implantación, los parámetros o momentos de las distribuciones tendrán un valor que se puede obtener mediante interpolación a partir de tablas o gráficas existentes en la bibliografía.

Sin embargo, los métodos numéricos tratan de predecir los resultados experimentales mediante la simulación del comportamiento que tendría un número representativo de iones implantados. El comportamiento de este conjunto representativo se extrapola al total de los iones que experimentalmente se implantan obteniendo de este modo la distribución que se supone que tiene la totalidad de los iones de la implantación.

Los métodos numéricos ofrecen, generalmente, mejores predicciones que los analíticos, y en el caso de que los parámetros no estén tabulados para las condiciones experimentales de la implantación, son el único método de predecir la distribución de impurezas.

### 1.2.1. Ajustes analíticos

Puesto que en una implantación el número de iones implantados es sumamente elevado, se describe un perfil mediante una expresión estadística más o menos compleja y caracterizada en términos de sus momentos o parámetros. El primer momento  $\mu_1$  es  $R_p$ , el promedio de los rangos proyectados de los proyectiles, cuya expresión viene dada por:

$$\mu_1 = R_p = \frac{1}{\phi} \int_{-\infty}^{\infty} xC(x)dx$$

con  $x$  la coordenada en la dirección ortogonal a la superficie,  $\phi$  la dosis de implantación y  $C(x)$  la concentración de impurezas.

Los momentos superiores  $i$  ( $\mu_i$ ) se definen normalmente en términos del primer momento  $R_p$ , y vienen dados por:

$$\mu_i = \frac{1}{\phi} \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^i C(x)dx$$

En los siguientes apartados se describen algunos de estos ajustes.

### Distribución gaussiana

Como primera aproximación, la concentración de impurezas  $C(x)$  se puede modelar como si siguiera una distribución gaussiana simétrica dada por:

$$C(x) = C_p \exp \left( -\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right)$$

donde  $C_p$  es el valor de la concentración máxima de impurezas, que se alcanza en  $x = R_p$ .

Esta distribución viene descrita en términos de los dos primeros momentos, pues  $\Delta R_p$  (la desviación estándar del rango proyectado) se puede expresar en términos del segundo momento:

$$\Delta R_p = \frac{1}{\phi} \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^2 C(x) dx} = \sqrt{\frac{\mu_2}{\phi}}$$

Al integrar la expresión de  $C(x)$  entre  $-\infty$  y  $+\infty$  se obtiene la dosis de la implantación, que está relacionada con la desviación estándar del rango proyectado por medio de la ecuación:

$$\phi = \sqrt{2\pi} \Delta R_p C_p$$

### Distribución Pearson IV

Las distribuciones gaussianas son demasiado simples como para que la descripción de los perfiles sea completa, pues normalmente sólo se ajustan adecuadamente al experimental en la zona del pico de concentración.

Para conseguir mejores ajustes se usan distribuciones estadísticas con momentos normalizados de órdenes más elevados que la gaussiana, como esta, que es de cuatro momentos. Da mejores descripciones tanto en la parte superficial como en las colas de acanalamiento.

En lugar de utilizar directamente los momentos  $\mu_i$  se usan otros parámetros dependientes de ellos:

1. El rango proyectado  $R_p$
2. La desviación estándar del rango proyectado  $\Delta R_p$
3. El sesgo<sup>1</sup> o asimetría normalizada, que se obtiene con la fórmula:

$$\gamma = \frac{\mu_3}{\Delta R_p^3}$$

4. La curvatura normalizada<sup>2</sup>, cuya expresión viene dada por:

$$\beta = \frac{\mu_4}{\Delta R_p^4}$$

La concentración de impurezas sigue la siguiente ecuación:

$$n(x) = \frac{\phi}{n_0} \exp \left[ \frac{1}{2b_2} \ln(|b_2 x'^2 + b_1 x' + b_0|) - \frac{b_1/b_2 + 2a}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}} \arctan \left( \frac{2b_2 x' + b_1}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}} \right) \right]$$

---

<sup>1</sup>Del término inglés *skewness*

<sup>2</sup>Del término inglés *kurtosis*

en que los parámetros introducidos son:

$$\begin{aligned} a &= -\gamma\Delta R_p(\beta + 3)/A \\ b_0 &= -\Delta R_p^2(4\beta - 3\gamma^2)/A \\ b_1 &= a \\ b_2 &= -(2\beta - 3\gamma^2 - 6)/A \end{aligned}$$

donde el parámetro  $A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$ ,  $x' = x - R_p$ , y se debe verificar que  $4b_0b_2 - b_1^2 > 0$

Observando la figura 1.10 se puede comprobar que las distribuciones gaussiana y Pearson IV ofrecen un buen ajuste en el máximo de impurezas y en las zonas más profundas de cada curva. Sin embargo, la distribución Pearson IV ofrece un mejor ajuste en la zona superficial, zona en la que la gaussiana da un ajuste bastante pobre.

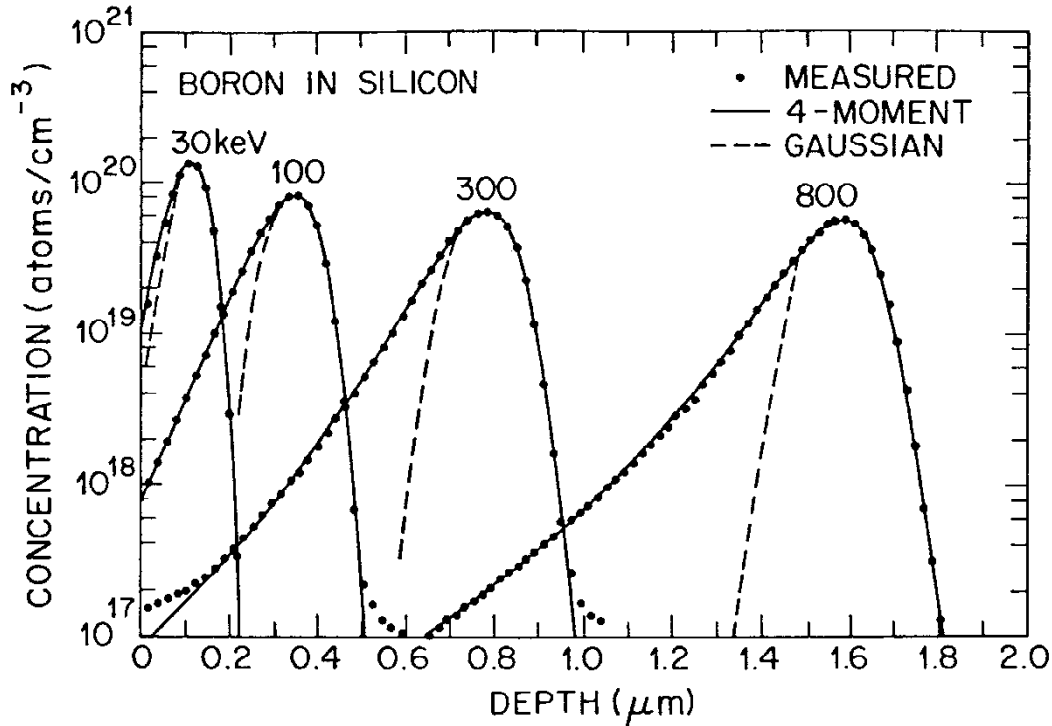


Figura 1.10: Perfil de impurezas de una implantación de boro sobre un blanco de silicio amorfo. Se comparan los datos experimentales con dos ajustes: una distribución gaussiana y una distribución Pearson IV [6].

### Distribución Dual-Pearson

Puesto que los efectos de acanalamiento no son descritos por ninguno de los dos anteriores modelos, se introduce un nuevo modelo que es una combinación ponderada de dos distribuciones tipo Pearson IV: una que describe la dispersión aleatoria,  $f(x)$ , y la otra los efectos de

acanalamiento,  $g(x)$ . Cada una de las distribuciones tiene sus cuatro parámetros, y un noveno parámetro aporta su importancia relativa (la dosis relativa). La suma de las dosis de cada distribución debe sumar la dosis total:

$$D_T = \int_{-\infty}^{\infty} [\alpha f(x) + (1 - \alpha)g(x)] dx$$

### Distribuciones laterales

Resulta bastante más difícil medir perfiles laterales que perfiles en profundidad, por lo que en muchas ocasiones, dadas resoluciones de los datos experimentales, en las comparativas basta con una distribución gaussiana del tipo:

$$C(x, y) = \frac{C(x)}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{\perp}} \exp\left(\frac{-y^2}{2\Delta R_p^2}\right) \quad (1.2)$$

con  $C(x)$  el calculado con alguna de las distribuciones anteriormente indicadas y  $\Delta R_{\perp}$  la desviación estándar de la dispersión lateral.

En el caso de que se deseen describir los resultados de una implantación a través de una máscara, se debe integrar la ecuación 1.2 a las áreas por las que entren los iones, con lo que se originan ecuaciones mucho más complejas que Sze recoge en la referencia [6]

#### 1.2.2. Simulación por ordenador

Si se quieren conocer los perfiles resultantes de implantaciones efectuadas en cualquier condición experimental, la única solución viable es la simulación con ordenadores utilizando cálculo numérico.

Para que un simulador del proceso tecnológico de la implantación iónica sea completo debe considerar los efectos de la acumulación de daño.

Existen varios modelos de acumulación de daño (se analizarán algunos en el apartado 2.4). A continuación se presenta una muy breve reseña acerca de cómo consideran el daño algunos programas que son utilizados en distintos simuladores basados en la aproximación de colisiones binarias (BCA<sup>3</sup>):

- **MARLOWE**

Es un programa [11] ampliamente conocido y que ha sido la base para otros muchos programas similares. En sus últimas versiones sí permite la acumulación de daño de las diferentes cascadas de iones. Se usan tablas para almacenar los defectos existentes, y utiliza un parámetro ajustable que es el radio de captura de una vacante ( $VCR$ ).

---

<sup>3</sup>Del inglés *Binary Collision Approximation*

- *UT-MARLOWE*

Este programa [3] está basado en el anterior y está desarrollado en la Universidad de Austin (Texas). En lo referente al dañado, incorpora dos modelos: el de Kinchin-Pease y el cinético acumulativo (KADM<sup>4</sup>). Ambos serán analizados más en profundidad en la sección 2.4.

- *UVA-MARLOWE*

Es otro programa [4] que está basado en el código del *MARLOWE* y que se desarrolló en la Universidad de Valladolid. Utiliza un modelo de acumulación de dañado y recombinación de defectos propio que usa un solo parámetro ajustable llamado distancia máxima de recombinación  $d_r$ , utilizada para la recombinación de pares vacante-intersticial.

- *VISTA-MCIMPL*

Es el módulo de implantación iónica del programa de diseño VISTA de la universidad Técnica de Viena. Incorpora un modelo de acumulación de dañado [12] capaz de predecir la aparición de capas amorfas en un monocristal de silicio con un modelo basado en una densidad crítica de dañado, pero requiere un gran número de parámetros ajustables.

- *TRICSI*

El nombre del programa corresponde a *TR*ansport *I*ons into *C*ystal-*S*ilicon, desarrollado en Corea. Incorpora un modelo de dañado relativamente complejo [18] y que necesita de un gran número de parámetros ajustables dependientes de la especie del proyectil implantado.

- *Crystal-TRIM*

Forma parte del simulador multidimensional de varios procesos tecnológicos *DIOS*<sup>5</sup>. Es una combinación de los programas *MARLOWE* y *TRIM* (el *TRIM* es un simulador de implantación sobre blancos amorfos). Su modelo de dañado requiere un elevado número de parámetros ajustables según la especie implantada y las condiciones de implantación.

### 1.3. Antecedentes

El programa IIS (Ion Implant Simulator) es un simulador de implantación iónica desarrollado por Jesús Manuel Hernández Mangas en el departamento de Electricidad y Electrónica de la Universidad de Valladolid [5, 9]. Parte de la base del programa UVA-MARLOWE [4], programado en Fortran y elaborado en ese mismo departamento, aunque el IIS está programado en C++ y es de nueva creación e independiente de aquél. Usa un solo parámetro ajustable para el

<sup>4</sup>Del inglés *Kinetic Accumulative Damage Model*

<sup>5</sup>Siglas de *Diffusion Implantation Oxidation Simulator*



frenado electrónico, y está dotado de prestaciones como un algoritmo de sucesos poco frecuentes, cálculo paralelo, etc.

Al comienzo de la elaboración de este proyecto, el IIS carecía de un módulo de acumulación de daño que permitiera simular el proceso de amorfización de la red al efectuar una implantación iónica sobre un blanco parcial o totalmente cristalino.

Como consecuencia de esta carencia, las simulaciones de implantaciones de dosis altas no ofrecían buenos resultados, por lo que resultaba conveniente dotar al programa de un módulo de daño capaz de ofrecer buenos perfiles de impurezas con esas dosis, además de suministrar el estado del daño en cada zona del cristal al término de las simulaciones.

## 1.4. Objetivos

Teniendo en cuenta los antecedentes indicados, al comienzo de la elaboración del proyecto se proponen los siguientes objetivos:

- Dotar al programa IIS de un módulo de acumulación de daño tridimensional capaz de simular el proceso de amorfización de la red y los efectos de las dosis de implantación altas. Este modelo se implementa a partir de modelos ya existentes.
- El modelo de daño debe tener fundamentos físicos, así como un solo parámetro ajustable.
- El módulo de daño debe integrarse plenamente en el programa IIS, sin que ninguna de las prestaciones que tenía se vea perjudicada, y sin que los tiempos de ejecución queden demasiado penalizados. Los recursos del sistema requeridos por el módulo tampoco deben ser excesivos.

## 1.5. Medios

Los medios que se han utilizado para desarrollar el proyecto son propiedad del departamento de Electricidad y Electrónica de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Telecomunicación de la Universidad de Valladolid. Durante todo este tiempo se han empleado:

- Medios hardware:
  - Estación de trabajo multiprocesador “Digital AlphaServer 4100”.
  - Estación de trabajo “Digital DEC 3000”.
  - Ordenador personal.
  - Impresora láser y escáner.

- Medios software:
  - Entornos UNIX y Windows'98.
  - Simulador IIS.

## Capítulo 2

# Dañado de un semiconductor durante una implantación iónica

### 2.1. Ideas básicas

Una gran desventaja de la implantación iónica es la creación de multitud de defectos debido a los choques de los proyectiles contra los átomos de la red cristalina. El desorden aparecido en la red debe ser posteriormente reparado mediante recocidos a altas temperaturas, para que así el material sea electrónicamente funcional.

El conocimiento del dañado de la red cristalina producido durante la implantación iónica y su posterior eliminación mediante el recocido es especialmente relevante si las dosis implantadas son elevadas.

Las técnicas directas que se usan para el estudio de la situación de amorfización de la red cristalina son la espectroscopía de iones retrodispersados (RBS), la resonancia paramagnética de electrones, la microscopía electrónica y las técnicas de acanalamiento.

También hay técnicas indirectas basadas en efectos debidos al dañado de la red cristalina. Entre ellas se encuentra el cambio en el espectro de reflexión de la superficie del cristal, que repercute en un cambio del color (tiende a aclararse). También propiedades como la dureza se ven afectadas como consecuencia de la amorfización de la red, así como propiedades electrónicas del material, pues, por ejemplo, cambia el tiempo de vida de los portadores y su movilidad.

### 2.2. Tipos de defectos

Los principales tipos de defectos que se crean en la red del silicio durante una implantación iónica son:

- Pares vacante-intersticial (o de Frenkel). Son los que se crean más abundantemente, pero son fácilmente eliminados, pues a temperaturas de 100 K desaparecen.

- Divacantes. Son las que se crean cuando un proyectil desplaza a varios átomos. Se eliminan calentando hasta los 550-600 K.
- Pares vacante-impureza. Los pares vacante-impurezas de tipo III se eliminan a 500 K, mientras que los pares vacantes-impurezas del tipo V a temperaturas entre 900 y 500 K.
- Dislocaciones. Consisten en agregados de defectos puntuales de cualquiera de los anteriores tipos. También se pueden formar como consecuencia de las tensiones producidas en el proceso de implantación. Sólo desaparecen tras un proceso intenso de recocido, por ejemplo, varias horas a temperaturas del orden de 1300 K.

El tipo de daño que crea un proyectil a lo largo de su recorrido depende de si éste es más ligero o pesado que el material que constituye el cristal, como se ve en la figura 2.1. Un ion ligero transfiere mucho más lentamente su energía al blanco mediante frenado nuclear de lo que lo hace un ion pesado, por lo que su rango  $R$  es mucho mayor. Así, en una implantación con iones ligeros, los átomos de la red que son desplazados reciben poca cantidad de energía en las colisiones, y al ponerse en movimiento no crean muchos defectos antes de ceder toda su energía y detenerse, por lo que las concentraciones de defectos no son altas. Además, el daño se dispersa en un volumen elevado, a lo largo de todo el rango del proyectil.

El caso de los iones pesados es muy diferente. En cada colisión transfieren a los átomos de la red gran cantidad de energía, por lo que el alcance del ion es mucho menor. Los átomos de la red, al recibir gran cantidad de energía, son capaces de producir, a su vez, una gran cantidad de defectos al ponerse en movimiento. Al tratarse de iones pesados el rango es pequeño y el frenado nuclear es mucho más relevante que el electrónico, con lo que se transfiere gran cantidad de energía en un volumen pequeño de la red. Se tiene más concentración de defectos en un volumen mucho más pequeño que en el caso de las implantaciones de iones ligeros.

Si la implantación está siendo efectuada a baja temperatura, los defectos creados apenas tendrán posibilidad de desplazarse de su posición, por lo que lo más probable es que permanezcan inalterados. Si la temperatura del blanco es algo mayor, los átomos podrán difundir más fácilmente a lo largo del cristal, por lo que los defectos se podrán mover y así el daño se puede ir reparando si se recombinan unos defectos con otros, o al contrario, irse acumulando con otros defectos y así formar agregados. Si la temperatura es suficientemente alta, el auto-recocido puede ser tan relevante que incluso implantaciones con iones pesados dejen el cristal poco dañado.

Se llama “dosis crítica” a la mínima dosis para que el blanco quede amorfizado. Es dependiente de la temperatura de implantación y del tipo de proyectil utilizado. Se puede comprobar en la figura 2.2 cómo proyectiles pesados (como el antimonio) necesitan una dosis de

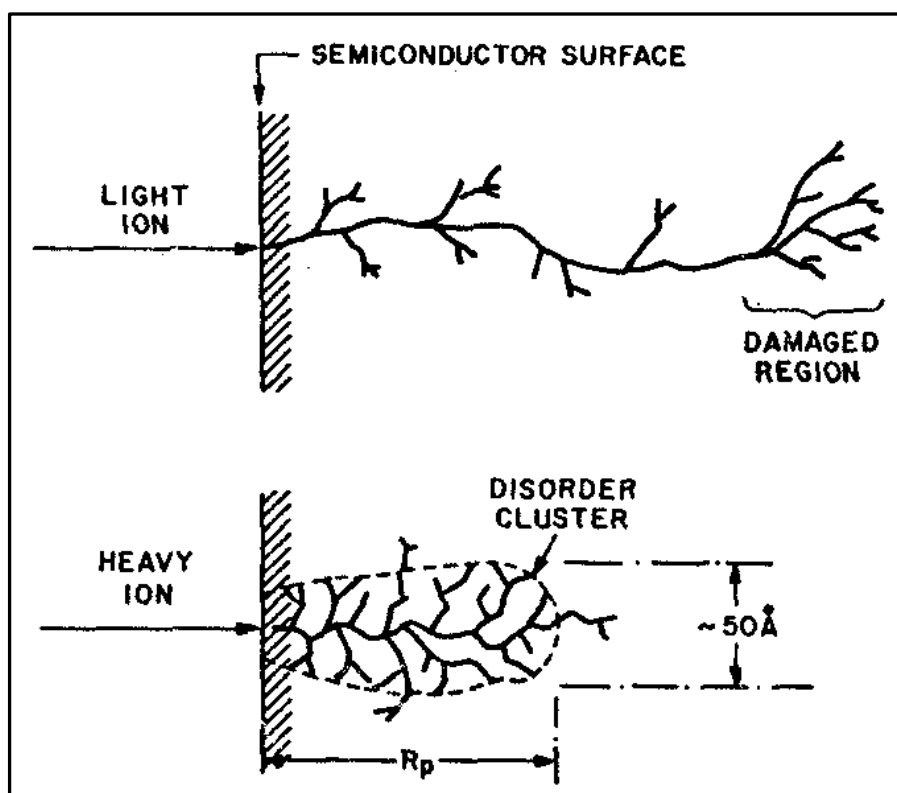


Figura 2.1: Esquema la formación de daño en función del peso del proyectil [6].

implantación baja para conseguir una capa totalmente amorfa. Por el contrario, según esta gráfica, iones más ligeros (como el boro) no llegarían a formar una capa totalmente amorfa si el blanco se implanta a temperatura ambiente.

En algunos semiconductores, como el GaAs, no se llegan a formar capas amorfas, sino que tras las implantaciones de alta dosis el material se queda policristalino. Esto se debe a que estos materiales tienen una mayor tendencia a reordenarse durante la implantación, por lo que finalmente se obtiene un material cristalino con una gran cantidad de dislocaciones. A pesar de no que no llegan a un verdadero estado amorfo, también se le llama, por abuso del lenguaje, estado “amorfo”.

Cuando se implanta un material amorfizado se bloquean los canales y los perfiles tienden a una distribución gaussiana debido a la naturaleza aleatoria de la estructura. Si se desea implantar sobre un blanco amorfizado, en ocasiones se implantan especies inertes (argón, neón o silicio) para dañar la red antes de efectuar la implantación deseada. En otros casos la implantación se efectúa a bajas temperaturas para evitar que los defectos se recombinen.

No sólo la implantación afecta a la red cristalina. También puede afectar al óxido de campo o al óxido nativo que la recubren. En el caso del óxido de campo, puede romper enlaces del óxido

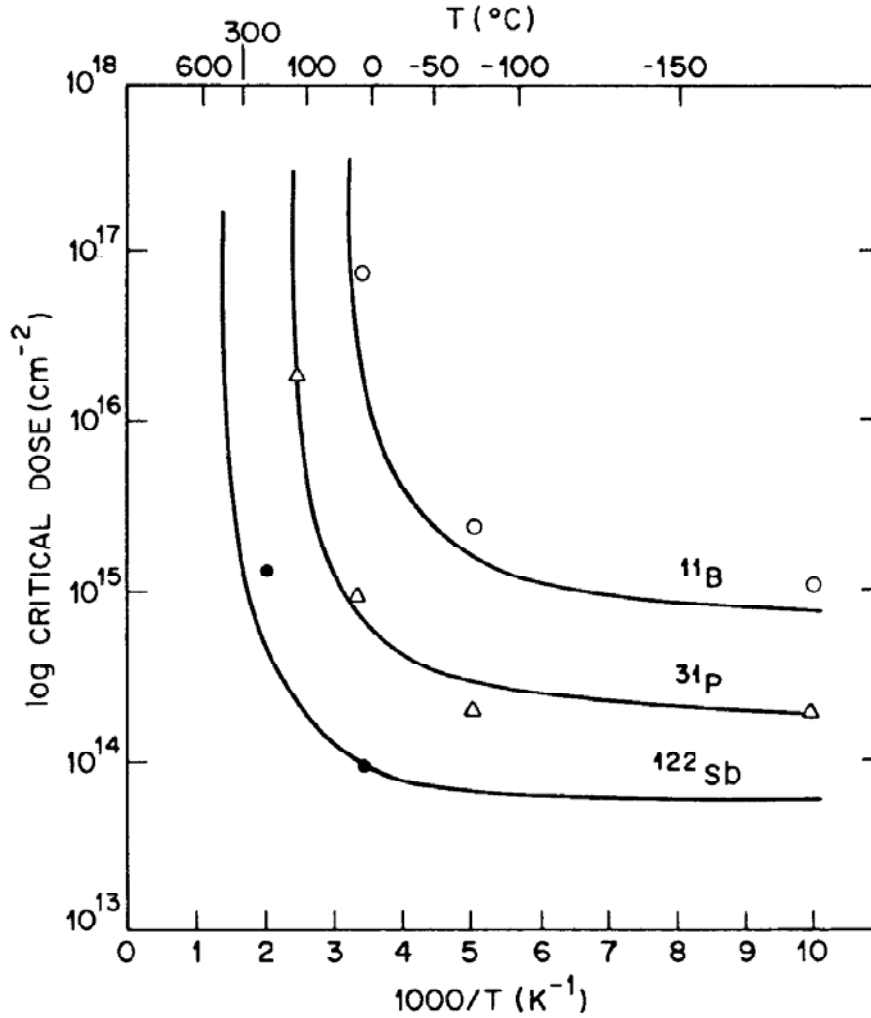


Figura 2.2: Dependencia de la dosis crítica con la temperatura para varias especies [6].

provocando que se le pueda atacar más fácilmente. Además también afecta a las fotorresinas: el dañado sobre una fotorresina que está siendo usada como máscara puede romper cadenas moleculares de modo que sea mucho más difícil retirarla. Por ello algunas fotorresinas podrían no ser útiles para implantaciones de alta dosis.

### 2.3. Recocido

El recocido<sup>1</sup> [13] es un proceso tecnológico que se debe efectuar tras una implantación iónica y que tiene dos fines principales:

- Activar eléctricamente las impurezas implantadas. Con ello las impurezas pasan a ocupar

<sup>1</sup>En inglés *annealing*

un lugar sustitucional en la red cristalina en lugar de una posición intersticial.

- Reparar el dañado en la red cristalina, que es problemático en cuanto a que degrada prestaciones electrónicas como el tiempo de vida o la movilidad de los portadores.

En realidad, mediante el recocido no se consigue íntegramente ninguno de estos dos objetivos, pues no se llega a activar el total de las impurezas, y tampoco se recupera un orden perfecto. Debido a esto, se efectúan distintos tipos de recocido según las necesidades de los dispositivos y el diseño del circuito para el que se va a utilizar el blanco.

Los recocidos térmicos vienen a durar aproximadamente media hora, con una temperatura que depende de la aplicación para la que se va a usar la pieza a tratar y del tratamiento que dicha pieza haya tenido hasta ese momento (típicamente para el silicio está en el rango entre los 1000 y 1200 K). De este modo, no se pueden recocer a altas temperaturas y durante tiempos largos muestras en las que se puedan difundir las impurezas o degradar los sustratos semiconductores (por ejemplo, el GaAs no se puede calentar por encima de los 670 K).

Para evitar que en la fase de recocido la difusión perjudique a los perfiles de impurezas se utilizan los recocidos térmicos rápidos (RTA<sup>2</sup>).

Durante los recocidos se intenta reparar el dañado cristalino, lo que requiere una energía de activación de 5 eV, evitando en lo posible la difusión, cuya energía de activación es de 3 ó 4 eV. A temperaturas suficientemente altas, la difusión es más lenta que el reordenamiento de la red cristalina. El recocido térmico habitual es un proceso demasiado lento en el que se produce una difusión de impurezas innecesaria. Esto es lo que se trata de evitar con las distintas variedades de RTA [6], pues con este recocido se calientan las obleas durante un tiempo menor que 2 ó 3 segundos (puede llegar a ser del orden de nanosegundos), de modo que se consigue reparar el desorden minimizando la difusión. Las temperaturas a que se efectúa el RTA rondan los 1300 K. Son especialmente importantes en aplicaciones de muy alta escala de integración (VLSI), en que se usan uniones muy estrechas.

Las regiones que han sido completamente amorfizadas son más fáciles de reordenar mediante un recocido que las regiones cristalinas parcialmente amorfizadas. Esto se debe a que en las primeras los átomos que constituyen los defectos tienen que recorrer distancias cortas para ubicarse en su posición cristalina. Sin embargo, si hay pocos defectos, estarán aislados y se deben desplazar grandes distancias y, por lo tanto, se requiere una temperatura más alta y un tiempo más largo de recocido. Este efecto se observa en la figura 2.3. Representa la fracción de impurezas activadas en función de la temperatura para una serie de implantaciones de fósforo sobre silicio con una energía de 280 keV y varias dosis. Se observa que hasta dosis intermedias,

---

<sup>2</sup>En inglés, *Rapid Thermal Annealing*.

cuanto mayor es la dosis implantada, más complicado es activar las impurezas. El porcentaje de activación de impurezas da una idea también de la restauración del orden cristalino, así, cuanto mayor es el porcentaje de impurezas activadas, mayor es el reordenamiento de la red cristalina. Hay un umbral a partir del cual se amorfiza completamente esa zona de red cristalina (lo que en esta figura ocurre para una dosis de entre  $3 \cdot 10^{14}$  y  $10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>). Para dosis mayores que dicho umbral es más fácil activar las impurezas y restaurar el orden cristalino.

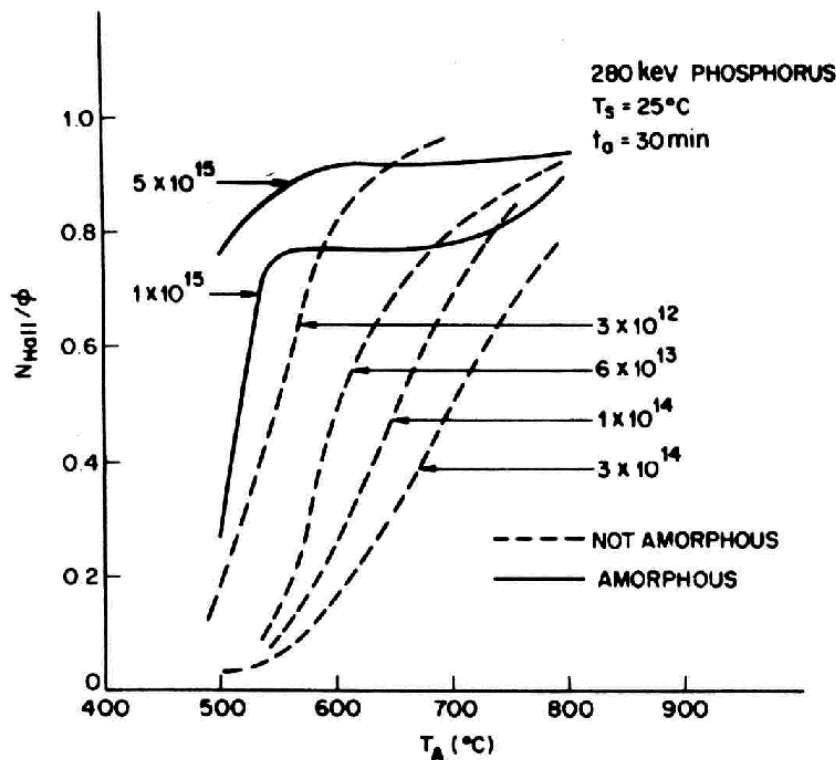


Figura 2.3: En ordenadas se muestra la fracción de dopado activado para distintas dosis y distintas temperaturas [6].

## 2.4. Simulación de la acumulación de daño - Estado del arte

Hay una gran variedad de modelos que pretenden dar cuenta del proceso de la amorfización cristalina en el transcurso de una implantación iónica. Parte de ellos efectúan un análisis estadístico de la situación de daño del cristal, como los basados en la fórmula modificada de Kinchin-Pease. Otros, más deterministas, buscan dar una descripción más detallada de este proceso.

A continuación se resumen varios de los modelos encontrados en la bibliografía.



### 2.4.1. Modelos basados en la fórmula de Kinchin-Pease modificada

Estos modelos [3, 14, 15, 16] dan cuenta del proceso de amorfización de un modo sencillo, a partir de la energía depositada en cada región del cristal. Están basados en la fórmula de G. H. Kinchin y R. S. Pease [17] y son de tipo estadístico. Consideran tres fases principales: una de generación de daño, otra de recombinación o acumulación de daño propiamente dicho y, por último, otra de interacción de los iones implantados con el daño ya existente.

En la fase de generación de daño se calcula el número de defectos generados durante las colisiones del proyectil contra los átomos de la red mediante un método bastante simple. Para ello se tiene en cuenta la energía transferida a la red cristalina mediante el frenado de tipo nuclear, pues el frenado electrónico es de tipo viscoso y no provoca daño cristalino. El número de defectos que aparece en la colisión está relacionado linealmente con la energía transferida en forma nuclear.

Tras cada colisión, en la fase de acumulación de daño, se estima la cantidad de defectos que sobreviven a la recombinación y contribuyen al daño de la red. Dicha estimación se efectúa teniendo en cuenta el número de defectos puntuales que se han creado en la colisión y el nivel de amorfización de la red cristalina. La saturación de defectos provoca que a medida que la densidad de defectos en una zona del cristal va siendo mayor, el número de defectos que sobreviven a la recombinación es cada vez menor. Al alcanzar el nivel de saturación de daño (densidad a partir de la cual el cristal pasa a considerarse amorfo) ningún defecto sobrevive a la recombinación.

La interacción de los iones implantados con el daño ya existente en la red se simula de distintos modos, sobre los que se profundizará en el apartado 3.2.4.

Una versión modificada del modelo de daño de Kinchin-Pease es la que se ha implementado en el programa IIS. En el capítulo 3 se analiza más pormenorizadamente este modelo

### 2.4.2. Kinetic Accumulative Damage Model (KADM)

Es otro modelo [3] también usado para la simulación de la acumulación de daño en el transcurso de una implantación iónica. Su nombre proviene de las ecuaciones cinéticas que se usan para la simulación de la difusión de defectos e interacción entre ellos.

Según este modelo, los procesos físicos relativos a la producción del daño que ocurren a lo largo de una implantación iónica se dividen en dos fases fundamentales: la de producción de defectos y la de difusión e interacción de los defectos anteriormente creados.

En la primera fase, a la vez que se calcula la trayectoria de un proyectil mediante la aproximación de colisiones binarias, se va acumulando la información acerca del daño que provoca a lo largo de su recorrido. Esta primera fase en una implantación real dura del orden de unos

pocos picosegundos.

La segunda fase comienza a continuación, y dura hasta que un nuevo proyectil impacta sobre esa zona concreta. Para implantaciones de las habituales, este proceso dura del orden de los milisegundos. A continuación, durante una cantidad de tiempo determinada por la velocidad de implantación<sup>3</sup> y el patrón de muestreo<sup>4</sup>, se simula la difusión e interacción entre los defectos creados. De este modo los siguientes iones en ser simulados pueden interaccionar con el daño ya existente. En sus trayectorias, producirán más daño, que se acumulará sobre el que ya había siguiendo las reglas indicadas por el modelo.

La fase de producción de defectos apenas se ha analizado debido a que, básicamente, consiste en simular las cascadas completas teniendo en cuenta qué átomos han sido desplazados de su posición y las posiciones que éstos han dejado desocupadas. La fase de difusión de defectos sí se analizará más a fondo, dividiéndola en la subfase de difusión de defectos y la subfase de interacción entre defectos.

### Subfase de difusión de defectos

Dado que es un modelo determinista, tras la simulación de la trayectoria del proyectil se simula la difusión de defectos para un cierto período de tiempo. Se considera que sólo las vacantes e intersticiales simples son móviles, de modo que las vacantes pueden moverse entre posiciones de red, mientras que los intersticiales se pueden desplazar y ubicar sólo en determinadas direcciones del cristal.

Para determinar los movimientos de los defectos se utiliza un modelo de Monte Carlo que genera un número aleatorio con el que se selecciona uno de los vectores de salto que determina la dirección en que se va a mover el defecto.

Los defectos móviles tendrán una probabilidad por unidad de tiempo de desplazarse a otro lugar cercano dada por la expresión  $\nu = \nu_0 e^{-E_m/kT}$ , donde  $\nu_0 \sim 10^{13}$ /segundo,  $k$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura del sustrato.  $E_m$  es la energía de migración de un defecto, que en el caso del silicio se ha determinado experimentalmente que para una vacante es de 0.45 eV, y para un intersticial, 0.55 eV.

Para el caso de la estructura cristalina cúbica centrada en las caras hay dos juegos de saltos, cada uno con 4 vectores de una dirección y módulo predeterminados. Dependiendo de la posición que el defecto ocupe en la red, el salto deberá pertenecer a uno u otro de los juegos.

---

<sup>3</sup>Del inglés *dose rate*.

<sup>4</sup>Del inglés *scanning pattern*.

### Subfase de interacción entre defectos

Se engloban en este apartado la recombinación intersticial-vacante, los agregados del mismo tipo de defectos, la formación de complejos defectos-impurezas, la emisión de defectos móviles por parte de los agregados, los efectos de superficie, etc.

El modelo define un radio de interacción entre defectos. Para defectos simples, este radio se toma  $r_0 = 0,4a$  ( $a$  es el parámetro de red, que en el caso del silicio es  $a = 5,431 \text{ \AA}$ ). Para agregados de  $n$  defectos el radio de interacción se define como  $r = \sqrt[3]{n}r_0$ . Se supone que los agregados de defectos están esféricamente distribuidos.

Se definen unas reglas de interacción para los defectos que se encuentran a una distancia menor al radio de interacción. De este modo, se indica qué comportamiento siguen al llegar a una superficie (que funciona como un sumidero de defectos), cuándo se produce una recombinación entre defectos, cuándo se agregan o disgregan, cuándo se forman complejos, etc.

### Amorfización

Una vez que la concentración de defectos alcanza una concentración crítica en una determinada zona, se considera que dicha zona ha sido completamente amorfizada. A partir de ese momento, las reglas de interacción entre defectos se dejan de aplicar allí, y si llega un defecto más, se puede elegir entre aniquilarlo o que retorne a la celda cristalina de la que procedía. La densidad crítica de defectos para considerar una zona totalmente amorfizada se toma como un 10 % de la densidad atómica de la red.

Para usar este modelo el cristal se divide en celdas tridimensionales, y con el fin de que sea computacionalmente más efectivo se usa una réplica incondicional de trayectorias. Para obtener una buena resolución, tanto en las concentraciones de impurezas como en el estado de amorfización de la red, sólo se simulan las subcascadas provocadas por algunos iones, mientras que de otros únicamente se simula su trayectoria, como si no generaran daño. Esto se basa en que con este modelo se necesitan muchos menos iones para conseguir una descripción suficientemente precisa del daño que para conseguir un perfil de impurezas de similar precisión estadística.

Al tratarse de un modelo no estadístico, los proyectiles interaccionan mediante colisiones reales con los defectos que han sobrevivido hasta ese momento de la simulación, sin necesidad de artificios como en el modelo de Kinchin-Pease.

#### 2.4.3. Modelo de daño utilizado en el *TRICSI*

Este modelo también se divide en dos fases: la de generación de defectos y la de desacanalamiento debido a la acumulación de daño, es decir, la fase de interacción con el daño.

### Fase de generación de defectos

La fase de generación de defectos [18] de este modelo no es estadística, sino que, al igual que en el modelo KADM, se consideran las vacantes e intersticiales creadas en el transcurso del recorrido simulado del proyectil.

Como no todos los defectos sobreviven, hay una función de probabilidad de recombinación que modela la acumulación de daño no lineal. Se supone que en el crecimiento del daño los defectos puntuales se agrupan y forman agregados en una zona determinada, de modo que la distribución de daño no es uniforme y la probabilidad de recombinación no es directamente proporcional a la generación de defectos. En este modelo también se supone que en las regiones parcialmente dañadas los defectos aislados se recombinan con otros defectos o forman agregados más rápidamente. El modelo tiene en cuenta que en las zonas altamente dañadas o donde hay agregados amorfos la tasa de recombinación es menor que en otras zonas en las que los defectos son puntuales y están uniformemente distribuidos.

Se define una concentración de saturación de defectos  $N_{sat} = N_v + N_i$  para las regiones completamente amorfizadas, donde  $N_v$  es la concentración de vacantes y  $N_i$  es la concentración de intersticiales. En este modelo se fija  $N_{sat}$  como un 20 % de la densidad atómica del silicio. En las regiones amorfizadas la probabilidad de recombinación para cada intersticial y vacante es de 0.5 si la cantidad de ambos es igual, pues en ese caso se debe cumplir que la probabilidad de recombinación de cada una ( $P_{ri}$  ó  $P_{rv}$ ) sea igual a su probabilidad de supervivencia ( $1 - P_{ri}$  ó  $1 - P_{rv}$ ), es decir, la cantidad de defectos que aparece debe ser la misma que la de defectos que desaparecen.

La diferencia entre el número de vacantes y de intersticiales en una zona suele ser pequeña para implantaciones de energías bajas, pues en esos casos las subcascadas son cortas. Sin embargo, en las de alta energía las longitudes de las subcascadas pueden ser elevadas, lo que motivaría que los intersticiales quedaran mucho más profundos que las vacantes. En ese caso, el tratamiento de la recombinación debe ser diferente.

Aunque este modelo no almacena la posición concreta de cada defecto, sí que distingue entre las componentes de daño, y las expresiones de la probabilidad de recombinación de vacantes e intersticiales se definen como

$$\begin{aligned} P_{rv} &= k_{rv} \left( \frac{2N_i}{N_{sat}} \right)^{r_v} \\ P_{ri} &= k_{ri} \left( \frac{2N_v}{N_{sat}} \right)^{r_i} \end{aligned}$$

donde  $r_i$  y  $r_v$  dan cuenta de la no linealidad del proceso de recombinación, y que la recombinación es menor a medida que el daño es mayor. Los factores  $k_{rv}$  y  $k_{ri}$  se fijan en 0.5 para que en las

regiones amorfizadas haya una saturación en la concentración de defectos. Se define el porcentaje de daño  $P_d$  como:

$$P_d = \frac{N_v + N_i}{N_{sat}}$$

Cada vez que se finaliza la simulación de un proyectil se efectúa la fase de recombinación de defectos, para lo que se compara un número aleatorio con las probabilidades  $P_{ri}$  y  $P_{rv}$ . Si el número aleatorio es mayor, la recombinación no se lleva a cabo. En caso contrario, la recombinación tiene lugar.

### Fase de desacanalamiento

Una consecuencia de la acumulación de daño es el desacanalamiento de los iones que se encuentran con la red amorfizada. El daño puede bloquear el recorrido de los proyectiles a través de los canales y cambiar sus trayectorias. Los tres posibles motivos que este modelo considera para ello son un intersticial simple, un agregado de intersticiales y un agregado amorfo. Se define una probabilidad de desacanalamiento  $f_d$  cuya expresión es:

$$f_d = k_d(1 - e^{-P_d}) = P_a + P_i = k_a f_d + (1 - k_a) f_d$$

en las que  $k_d$  y  $k_a$  son parámetros ajustables para diferentes proyectiles.

En regiones parcialmente dañadas, la formación de agregados es más probable que la recombinación, por lo que allí los agregados permanecen y no se recombinan fácilmente. La probabilidad de que un proyectil se encuentre con un agregado amorfo se representa por  $P_a$ . Análogamente, la probabilidad de que un proyectil se encuentre con un intersticial es  $P_i$ . Para simular un agregado amorfo se coloca un intersticial a una distancia  $l_c = r_c \cdot R_n$  aleatoria en la dirección del movimiento del proyectil, donde  $r_c$  es el radio de colisión del agregado amorfo, y  $R_n$  el número aleatorio.

Si se encuentra una región totalmente amorfizada, la simulación se lleva a cabo como en el simulador de implantación sobre blancos amorfos *TRIM*.

Si no se encuentran intersticiales, ni agregados amorfos ni regiones totalmente amorfizadas, se comprueba si en la posición de red más cercana hay una vacante o no. Las vacantes tienden a recombinarse rápidamente con los intersticiales, aunque también pueden formarse agregados de vacantes, como los había de intersticiales. A pesar de ello, los agregados de vacantes no mejoran el acanalamiento. Esto se debe a que suelen encontrarse en zonas bastante desordenadas (con gran cantidad de intersticiales o agregados amorfos) que son quienes impiden a las vacantes mejorar el acanalamiento. La probabilidad de que en una posición de red haya una vacante se define como:

$$P_v = k_v \cdot \left( \frac{2N_v}{N_{sat}} \right)^{f_v}$$

donde  $k_v$  y  $f_v$  dan cuenta del comportamiento del agrupamiento de vacantes durante la acumulación de defectos.

## Capítulo 3

# Implementación del modelo de dañado

### 3.1. Elección del modelo de Kinchin-Pease para la implementación del módulo de simulación de acumulación de dañado

Tras efectuar un análisis de los distintos modelos existentes en la bibliografía para simular el proceso de amorfización de un cristal en el transcurso de una implantación iónica, las ventajas e inconvenientes que a priori presenta cada modelo se resumen en:

1. Respecto a la física subyacente, el modelo KADM presenta las mejores prestaciones, puesto que después de simular la trayectoria de cada proyectil, la fase de recombinación de defectos se simula de un modo más realista que en los otros. En el resto de modelos la simulación de la recombinación e interacción de defectos es más estadística, sin centrarse en un análisis tan profundo de la situación.
2. Respecto a la eficiencia computacional, el modelo que parece más apropiado es el de Kinchin-Pease. Debido a la sencillez de este modelo, la simulación del proceso de amorfización del cristal no penaliza excesivamente la duración de las simulaciones. Por otra parte, el hecho de ser un modelo en que la información del dañado es estadística evita usar muchos recursos de memoria, como ocurriría en modelos más deterministas, del tipo del KADM, en que se debe almacenar la posición de cada uno de los defectos.
3. El modelo de Kinchin-Pease se puede incorporar mucho más fácilmente al programa IIS como una subrutina, sin necesidad de efectuar cambios profundos en el código ni en su mecanismo de simulación. En el caso del modelo KADM, al ser un modelo más complicado y requerir más datos, la integración en el programa IIS parece mucho más dificultosa.
4. El modelo de Kinchin-Pease requiere un escaso número de parámetros para su correcto

funcionamiento con distintas especies y condiciones experimentales, lo que resulta una ventaja frente a otros modelos, como el usado en el TRICSI, que tiene un gran número de parámetros.

Teniendo en cuenta todos estos factores, se decidió que el módulo de acumulación de dañado a incorporar en el programa IIS se basaría en un modelo de Kinchin-Pease modificado.

## 3.2. Modelo de Kinchin-Pease modificado

### 3.2.1. Fórmula original de Kinchin-Pease

Esta fórmula fue presentada en el año 1955 por G. H. Kinchin y R. S. Pease [17]. En uno de los apartados de su trabajo se analizan las colisiones entre un átomo en movimiento y otro parado, suponiendo las interacciones entre sus núcleos como si ocurrieran entre esferas macizas con sus electrones apantallando parcialmente su repulsión culombiana. En estas colisiones, la probabilidad de transferir una energía dada  $\Delta E$  es independiente de  $\Delta E$  para  $0 \leq \Delta E \leq 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E$ , y es cero fuera de ese intervalo ( $M_1$  y  $M_2$  son las masas de los átomos que colisionan, y  $E$  la energía del átomo en movimiento). Para simplificar el razonamiento se consideraba un sólido monoatómico, en el que un proyectil colisiona contra otro átomo y pone en juego una energía  $\bar{E}$ . Como consecuencia de esa primera colisión, la energía  $\bar{E}$  se reparte entre los dos átomos. En el siguiente grupo de colisiones, se reparte entre 4 átomos, y posteriormente, entre 8, 16, etc. átomos. En el grupo de colisiones número  $p$ , la energía estará repartida entre  $2^p$  átomos, y el número de átomos con un rango de energía  $dE$  viene dado por:

$$N_p(E)dE = 2^p \left[ \ln \left( \frac{\bar{E}}{E} \right) \right]^{p-1} \frac{dE}{\bar{E} (p-1)!} \quad (3.1)$$

Este resultado es sólo válido para átomos libres y estacionarios. En el resto de casos, sólo aquellos átomos que reciban una energía por encima de su energía de desplazamiento ( $E_d$ ) serán arrancados de su posición. Así, sólo un átomo con una energía mayor que  $2E_d$  podrá colisionar contra un átomo estacionario quedando ambos con una energía mayor que  $E_d$ . Átomos con energías entre  $E_d$  y  $2E_d$  pueden haber abandonado su posición, pero no podrán aumentar el número de átomos desplazados.

Se puede demostrar que el número total de átomos desplazados producidos únicamente por el grupo de colisiones número  $p$  es  $E_d N_p(2E_d)$ , por lo que el número total de átomos desplazados  $N_d$  es

$$N_d = \sum_{p=1}^{p \rightarrow \infty} E_d N_p(2E_d) = \frac{\bar{E}}{2E_d} \quad (3.2)$$

Esta ecuación sólo resulta válida si  $\bar{E} > 2E_d$ , pues si  $0 \leq \bar{E} \leq 2E_d$ , se tiene  $N_d = 1$ .



Puesto que 3.2 es lineal en  $\bar{E}$ , es también válida cuando  $\bar{E}$  representa la energía media de un grupo de proyectiles con energía mayor que  $2E_d$ . También se puede demostrar que esta ecuación es también válida aunque la masa del proyectil sea diferente de la del átomo estacionario contra el que choca siempre que se verifique:  $\frac{2E_d}{E} \ll 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}$ .

Los modelos de dañado basados en la ecuación de Kinchin-Pease consideran tres fases esenciales: una de generación de dañado, otra de recombinación, y por último, la interacción de los iones implantados con el dañado ya existente. El dañado existente puede provenir de la implantación que está siendo efectuada o de implantaciones previas (siempre que no se haya sometido a la red a un proceso de recocido).

### 3.2.2. Fase de generación de defectos

Como ya se ha comentado, a medida que el proyectil avanza por el cristal pierde su energía por frenado nuclear, debido a las colisiones, y por frenado electrónico, cómo si fuera moviéndose en un medio viscoso. Sólo la energía transferida mediante frenado nuclear es capaz de generar dañado, y es, por tanto, la única que se debe tener en cuenta en el módulo de acumulación de dañado.

Si la energía transferida en una colisión por el proyectil a un átomo de la red es lo suficientemente elevada, este átomo abandonará su posición en el cristal generando una vacante en la ubicación de la red en que se encontraba y ha quedado desocupada. También genera un intersticial en el lugar en el que se detenga. Por otra parte, en el transcurso de su recorrido, el átomo puesto en movimiento irá cediendo parte de su energía a otros átomos colocados en sus respectivas posiciones de red. Se puede originar un efecto en cascada que duraría hasta que las energías transferidas desde los átomos en movimiento a los átomos en sus posiciones de red fueran inferiores a la energía de desplazamiento  $E_d$ . De este modo, un solo ion puede ser capaz de generar una gran cantidad de defectos a lo largo de su trayectoria.

Dado que la cantidad de iones simulados es muy elevada, resulta muy costoso computacionalmente almacenar las posiciones de cada una de las vacantes y de los intersticiales generados. Para evitar almacenar tanta información, y a pesar de ello tener una estimación del número de defectos, sin distinguir entre sus variedades (vacantes, intersticiales, agregados, etc.) se usa un modelo estadístico basado en la fórmula de Kinchin-Pease modificada (ecuación 3.3). El modelo parte de la ecuación 3.2, pero ya en su artículo Kinchin y Pease [17] indicaban que dicha ecuación podía originar una sobreestimación del número de átomos desplazados. La modificación fue introducida por Sigmund [19], que basándose en un estudio más detallado incorporó el factor  $k$ , cuyo valor es 0.8. La fórmula proporciona el número de defectos  $n$  producidos en una colisión:

$$n = \frac{kE}{2E_d} \quad (3.3)$$

en que  $E$  corresponde a la energía perdida en forma nuclear en una colisión, y  $E_d$  es la energía de desplazamiento.

### 3.2.3. Fase de acumulación de daño

Tras la fase de generación de defectos hay una fase de acumulación de daño, pues no todos los defectos generados por las colisiones entre átomos proyectiles y átomos blanco sobreviven. Parte de los defectos creados en la fase de generación se recombinan, bien con otros defectos aparecidos en la misma cascada (*recombinación intracascada*), o bien con defectos generados por cascadas anteriores (*recombinación intercascada*).

El modelo de Kinchin-Pease considera este efecto de recombinación mediante la fórmula

$$\Delta n = n \cdot f_{surv} \left( 1 - \frac{N}{N_\alpha} \right) \quad (3.4)$$

en la que  $\Delta n$  representa el incremento en el número total de defectos puntuales tras la fase de acumulación de daño, y  $f_{surv}$  un parámetro que representa la fracción de defectos que sobreviven a la recombinación (ya sea intracascada o intercascada).  $N$  representa la densidad de defectos previa en una zona dada del cristal y  $N_\alpha$  la densidad de defectos a partir de la cual se puede considerar que una zona del cristal está completamente amorfizada.  $N_\alpha$  viene del producto  $N_\alpha = \alpha N_l$ , donde  $N_l$  es la densidad atómica del cristal blanco, y  $\alpha$  un factor que indica la fracción de la densidad de defectos respecto a la densidad atómica a partir de la cual se puede considerar el cristal totalmente amorfizado.

Al final de la fase de acumulación de daño, la densidad de defectos en esa zona del cristal se incrementa según la fórmula:

$$N = N_{previa} + \frac{\Delta n}{V} \quad (3.5)$$

con  $V$  el volumen de la zona.

### 3.2.4. Interacción con el daño previo

El daño existente en la red cristalina del material sobre el que se efectúa la implantación provoca que los siguientes iones en penetrar en el cristal no se acanalen del modo que lo harían en una red perfectamente cristalina. Si el cristal sólo está parcialmente amorfizado, el comportamiento de los iones debido a la presencia de estos defectos será intermedio entre el que tendrían ante una red perfectamente cristalina y una red totalmente amorfa. El modelo de Kinchin-Pease usa este razonamiento para simular la interacción de los iones con un blanco parcialmente amorfizado. Se define una probabilidad de encuentro con un defecto ( $P$ ) que viene dada por la ecuación 3.6

$$P = \frac{N}{N_\alpha} \quad (3.6)$$

con  $N$  y  $N_\alpha$  los ya indicados anteriormente<sup>1</sup>.

El modo de simular la interacción entre el proyectil y el material blanco parcialmente amorfizado es variado. Cuando se trata de implantaciones sobre blancos de silicio, algunos de los autores utilizan intersticiales en configuración *dumbbell*. Esta configuración es la menos energética en que se puede disponer un intersticial, y por lo tanto la más probable. En ella, dos átomos de silicio se alinean en la dirección  $\langle 110 \rangle$  separados entre sí aproximadamente la distancia de un enlace (en concreto, según Chen [15], 2.76 Å) y centrados en torno a una posición de red. Por simplicidad se asume que el resto de los átomos permanecen en su ubicación habitual y no se ven afectados por la presencia de este intersticial.

Hobler [16] usa otra variante para los intersticiales. El intersticial se coloca en una posición aleatoria dentro de una esfera de un radio predeterminado centrada en una posición de la red. Esta variante presenta la desventaja de que se introduce un nuevo parámetro: el radio de la esfera de distribución de intersticiales. En la práctica no se obtienen diferencias significativas entre las dos configuraciones indicadas.

En el modelo de dañado implementado en el IIS se usa otro método que se explica en el apartado 3.3.

### Amorfización del cristal

Cuando la densidad de defectos alcanza un valor  $N = N_\alpha = \alpha N_l$ , se considera esa zona del cristal totalmente amorfizada, y allí no se generará ningún nuevo defecto. A partir de ese momento, en esa zona del cristal se simula la implantación con los algoritmos usados en la simulación sobre blancos amorfos.

### Aproximación de energía de corte $E_{cut-off}$

Algunos de los programas usados para la simulación de la implantación iónica, como el IIS, son capaces de seguir las trayectorias del proyectil implantado y además las de los átomos de red que se han puesto en movimiento tras ser golpeados por el proyectil. Para aplicar el modelo de Kinchin-Pease cuando sólo se sigue la trayectoria del proyectil implantado (bien porque no tienen la capacidad de seguir las subcascadas o porque esa capacidad se ha desactivado para que la simulación sea más rápida), se debe usar la aproximación de la energía de corte  $E_{cut-off}$ .

Como ya se ha indicado, para cuantificar el dañado se considera la energía cedida en forma nuclear en cada colisión. Si el átomo del cristal al que se ha transferido la energía en la colisión se pone en movimiento, cederá la energía que acaba de recibir mediante nuevas colisiones contra

---

<sup>1</sup>En parte de la bibliografía [3, 15] se usa la ecuación  $P = \gamma \frac{N}{N_\alpha}$  en lugar de la 3.6, donde  $\gamma$  es una nueva constante.

otros átomos de la red cristalina. Así, esa energía queda redistribuida a lo largo de la red. Si el recorrido de los átomos de la red que han sido puestos en movimiento no se simula, podría darse el caso de una colisión en la que el proyectil cediera una gran cantidad de energía a un átomo blanco. La energía que recibiría el átomo blanco no sería redistribuida a lo largo de una subcascada, sino que contribuiría en su totalidad a la amorfización de la zona del cristal donde está ubicado ese átomo blanco. Como consecuencia de ese aporte de energía, esa zona del cristal podría quedar totalmente amorfizada en una sola colisión. Esto no es físicamente razonable, provocaría que el daño estuviera sobreestimado en esa zona y su principal efecto sería el desacanalamiento de los iones implantados posteriormente. Para evitar este problema se define una energía de corte  $E_{cut-off}$ , que será la energía máxima que se puede depositar como resultado de una sola colisión. Esta energía de corte se fija como la necesaria para amorfizar una zona del cristal como resultado de una sola colisión. Debido al efecto de la recombinación, el número de defectos será tal que la zona del cristal no quedará amorfizada como consecuencia de esa única colisión (se tendrá  $\Delta n/V \leq n f_{surv}/V \leq N_\alpha$ ), donde  $V$  es el volumen de la zona.

En el caso de utilizar esta aproximación, el valor de la energía de corte es un nuevo parámetro ajustable que debe ser elegido para cada tipo de proyectil implantado. Con esta aproximación no se obtiene una caracterización de la amorfización tan exacta como si se desarrollan las subcascadas. Sí resulta útil si se desea una mayor velocidad en la simulación, pues se evita emplear tiempo en la simulación de las subcascadas a costa de tener una descripción menos exacta del daño del cristal.

La aproximación de  $E_{cut-off}$  no es válida cuando la energía de las implantaciones es muy elevada, pues en las colisiones se puede llegar a transferir una gran cantidad de energía, y considerar que en una colisión sólo se deposita la energía de corte y además en un solo punto (ignorando las subcascadas) es incorrecto. De este modo queda un daño más superficial, mientras que el daño producido a mayores profundidades es subestimado.

Algunos simuladores hacen un uso parcial de la aproximación de la energía de corte. Simulan las subcascadas hasta que las energías de los proyectiles caen por debajo de un valor umbral, y en ese momento se aplica la aproximación de la energía de corte.

Este método está implementado en programas como el UT-MARLOWE [3], y ofrece unos resultados aceptables en un tiempo de computación razonable.

### 3.3. Implementación del modelo

Para utilizar el modelo de Kinchin-Pease modificado, el cristal se divide en cajas de una cierta profundidad [20] en la dirección ortogonal a la superficie a implantar, como se muestra en la figura 3.1. Con el fin de almacenar la densidad de defectos en cada una de las cajas del

IIS sigue utilizándose simultáneamente con el módulo de acumulación de dañado. Así, al simular un ion con peso estadístico distinto de la unidad, la energía que se contabiliza a efectos de dañado es el producto de la energía transferida en la colisión de forma nuclear por el proyectil multiplicada por su peso estadístico.

La idea de simular la implantación iónica mediante la implantación consecutiva de proyectiles, sin considerar que puede haber varios penetrando simultáneamente en el cristal es bastante realista. El tiempo que transcurre desde que un ion penetra en el blanco hasta que se detienen todos los átomos de la cascada que él puede provocar es del orden de unos pocos picosegundos [3, 4]. Al ser tan rápido, es muy poco probable que existan dos cascadas penetrando a la vez. Esto se puede comprobar calculando el tiempo medio entre cascadas  $\Delta t$ , que se puede calcular en iones por segundo a partir de la expresión:

$$\Delta t = \frac{qe}{J\pi\Delta R_{\perp}^2}$$

con  $q$  el estado de carga del ion,  $e$  la carga del electrón,  $J$  la densidad de corriente, y  $\Delta R_{\perp}$  la desviación lateral de la distribución de átomos implantados. Para el caso de una implantación de boro en silicio a 40 keV con una densidad de corriente de  $0.16 \mu\text{A cm}^{-2}$ , se tiene una dispersión lateral de unos 40 nm, con lo que el tiempo medio entre cascadas resulta de 40 ms, muchos órdenes de magnitud mayor que la duración de la subcascada. Por ello, la aproximación de simular los iones consecutivamente, sin que se simulen interacciones entre cascadas simultáneas, es muy válida.

### 3.3.1. Modelo de Kinchin-Pease rápido

Es una prestación opcional [20] que se ha incluido en el IIS. Su principal finalidad es mejorar la velocidad de las simulaciones, y para ello se toma una aproximación consistente en actualizar únicamente las densidades de defectos una vez que se ha finalizado la simulación de un ion.

Para ello, se va acumulando toda la energía transferida en las colisiones del proyectil en forma nuclear en cada una de las cajas por las que va pasando. Una vez que el proyectil se detiene, se calcula el número  $n$  de defectos con la fórmula habitual (3.3), donde  $E$ , en este caso, no es sólo la energía correspondiente a una colisión, sino la acumulación de todas las energías transferidas en todas las colisiones de ese proyectil en esa caja.

Tras la detención del proyectil se efectúa la recombinación de los defectos mediante la fórmula habitual 3.4. Finalmente, se inicializan todas las energías depositadas en cada una de las cajas a cero, y se procede a simular la trayectoria del siguiente ion.

La utilización de este modelo supone dos aproximaciones respecto al mecanismo habitual de la acumulación de dañado:

1. Una aproximación es que el ion considera la red con el dañado que había cuando se le empezó a simular, pues el estado de amorfización no es actualizado tras cada colisión, como ocurre con el modelo básico.
2. La otra aproximación es que se supone que el incremento del dañado calculado en cada colisión es aproximadamente el mismo que el calculado a partir de la suma de toda la energía depositada por un ion en esa zona. Esto será más cierto cuanto mayor sea el número de iones simulados. Puesto que la densidad de defectos acumulada tras la recombinación no es lineal respecto a la energía, se pierde precisión por el hecho de sumar toda la energía y finalmente obtener el número de defectos puntuales a partir de esa energía acumulada.

A continuación se muestra cómo a medida que el número de colisiones va siendo mayor la aproximación se va apartando del valor original, a partir de las ecuaciones originales 3.3 y 3.4. En ambos casos, se parte de una densidad de defectos inicial  $N_0$ . Tras dos colisiones consecutivas queda una densidad de defectos  $N_2$  que viene dada según el modelo básico por:

$$\begin{aligned}
\Delta n_1 &= f_{surv} \frac{kE_1}{2E_d} \left(1 - \frac{N_0}{N_\alpha}\right) \\
N_1 &= N_0 + f_{surv} \frac{kE_1}{2VE_d} \left(1 - \frac{N_0}{N_\alpha}\right) \\
\Delta n_2 &= f_{surv} \frac{kE_2}{2E_d} \left(1 - \frac{N_1}{N_\alpha}\right) \\
N_2 &= N_1 + f_{surv} \frac{kE_2}{2VE_d} \left(1 - \frac{N_1}{N_\alpha}\right) = N_0 + f_{surv} \frac{k}{2VE_d} \left(E_1 + E_2 - \frac{N_0E_1 + N_1E_2}{N_\alpha}\right)
\end{aligned}$$

Si se acumula la energía de las dos colisiones  $E = E_1 + E_2$  y posteriormente se calcula la densidad de defectos tras los dos choques  $N'_2$ :

$$\begin{aligned}
\Delta n'_2 &= f_{surv} \frac{kE}{2E_d} \left(1 - \frac{N_0}{N_\alpha}\right) \\
N'_2 &= N_0 + f_{surv} \frac{kE}{2VE_d} \left(1 - \frac{N_0}{N_\alpha}\right) = N_0 + f_{surv} \frac{k}{2VE_d} \left(E_1 + E_2 - \frac{N_0(E_1 + E_2)}{N_\alpha}\right)
\end{aligned}$$

Se comprueba que para el caso de dos colisiones, con la aproximación de Kinchin-Pease rápida se sobreestima el número de defectos  $N'_2 > N_2$ , pues siempre se verifica que  $N_1 \geq N_0$ . Ocurre algo análogo para un mayor número de colisiones.

En la aproximación del modelo Kinchin-Pease rápido se utiliza también la energía de corte ( $E_{cut-off}$ ), pues no se está considerando la recombinación de defectos que tiene lugar tras cada colisión, sino únicamente la recombinación de defectos en cada caja al final de la simulación de cada trayectoria de un proyectil. Usando la aproximación de la energía de corte se evita la acumulación de un valor de energía tal que con la aplicación directa de las fórmulas habituales se obtengan valores de densidades de defectos mayores que las necesarias para la amorfización, lo

que provocaría un mal funcionamiento del programa. Aun en el caso de que la energía acumulada no llegara a tales extremos, si no se usara  $E_{cut-off}$  sí se podría llegar a sobreestimar el número de defectos.

A pesar de todo los resultados obtenidos con esta aproximación son bastante válidos y consiguen acercarse bastante a los del modelo básico.

### 3.3.2. Implantación múltiple

Una de las ventajas de que el modelo de acumulación de dañado sea tan simple es que se puede simular fácilmente una serie de implantaciones sobre un mismo blanco [20], siempre que entre estas implantaciones no se someta al cristal a tratamientos para recuperar grado de cristalinidad, como podría serlo un recocido.

Al ser un modelo estadístico no es necesario utilizar un archivo de grandes dimensiones en que se almacenen las posiciones de cada defecto, sino que con un archivo de poco tamaño (del orden de 30 kilobytes) queda caracterizado todo el dañado del cristal en términos de la densidad de defectos en cada una de las cajas en que se ha dividido el cristal.

Las implantaciones sucesivas se pueden simular en un bloque, de modo que se ejecute el programa IIS una sola vez, o en varios bloques, con lo que se ejecutaría el programa un cierto número de veces.

En caso de ejecutar el programa una sola vez, una vez lanzada la ejecución el proceso es transparente al usuario y al finalizar la simulación el usuario dispone del estado de amorfización final del cristal, tal y como quedaría tras todas las simulaciones.

En caso de que se simulen las implantaciones en varias etapas, al acabar cada una de ellas el programa ofrece al usuario el estado de amorfización en ese momento. Para simular una nueva etapa el programa debe recoger los datos de dañado hasta esa etapa para inicializar toda la estructura cristalina con el dañado acumulado hasta ese momento.

Se incluye en este apartado la capacidad que tiene el IIS de efectuar implantaciones de compuestos formados por varios átomos, como puede ser el caso del  $\text{BF}_2$ , utilizado en ocasiones para impurificar los semiconductores con boro. Estos compuestos se disocian en cada uno de sus componentes instantáneamente al penetrar en el cristal, por lo que, en el caso de implantar una molécula de  $\text{BF}_2$ , sería análogo a la implantación de un átomo de boro y dos de flúor.

La manera de simular la implantación de compuestos con el IIS es fiel a lo que ocurre realmente: en cada una de las cascadas se simulan todos y cada uno de los átomos que constituyen el compuesto por separado y secuencialmente. Siguiendo con el ejemplo anterior, si se desearan simular 10000 proyectiles de  $\text{BF}_2$ , en la primera cascada se simularía la implantación de un proyectil de boro y a continuación otros dos proyectiles de flúor. Tras esta primera cascada, se

simularían otras 9999 cascadas análogas a la primera, de modo que el número total de iones de boro y flúor (considerándolos por separado) implantados sería de 30000.

Al final de la simulación se obtiene el perfil de impurezas de cada uno de los constituyentes, así como el dañado total producido por la implantación de todos los constituyentes. En el ejemplo presentado, las concentraciones de flúor podrían no resultar útiles, pero durante su implantación, los iones de flúor producen un dañado en la red cristalina que sí es apreciable.

### 3.3.3. Algoritmo de división de dosis

En las implantaciones de alta dosis se forma rápidamente una capa amorfa. Esta capa amorfa no permite que los proyectiles se acanalen tan fácilmente como podría ocurrir con un cristal con su estructura intacta, por lo que las zonas en que las concentraciones de impurezas son mucho más bajas que en el pico de amorfo (tres o cuatro órdenes de magnitud menores) el ruido estadístico no permite una descripción precisa de la concentración de impurezas.

Tras observar que las concentraciones de impurezas en las colas de acanalamiento son prácticamente independientes de las dosis de implantación (como se comprobó en la figura 1.5), se diseñó un algoritmo de división de dosis [21] capaz de dar una correcta descripción de la concentración de impurezas en todo el rango de la implantación tras acumular los resultados de sucesivas simulaciones de distintas dosis.

### Funcionamiento del algoritmo

El algoritmo efectúa una sucesión de  $m$  implantaciones, cada una con el mismo número de proyectiles ( $N_{sim}$ , los introducidos en el archivo de entrada), en las que cada una de las implantaciones representa una dosis distinta. De este modo, el número total de iones simulados es  $N_t = mN_{sim}$ .

El orden en que se efectúan las simulaciones es de menor a mayor dosis. Inicialmente se simula una implantación de una dosis baja (por ejemplo,  $10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>). Al ser una dosis tan pequeña, apenas daña la red cristalina, con lo que no se genera capa amorfa y los iones se pueden acanalar sin ningún impedimento, con lo que la cola va quedando estadísticamente bien descrita.

A continuación se simula una implantación de una dosis mayor (por ejemplo, 10 veces más grande). Esta implantación se simula con la red ya dañada (aunque muy ligeramente) por la implantación anterior. Por ello, el fenómeno de acanalamiento será algo menos frecuente y los proyectiles tenderán a reducir su alcance, dando una mayor descripción estadística al espacio entre el pico de amorfo y la cola de acanalamiento. Una vez finalizada esta implantación, se repite el mecanismo incrementando las dosis gradualmente, por lo que la estructura cristalina



se va deteriorando y se va reforzando la capa amorfa que impide el acanalamiento. Tras haber efectuado  $m - 1$  etapas, se simula una última etapa con una dosis correspondiente a la restante que queda por implantar.

Con este mecanismo, la cola de acanalamiento ha quedado adecuadamente descrita en las etapas en que se simulaban implantaciones de muy baja dosis, y el pico de amorfo queda descrito en la última simulación, correspondiente a la mayor dosis de implantación. Las implantaciones de dosis intermedias proporcionan el perfil de las zonas entre el pico de amorfo y la cola de acanalamiento.

El mecanismo de división de dosis es automático (aunque se puede disponer en modo manual y que sea el usuario el que fije las dosis intermedias) y necesita simular un mayor número de iones, con lo que a costa de incrementar el tiempo de computación se consigue una mayor precisión estadística.

En la figura 3.5 se muestran los resultados de tres simulaciones en las que se ven las ventajas del uso del algoritmo de división de dosis. Las condiciones experimentales de cada simulación son las mismas: implantación de boro en silicio  $\langle 100 \rangle$ , con ángulos  $(0^\circ, 0^\circ)$ , energía 2 keV y dosis  $10^{16}$  at/cm<sup>2</sup>). En uno de los casos se ha utilizado el algoritmo de división de dosis utilizando cuatro etapas intermedias (simulando en total 8000 iones, por tanto), mientras que en los otros se han simulado 2000 iones y 20000 iones sin usar dicho algoritmo. Se ve claramente que la mejor resolución a lo largo de todo el perfil es conseguida al usar el algoritmo de división de dosis, pues si no se usa y se simulan 2000 iones la cola de acanalamiento no queda definida. Si tampoco se usa pero se simulan 20000 iones, la cola sigue quedando peor definida que al usarlo, incluso habiendo simulado más del doble de iones.

En la referencia [22] publicamos una comparativa de los tiempos de cálculo de las simulaciones que se reproduce en el cuadro 3.1. Se comprueba que la división de dosis es un muy buen mecanismo para mejorar la estadística sin incrementar los tiempos de cálculo excesivamente y sin necesidad de usar el cálculo paralelo.

Energía (keV)	Tiempo (s) 2000 iones	Tiempo (s) 20000 iones	Tiempo (s) 2000 iones con división de dosis
2	46.5 (x1)	631 (x13.4)	205 (x4.3)
20	265 (x1)	3163 (x11.9)	1116 (x4.2)
200	1424 (x1)	14253 (x10.0)	4648 (x3.2)

Cuadro 3.1: Comparativa de tiempos de cálculo con la utilización del algoritmo de división de dosis.

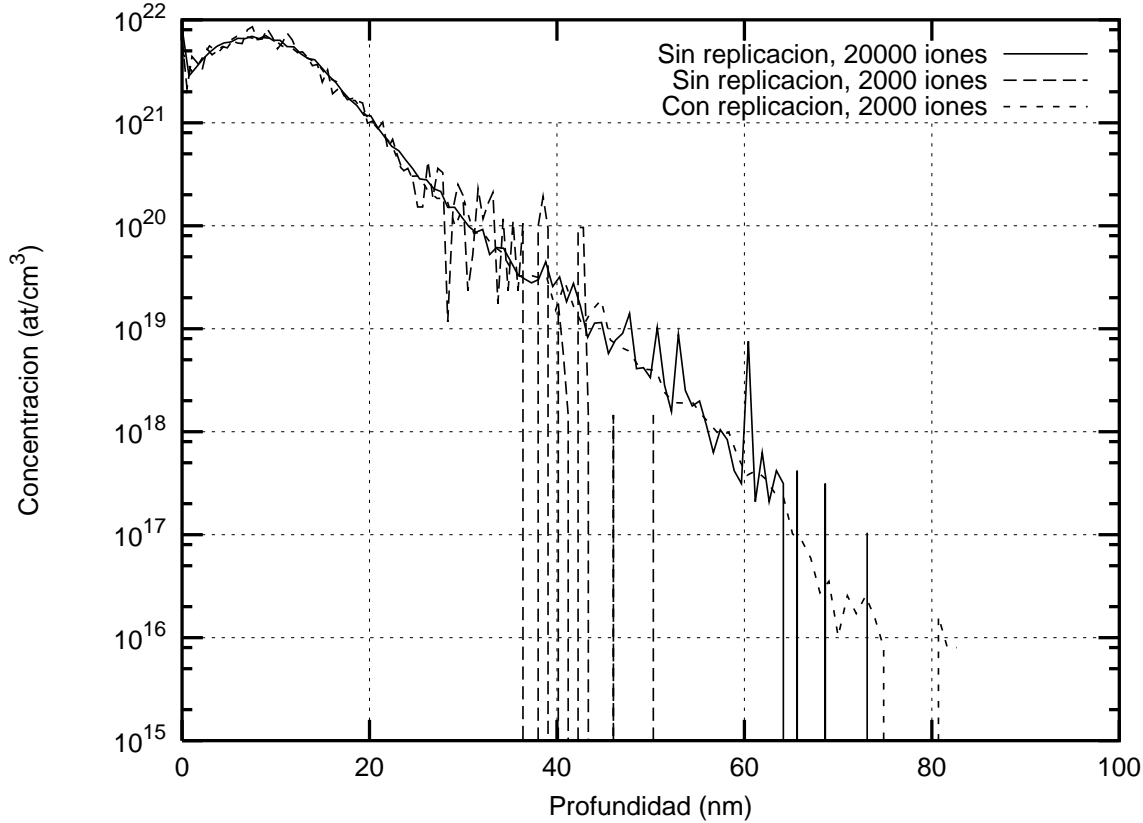


Figura 3.5: Mejora de la resolución en las colas de acanalamiento con el algoritmo de división de dosis.

### 3.3.4. Paralelización del modelo 1D

El modelo de acumulación de daño admite el cálculo en paralelo [5, 20] con el fin de mejorar la velocidad de las simulaciones. De este modo se pueden realizar las simulaciones en estaciones de trabajo con múltiples procesadores, o bien en grupos de ordenadores conectados entre sí en red.

Para la ejecución paralela del módulo de daño se utiliza la librería PVM [23, 24] que era la utilizada previamente por el programa IIS para su computación paralela. Se configura una disposición maestro-esclavo en la que cada proceso esclavo se encarga de simular la trayectoria de un ion cada vez que el proceso maestro así se lo ordena, según se ve en el diagrama de flujo mostrado en la figura 3.6 (página 61). El maestro se encarga de coordinar y enviar la información necesaria a cada esclavo para que pueda efectuar la simulación de la trayectoria de un ion, recopilando toda la información que los esclavos le envían. Además debe ocuparse de actualizar los datos acerca del daño a partir de la información que recibe de los esclavos.

Debido a las limitaciones en los recursos de computación y de comunicación, no es viable que

$$\begin{aligned}
&= N_1 \left( 1 - f_{surv} \frac{n_2}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_2}{V} \\
&= (N_0 A_1 + B_1) \left( 1 - f_{surv} \frac{n_2}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_2}{V} \\
&= N_0 A_1 \left( 1 - f_{surv} \frac{n_2}{VN_\alpha} \right) + B_2 \left( 1 - f_{surv} \frac{n_2}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_2}{V}
\end{aligned}$$

Si, análogamente al caso anterior, se renombra

$$\begin{aligned}
A_2 &= A_1 \left( 1 - f_{surv} \frac{n_2}{VN_\alpha} \right) \\
B_2 &= B_1 \left( 1 - f_{surv} \frac{n_2}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_2}{V}
\end{aligned}$$

el número de defectos quedará:  $N_2 = N_0 A_2 + B_2$

Siguiendo el razonamiento iterativo, se supone que el resultado es válido para el caso  $i$ :

$$N_i = N_0 A_{i-1} \left( 1 - f_{surv} \frac{n_i}{VN_\alpha} \right) + B_{i-1} \left( 1 - f_{surv} \frac{n_i}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_i}{V}$$

La ecuación anterior se presentará en términos de  $A_i$  y  $B_i$ , cuyas expresiones son:

$$\begin{aligned}
A_i &= A_{i-1} \left( 1 - f_{surv} \frac{n_i}{VN_\alpha} \right) \\
B_i &= B_{i-1} \left( 1 - f_{surv} \frac{n_i}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_i}{V}
\end{aligned}$$

de modo que el número de defectos actualizado queda:  $N_i = N_0 A_i + B_i$ .

Supuesto que el razonamiento funciona para el caso  $i$ , si en el caso  $i + 1$  también funciona, (como se muestra a continuación), la expresión es válida:

$$\begin{aligned}
N_{i+1} &= N_i + \frac{\Delta n_{i+1}}{V} \\
&= N_i \left( 1 - f_{surv} \frac{n_{i+1}}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_{i+1}}{V} \\
&= \left[ N_0 A_{i-1} \left( 1 - f_{surv} \frac{n_i}{VN_\alpha} \right) + B_{i-1} \left( 1 - f_{surv} \frac{n_i}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_i}{V} \right] \left( 1 - f_{surv} \frac{n_{i+1}}{VN_\alpha} \right) \\
&\quad + f_{surv} \frac{n_{i+1}}{V} \\
&= N_0 A_i \left( 1 - f_{surv} \frac{n_{i+1}}{VN_\alpha} \right) + B_i \left( 1 - f_{surv} \frac{n_{i+1}}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_{i+1}}{V}
\end{aligned}$$

De este modo queda demostrada la relación iterativa y se obtiene una relación de recurrencia que viene dada por:

$$N_{i+1} = N_i A_{i+1} + B_{i+1} \tag{3.7}$$

donde, como ya se ha indicado antes,  $A$  y  $B$  representan el dañado incremental, y sus relaciones de actualización tras cada colisión son las siguientes:

$$A_{i+1} = A_i \left( 1 - f_{surv} \frac{n_{i+1}}{VN_\alpha} \right) \quad (3.8)$$

$$B_{i+1} = B_i \left( 1 - f_{surv} \frac{n_{i+1}}{VN_\alpha} \right) + f_{surv} \frac{n_{i+1}}{V} \quad (3.9)$$

Se han conseguido dos matrices  $A[]$  y  $B[]$  que contienen información acerca del dañado incremental. Al emplearlas no se pierde precisión respecto a la caracterización del dañado, por lo que, con el objetivo de unificar código, también el modelo no paralelizado hace uso de estas expresiones para calcular el dañado, obteniendo iguales resultados que con las expresiones iniciales.

En el caso del código paralelizado sí hay pérdida de precisión, pero se enfatiza el hecho de que no como consecuencia del uso de las expresiones 3.8 y 3.9. La pérdida de precisión proviene de que no se actualiza la densidad de defectos tras cada una de las colisiones de los proyectiles que están siendo simulados por los esclavos, sino cuando se acaba la simulación de un proyectil.

La mejora en velocidad que se obtiene al utilizar el código paralelizado es muy notable, como se puede ver en la gráfica 3.7. A pesar de todo, aumentar el número de procesadores indefinidamente no ofrecería los resultados deseados, pues debido a las limitaciones en las comunicaciones, la linealidad tiende a saturar si el número de procesadores supera un umbral. Por otra parte, aparecería el problema ya indicado anteriormente de que si el número de procesos esclavos es muy elevado, los proyectiles no ven el blanco con el dañado actualizado, sino que verían el blanco con el dañado existente antes de que se implantara un número de iones igual al número de procesos esclavos menos uno.

La figura 3.7 (página 65) muestra la variación de la velocidad en el número de iones simulados por unidad de tiempo para una determinada implantación al efectuar la simulación en la estación de trabajo Digital AlphaServer 4100. En la gráfica se comprueba cómo a medida que el número de procesadores utilizados (número de procesos) va siendo mayor, la velocidad crece de un modo prácticamente lineal.

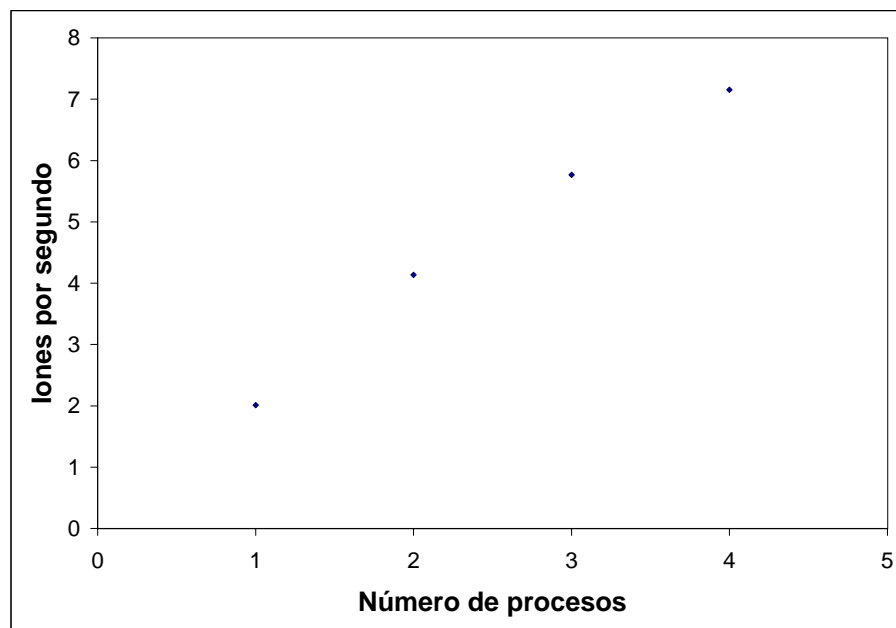


Figura 3.7: Variación de la velocidad de cálculo según el número de procesos para una implantación de boro en silicio  $\langle 100 \rangle$ . La energía es 2 keV, la orientación  $(0^\circ, 0^\circ)$  y la dosis  $10^{16}$  at/cm<sup>2</sup>.



del porcentaje de amorfización. Las líneas discontinuas reflejan los resultados obtenidos si no se usa la réplica de trayectorias, lo que conlleva la simulación de una gran cantidad de iones para tener suficiente resolución. Esta cantidad de proyectiles a simular depende del área de implantación, y según ello tardará más o menos tiempo en efectuarse, aunque generalmente los tiempos son bastante mayores que en el caso de la réplica incondicional. Al efectuar la réplica incondicional (líneas gruesas continuas) no se consigue la misma calidad en los resultados, por no considerar el estado de amorfización de cada zona. Esto se comprueba en la figura bajo los bordes de la ventana de implantación, pues ahí la réplica incondicional ofrece unos resultados que no se adaptan a los que serían de esperar si el mecanismo de réplica tuviera más factores en cuenta, pues deberían coincidir con las líneas discontinuas.

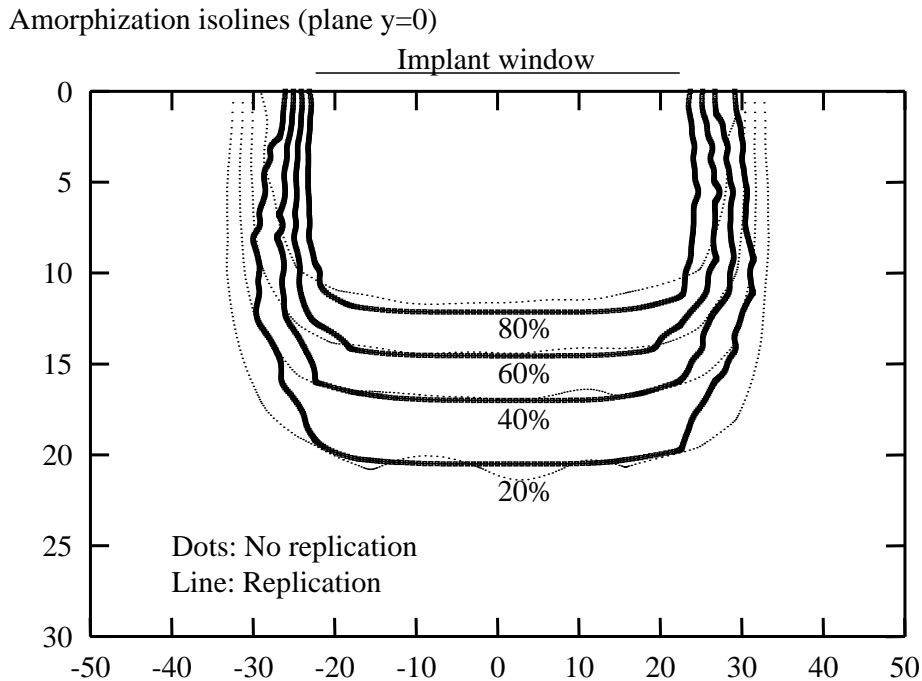


Figura 4.4: Comparativa de resultados entre modelo 3D sin réplica incondicional y con ella.

Un efecto de utilizar la réplica incondicional, que se observa en la figura 4.4, es que casi toda la zona bajo la ventana de implantación queda casi uniformemente dañada

#### 4.1.3. Otras prestaciones de la versión tridimensional

Muchas de las prestaciones comentadas en el capítulo 3.3 correspondientes a la versión unidimensional también están implementadas en la versión tridimensional.

El modelo de Kinchin-Pease rápido está implementado en la versión tridimensional y su

funcionamiento es exactamente el mismo que en la versión unidimensional.

Respecto a la capacidad de simular implantaciones múltiples, la cantidad de datos a almacenar entre las simulaciones sucesivas es mucho mayor, pues se debe guardar la densidad de defectos en cada una de las cajas del cristal. Respecto al mecanismo, es el mismo que en la versión unidimensional.

En cuanto al algoritmo de división de dosis [21], no hay diferencias entre la versión unidimensional y la tridimensional, como tampoco las hay en el mecanismo para el cálculo paralelo (excepto en el tamaño de las matrices que se intercambian el proceso maestro y los esclavos, que aumenta muy considerablemente).

#### 4.1.4. Réplica condicional de iones

Para mejorar las prestaciones de la réplica incondicional de iones se podría programar una réplica condicional de iones. La réplica condicional no está implementada en el módulo de dañado, y existe algún modelo en la bibliografía [26] que se podría usar para desarrollarla.

Este mecanismo se fundamenta en replicar una trayectoria previamente simulada sólo si las condiciones de dañado de la zona por la que se está replicando el proyectil son similares a las de la trayectoria original. Para ello, al simular el comportamiento de un ion se debería almacenar su trayectoria, en qué puntos y cuánta energía transfiere en forma nuclear y, además, el estado de amorfización de la red en cada punto de su recorrido.

La trayectoria simulada se replicaría bajo cada una de las cajas superficiales hasta el momento en que las condiciones de dañado de la trayectoria original y la replicada difirieran por encima de un determinado umbral. A partir de entonces se simularía la trayectoria con las condiciones de orientación y energía con las que el proyectil replicado hubiera llegado hasta ese lugar. Cuando las condiciones de la red impidieran reiteradamente la réplica (lo que ocurriría al alejarse del lugar donde se simuló el ion original), se simularía un nuevo ion que posteriormente sería replicado.

La manera de elegir el orden de las cajas para efectuar la réplica debe ser de tal modo que se escojan en primer lugar las cajas más cercanas, pues previsiblemente son las que tendrán condiciones de dañado más parecidas. Existen distintos criterios para elegir las, como ir recorriendo de extremo a extremo la ventana de implantación (como propone [26]), o bien se pueden efectuar espirales alejándose de la caja de la trayectoria original.



## Capítulo 5

# Resultados

A continuación se recopilan los resultados de un conjunto de simulaciones en que se muestran las capacidades del programa IIS con su módulo de daño basado en el modelo de Kinchin-Pease modificado a pleno rendimiento.

Las condiciones experimentales de las implantaciones que se han simulado son variadas, principalmente en un rango de energías intermedio. La orientación más frecuente de las obleas es la  $\langle 100 \rangle$  con ángulos de tilt  $0^\circ$  ó  $1^\circ$  y de rotación  $0^\circ$ , aunque también se muestran de la disposición ( $7^\circ$ ,  $30^\circ$ ). Se han simulado implantaciones sobre el canal  $\langle 100 \rangle$  porque en él el acanalamiento es bastante relevante y se pueden ver los efectos que el daño tiene sobre él. Además es la orientación de las que más datos experimentales se dispone, especialmente en cuanto a perfiles de daño (algo más difíciles de encontrar en la bibliografía).

Con el fin de verificar las prestaciones del modelo de daño, los perfiles simulados son, en su mayoría, de dosis altas (entre  $10^{14}$  y  $8 \cdot 10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>).

Todos los resultados corresponden a perfiles en que se muestra la concentración de impurezas o el porcentaje de la amorfización frente a la profundidad. Aunque ya se ha comentado que el programa IIS es capaz de suministrar resultados tridimensionales, en la bibliografía no se han encontrado resultados experimentales con los que se pudieran comparar, por lo que en las comparativas se muestran los resultados reducidos a una dimensión.

### 5.1. Boro en silicio

Las implantaciones de boro en silicio han sido las más frecuentemente simuladas a lo largo del desarrollo del módulo de daño.

La figura 5.1 muestra cómo los perfiles de impurezas que se consiguen se ajustan satisfactoriamente a los perfiles experimentales obtenidos mediante la técnica SIMS para las energías simuladas de 15, 35 y 80 keV, aunque en este último caso la curva simulada queda ligeramente

más profunda que el resultado experimental. Son implantaciones sobre silicio  $\langle 100 \rangle$  con una orientación  $(1^\circ, 0^\circ)$ . La dosis es en los tres casos de  $8 \cdot 10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>. El perfil SIMS aparece en [3].

En la figura 5.2 se muestran los perfiles de daño correspondientes a las implantaciones anteriores. La comparativa entre los perfiles simulados y los conseguidos mediante la técnica RBS ofrece unos resultados muy pobres. Este comportamiento incorrecto a la hora de simular los perfiles de daño en las implantaciones de boro no es exclusivo de este simulador, pues otros simuladores como el UT-MARLOWE [3] también padecen esta deficiencia. Ello podría deberse al recocido dinámico que ocurre durante la implantación del boro [27], pues la temperatura ambiente es superior a la temperatura de transición del boro .

En todas las simulaciones de implantaciones de boro en silicio se usan unos valores para los parámetros ajustables de  $f_{surv} = 0,13$  y  $r_s^0 = 1,85$ .

## 5.2. Arsénico en silicio

Las simulaciones de implantaciones de arsénico en silicio ofrecen unos perfiles de impurezas que, en su mayoría, coinciden muy satisfactoriamente con los resultados experimentales.

Tras efectuar los ajustes de parámetros se han determinado como valores óptimos  $r_s^0 = 2,0$  y  $f_{surv} = 0,4$ .

La figura 5.3 muestra la comparativa entre los perfiles de impurezas SIMS y los resultados de simulaciones efectuadas con el programa IIS, que ofrece unos resultados plenamente satisfactorios. Corresponden a una implantación de arsénico en silicio  $\langle 100 \rangle$  a una energía de 50 keV. La implantación de mayor dosis es de  $8 \cdot 10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>, y está efectuada con una orientación de  $(0^\circ, 0^\circ)$ . La simulación de menor dosis es de  $10^{14}$  at/cm<sup>2</sup> con una orientación de  $(1^\circ, 0^\circ)$  cuya comparativa entre perfil de daño experimental y simulado se muestra en la figura 5.4, que da unos resultados aceptables.

La figura 5.5 (página 80) muestra la comparativa entre los perfiles de impurezas de dos implantaciones de arsénico sobre silicio  $\langle 100 \rangle$  efectuadas con una energía de 100 keV. La implantación de mayor dosis es de  $5 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup>, con ángulos  $(1^\circ, 0^\circ)$ . Esta implantación es la que mayores discrepancias presenta entre su perfil experimental y simulado, lo que, dado que el resto de comparativas del arsénico son muy buenas, puede hacer dudar acerca de la validez de este perfil SIMS (perfiles que pueden llegar a tener un margen de error de hasta un 15 ó 20 %). Su correspondiente comparativa entre perfiles de daño se muestra en la figura 5.6, en la que, si bien es cierto que el ajuste es perfecto, conviene recordar las dudas que existentes acerca de los resultados experimentales de esta implantación.

La simulación de menor dosis de la figura 5.5 es de  $10^{14}$  at/cm<sup>2</sup> con una orientación de

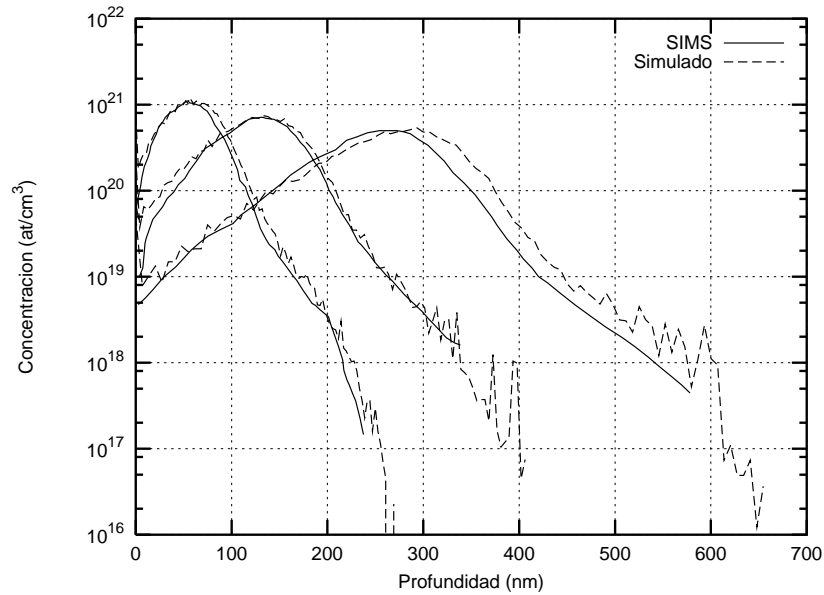


Figura 5.1: Silicio <100> implantado con boro con energías 15, 35 y 80 keV, orientación ( $1^\circ$ ,  $0^\circ$ ) y dosis  $8 \cdot 10^{15}$  at/cm². El perfil SIMS aparece en la referencia [3]

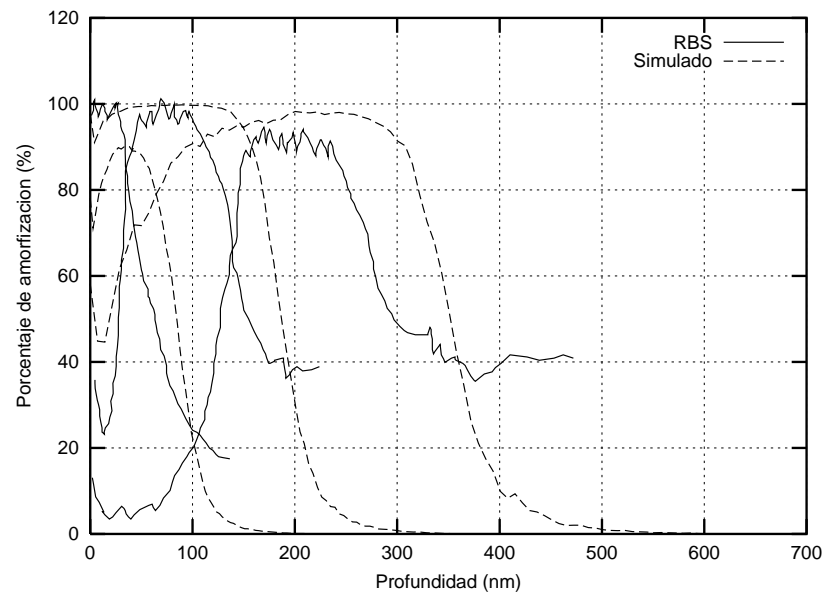


Figura 5.2: Perfiles de daño correspondientes a las implantaciones de la figura 5.1. El perfil RBS está obtenido de la referencia[3].

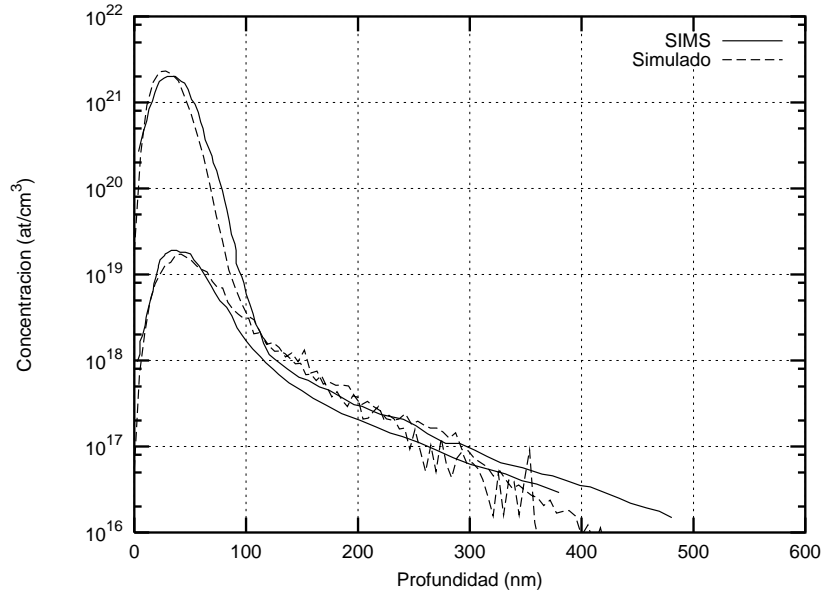


Figura 5.3: Perfiles de impurezas correspondientes a sendas implantaciones de arsénico en silicio  $\langle 100 \rangle$  a una energía de 50 keV. La implantación de dosis  $8 \cdot 10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>, está efectuada con una orientación  $(0^\circ, 0^\circ)$ . Su correspondiente comparativa entre los perfiles de daño experimental y simulado se muestra en la figura 5.4. La implantación de menor dosis es de  $10^{14}$  at/cm<sup>2</sup> con una orientación de  $(1^\circ, 0^\circ)$  [3].

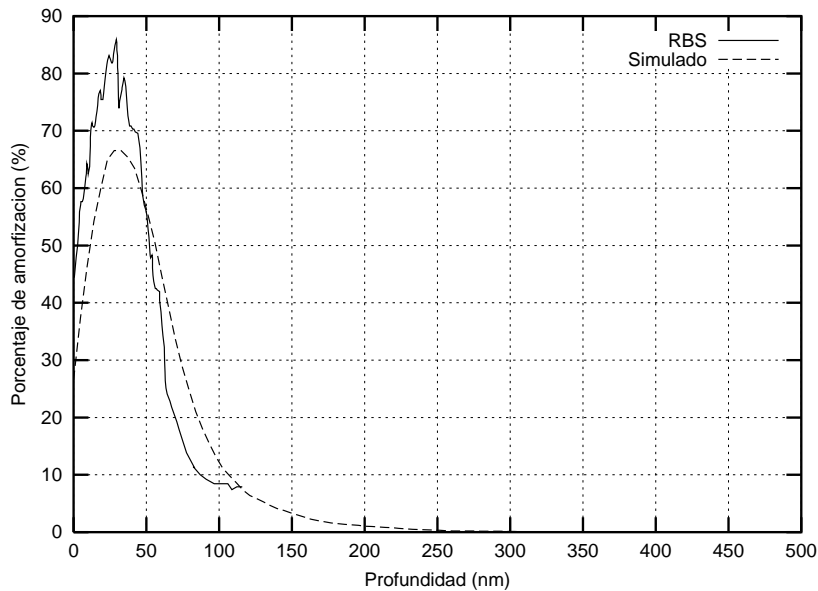


Figura 5.4: Perfil de daño correspondiente a la implantación de dosis  $10^{14}$  at/cm<sup>2</sup> de la figura 5.3 El perfil RBS está obtenido de la referencia [3].

(0°, 0°). El resto de condiciones experimentales son las mismas.

### 5.3. Fósforo en silicio

Las simulaciones de implantaciones de fósforo en silicio también ofrecen buenos resultados, especialmente en las zonas próximas a la superficie y el máximo de impurezas.

Los parámetros ajustables utilizados en el caso del fósforo tienen los valores  $r_s^0 = 1,85$  y  $f_{surv} = 0,4$ .

En la figura 5.7 se muestra la comparativa de dos implantaciones de fósforo en silicio  $\langle 100 \rangle$  con una energía de 50 keV. La dosis empleada en ambas implantaciones es de  $2 \cdot 10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>, con ángulos (1°, 0°), y (7°, 30°). El ajuste de los perfiles simulados con las medidas SIMS es muy bueno en las zonas superficiales y del máximo de impurezas, aunque en las colas de acanalamiento es más pobre. En la figura 5.8 se muestra una comparativa entre los perfiles RBS y los simulados para estas mismas implantaciones. Los resultados son bastante buenos, aunque ambos perfiles prevén una capa amorfizada algo más estrecha que la medida experimentalmente.

En la figura 5.9 se muestran los perfiles experimentales y simulados para sendas implantaciones con las mismas condiciones experimentales que las anteriores, excepto que en este caso la energía es de 80 keV y las dosis implantadas, de  $5 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup>. Al igual que en el caso anterior, los perfiles simulados ofrecen peores resultados en las colas de acanalamiento, como si se subestimara el acanalamiento, lo que no se corresponde con sus perfiles de dañado correspondientes (ver figura 5.10), que son muy satisfactorios.

### 5.4. Antimonio en silicio

En el caso del antimonio, los perfiles simulados no se ajustan a los experimentales.

Los parámetros de ajuste que se han utilizado han sido  $r_s^0 = 2,2$ , y  $f_{surv} = 0,6$ .

En la figura 5.11 se muestran los perfiles de impurezas SIMS y simulados de una implantación de antimonio sobre silicio  $\langle 100 \rangle$  efectuada con una energía de 20 keV. La dosis es de  $2 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup>, con una orientación del cristal de (7°, 30°). Se ve que el ajuste entre experimental y simulado no es muy bueno, hecho que también se da en la comparativa entre perfiles de dañado 5.12 de la misma implantación. A pesar del mal ajuste, si se efectuara una traslación del perfil simulado hacia dentro del cristal, el ajuste sí sería correcto.

En la figura 5.13 se muestra otra comparativa. Se trata de implantaciones de antimonio sobre silicio con 50 keV de energía. La orientación del cristal es de (0°, 0°) y las dosis de  $3 \cdot 10^{13}$  y  $2 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup>. Se comprueba cómo también en este caso el perfil de dosis más alta queda desplazado hacia la superficie, y el de dosis más baja, ni siquiera llega a describir correctamente la forma

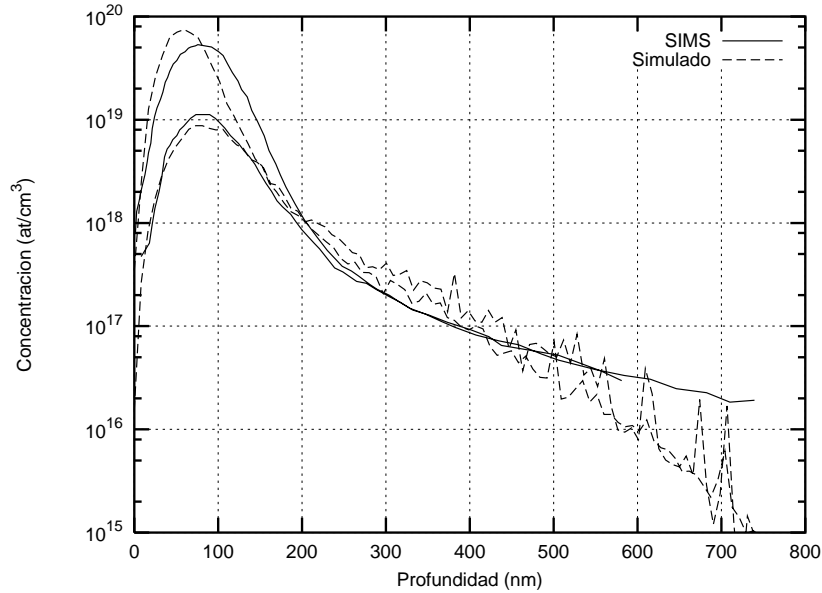


Figura 5.5: Perfiles de impurezas de implantaciones de arsénico en silicio  $\langle 100 \rangle$  con 100 keV de energía. La implantación de mayor dosis es de  $5 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup>, con ángulos ( $1^\circ$ ,  $0^\circ$ ), y el perfil SIMS aparece en la referencia [3]. La simulación de menor dosis es de  $10^{14}$  at/cm<sup>2</sup> con una orientación de ( $0^\circ$ ,  $0^\circ$ ).

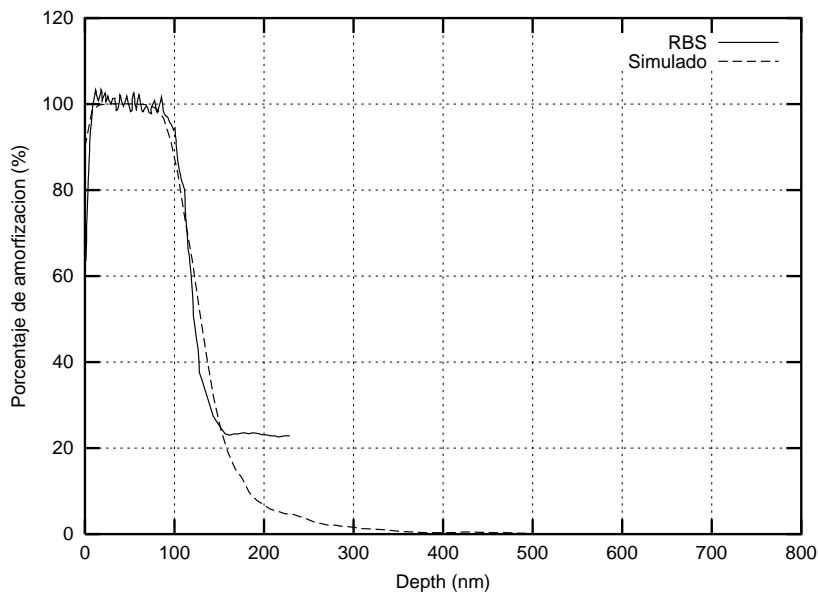


Figura 5.6: Perfil de daño correspondiente a la implantación de dosis  $5 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup> de la figura 5.5. El perfil RBS está obtenido de la referencia [3].

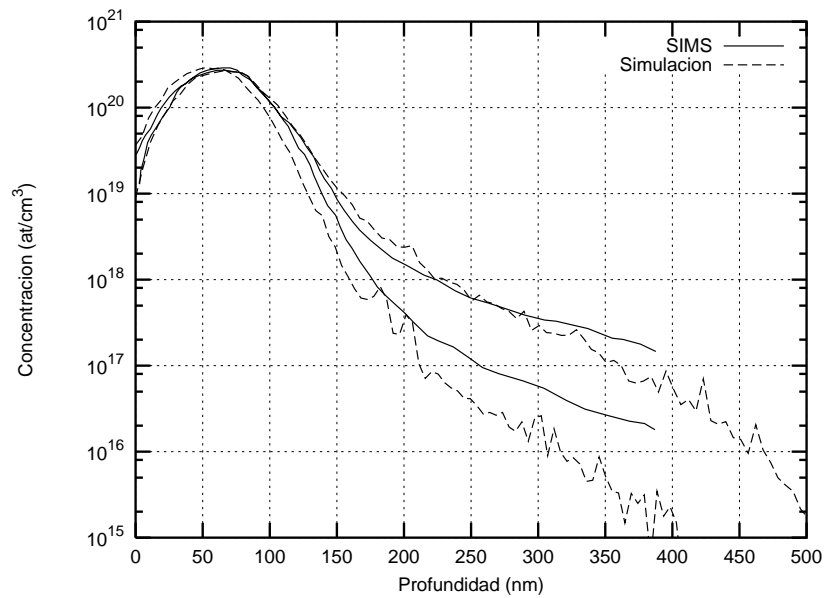


Figura 5.7: Perfiles de impurezas de implantaciones de fósforo en silicio  $\langle 100 \rangle$  con 50 keV de energía. Las dosis son de  $2 \cdot 10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>, con ángulos ( $1^\circ$ ,  $0^\circ$ ), y ( $7^\circ$ ,  $30^\circ$ ). Ambos perfiles SIMS aparecen en la referencia [3].

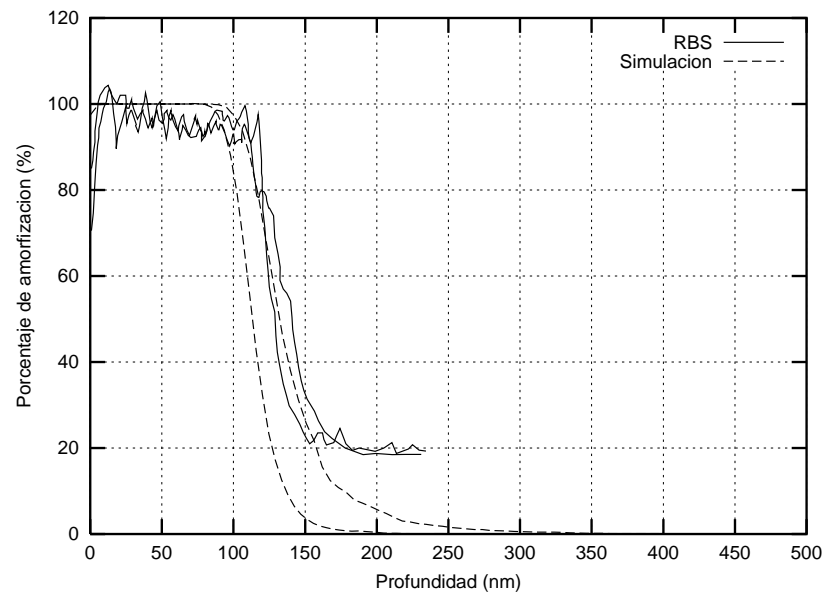


Figura 5.8: Perfiles de daño correspondientes a las implantaciones de la figura 5.7. Los perfiles RBS están obtenidos de la referencia [3].

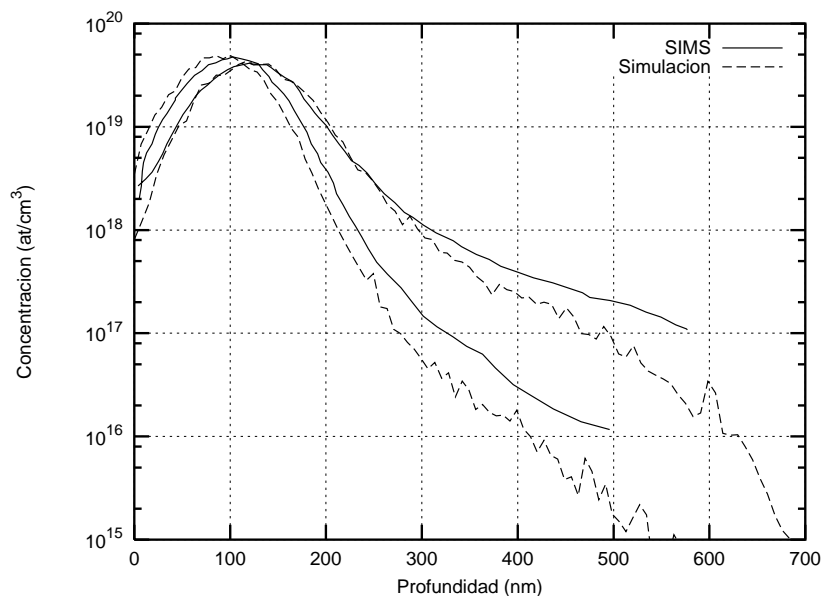


Figura 5.9: Perfiles de impurezas de implantaciones de fósforo en silicio  $\langle 100 \rangle$  con 80 keV de energía. Las dosis son de  $5 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup>, con ángulos ( $1^\circ$ ,  $0^\circ$ ), y ( $7^\circ$ ,  $30^\circ$ ). Ambos perfiles SIMS aparecen en la referencia [3].

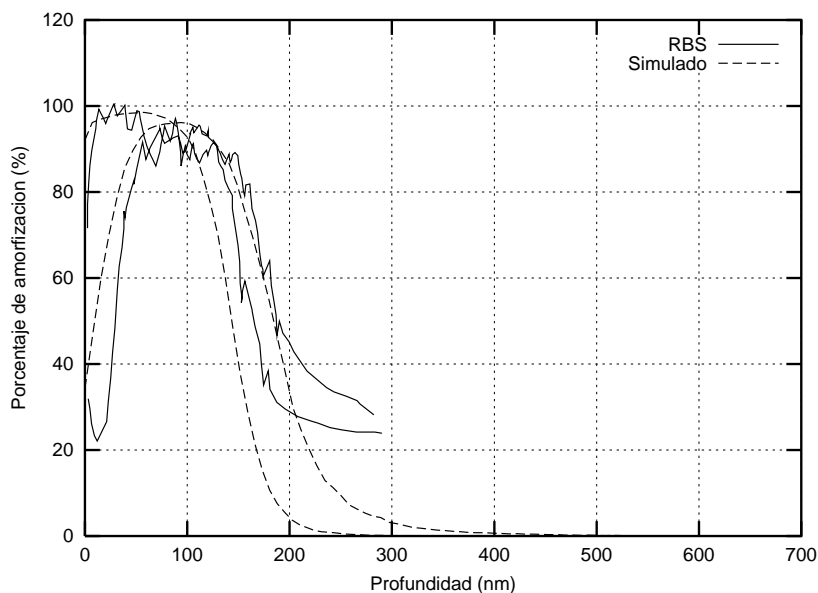


Figura 5.10: Perfiles de daño correspondientes a las implantaciones de la figura 5.9. Los perfiles RBS están obtenidos de la referencia [3].



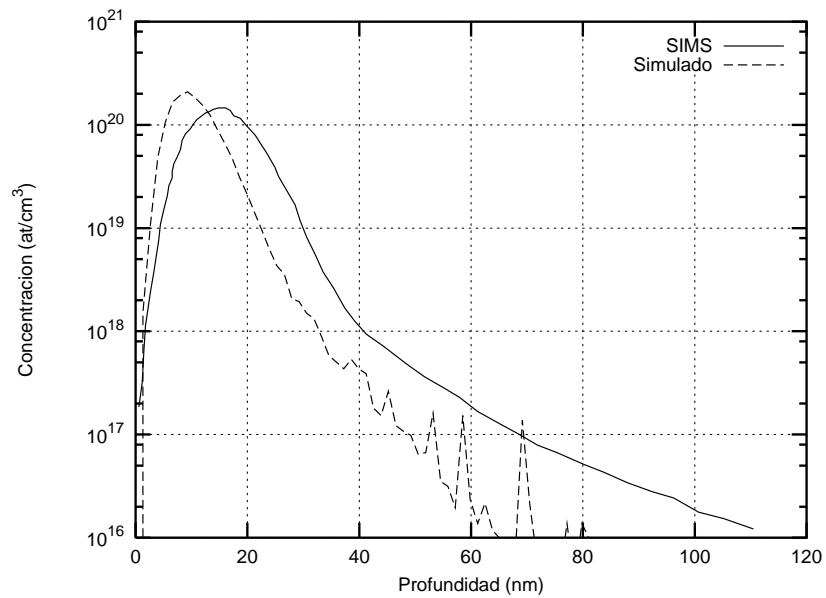


Figura 5.11: Perfiles de impurezas de implantaciones de antimonio en silicio  $\langle 100 \rangle$  con 20 keV de energía. La dosis es de  $2 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup>, con ángulos ( $7^\circ$ ,  $30^\circ$ ) [3].

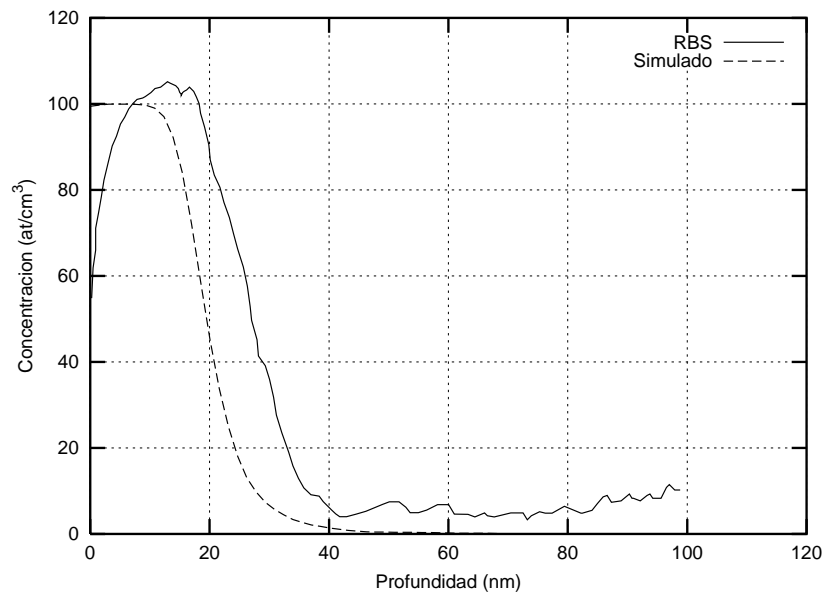


Figura 5.12: Perfiles de daño correspondientes a las implantaciones de la figura 5.11. Los perfiles RBS aparecen en la referencia [3].

del resultado SIMS. En la figura 5.14 se muestran sus correspondientes perfiles de dañado. Los resultados también son malos, pues en la simulación, además de preverse una capa amorfizada más estrecha, el dañado queda muy por debajo de lo esperado en el caso de la implantación de menor dosis.

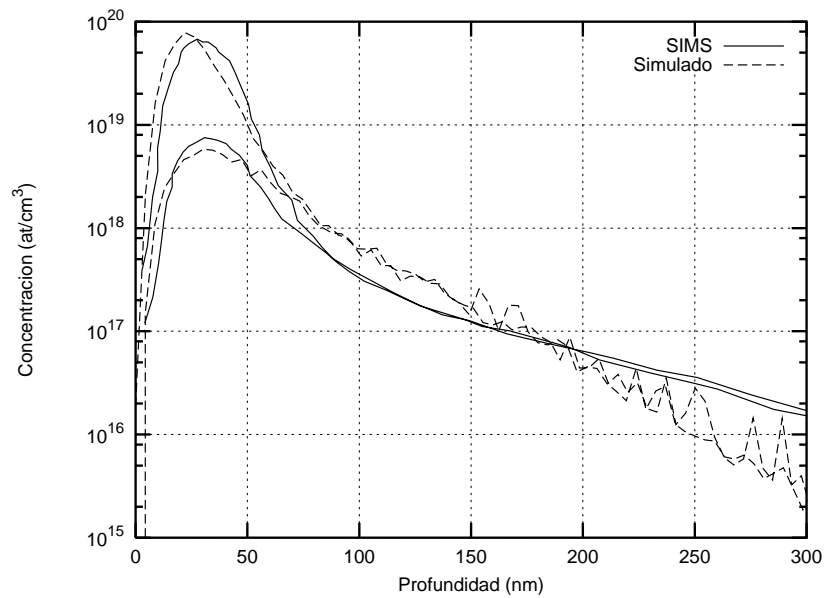


Figura 5.13: Perfiles de impurezas de implantaciones de antimonio en silicio  $\langle 100 \rangle$  con 50 keV de energía. La dosis es de  $2 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup>, con ángulos (7°, 30°) [3].

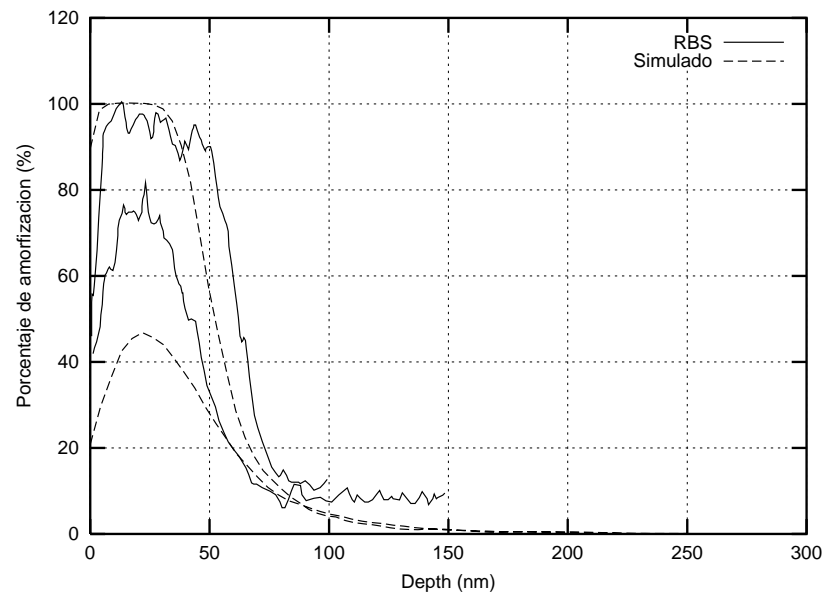


Figura 5.14: Perfiles de daño correspondientes a las implantaciones de la figura 5.13. Los perfiles RBS aparecen en la referencia [3].



## Capítulo 6

# Evaluación económica

El coste económico de la elaboración del proyecto asciende a un total de 24000 euros, que se puede dividir en gastos de personal, de material y de asistencia a congresos

- **Gastos de personal**

Salario del investigador cualificado para desarrollar e implementar el módulo de acumulación de daño.

- **Gastos de material:**

- Adquisición de un ordenador personal.
- Bibliografía
- Adquisición de una impresora.
- Compras de licencias de software.
- Material fungible.
- Adquisición de un escáner.

- **Asistencia a congresos**

En el cuadro 6.1 se desglosan los gastos de cada uno de los conceptos anteriores, junto con el gasto total del proyecto. Todas las cantidades indicadas incluyen los impuestos.

Sólo se consigna el gasto correspondiente a un ordenador personal porque se dispone de otros equipos con el software adecuado como para poder llevar a cabo las simulaciones de la versión paralela del programa.

Los gastos de bibliografía indicados se podrían evitar recurriendo a las bibliotecas de distintas instituciones. Todas las obras referenciadas en esta memoria se encuentran disponibles en las distintas bibliotecas de la Universidad de Valladolid o bien están accesibles en internet desde la

Concepto	Unidades	Euros
Salario	12 meses x 1450 euros	17400
Asistencia a congresos	—	4000
Ordenador	1 unidad	1500
Bibliografía	—	450
Impresora	1 unidad	200
Licencias de software	—	200
Material fungible	—	150
Escáner	1 unidad	100

**Gasto total: 24000 euros**

Cuadro 6.1: Resumen de gastos

red de la universidad. Algunos de los artículos son accesibles libremente desde toda la internet, sin necesidad de encontrarse en la red de la universidad.

En caso de no poder recurrir a las bibliotecas, se hubieran tenido que adquirir los libros de texto, cuyo precio ronda los 60 euros por ejemplar. Asimismo, los artículos de cada una de las revistas se podrían haber descargado on-line previo pago de cantidades que oscilan entre los 20 y 30 euros por artículo, dependiendo de la publicación. Por ello la estimación de costes para la bibliografía se puede cifrar en 450 euros.

Para que la investigación pueda estar al orden del día de los avances de la comunidad científica, resulta interesante acudir a congresos en que los distintos grupos de investigación exponen sus trabajos. Además hay un intercambio mutuo de información que permite progresos en la labor que se lleva a cabo.

Durante la elaboración de este proyecto, se han enviado trabajos a cinco congresos. Cuatro de los congresos aceptaron las contribuciones, aunque por motivos fundamentalmente económicos no se pudo asistir al congreso IBMM celebrado en Kobe (Japón). Por ello, se consignan los gastos de dos congresos nacionales (el CDE'01 celebrado en Granada y el CDE'03 celebrado en Calella, Barcelona), y un congreso internacional (el COSIRES'02 celebrado en Dresde, Alemania). Los gastos totales para estos tres congresos, considerando las inscripciones, viajes, alojamientos y dietas, se estiman en 4000 euros.

La duración total del proyecto con un investigador trabajando en él a jornada completa es de un año.

## Capítulo 7

# Conclusiones

El trabajo que se presenta en esta memoria es fruto del esfuerzo conjunto del tutor del proyecto, Jesús Manuel Hernández Mangas, y el alumno, Jorge Lázaro Ortega. La realimentación entre ambos ha sido continua con el fin de que el modelo de acumulación de daño se acoplara perfectamente en el programa IIS y se pudieran ir incorporando las distintas funcionalidades extras ya comentadas.

Al finalizar el proyecto se han cumplido los objetivos propuestos al principio del mismo, y se pueden sacar las siguientes conclusiones:

- El programa IIS dispone en la actualidad de un modelo de acumulación de daño que es capaz de simular el proceso de amorfización de la red cristalina cuando se le somete a una implantación iónica. Este modelo se puede utilizar en su versión unidimensional y tridimensional, dependiendo del tipo de resultados que se deseen.
- El modelo de daño utilizado está basado en fundamentos físicos. Parte de la fórmula de Kinchin-Pease, a la que se modifica para ofrecer una mejor descripción de la realidad experimental, y utiliza una recombinación estadística para dar cuenta de la recombinación de defectos.
- El número de parámetros ajustables del modelo es mínimo, pues sólo se utiliza un parámetro ajustable,  $f_{surv}$ . Así, el simulador IIS queda con sólo dos parámetros ajustables:  $r_s^0$ , que actúa sobre el frenado electrónico, y  $f_{surv}$ , que actúa sobre el módulo de daño. Todos los resultados que se muestran en esta memoria han sido obtenidos manipulando únicamente esos dos parámetros ajustables según el tipo de proyectil cuya implantación se simulaba.
- El módulo de implantación ha quedado plenamente integrado en el programa. Apenas ha habido que efectuar cambios en su estructura principal. Las fases de creación y recombinación de defectos se simulan mediante una subrutina a la que se llama en diferentes

momentos, según se esté utilizando la versión básica, la paralela, la energía de corte, etc. Todas las prestaciones previas del IIS se han mantenido y son plenamente compatibles con el módulo de dañado.

- La incorporación del módulo de dañado penaliza la duración de las simulaciones. Con el modelo de dañado unidimensional, las simulaciones se alargan ligeramente. Sin embargo, con el modelo de dañado tridimensional las simulaciones se alargan bastante aunque se utilice el método de replicación incondicional.
- La incorporación del módulo de dañado al programa IIS no ha hecho aumentar en exceso los recursos que el programa necesita. Únicamente en la versión tridimensional sí se requieren bastantes más recursos de memoria, así como también aumenta notablemente el volumen de información intercambiado entre los distintos procesos. En cualquier caso, son totalmente asumibles en equipos informáticos de los actuales.

Los resultados obtenidos de las simulaciones son bastante satisfactorios, particularmente en los casos del boro y el arsénico, en que las comparativas entre los perfiles de impurezas experimentales y los perfiles simulados dan unos resultados muy buenos.

## 7.1. Posibles mejoras

El modelo tridimensional es computacionalmente mucho más lento y costoso que el de una dimensión, por lo que, en principio, es preferible usarlo únicamente cuando se requiera una descripción espacial del dañado del cristal. Con el fin de mejorar las prestaciones del mecanismo de replicación, sería interesante incluir un nuevo mecanismo de replicación condicional, en que la réplica se efectúe únicamente cuando la zona por la que se mueve el ion replicado sea de las mismas características que las del ion cuya trayectoria está siendo replicada, según se indicó en el apartado 4.1.4.

Otra mejora del modelo de acumulación de dañado sería un algoritmo que considerara el sputtering del blanco, es decir, el efecto que tiene sobre la implantación el hecho de que los proyectiles “arranquen” de la superficie implantada parte de los átomos que se encuentran en ella. En [28, 29] se proponen modelos para considerar esta circunstancia.

Otros efectos que se podrían tener en cuenta son el hinchado o *swelling* del semiconductor y la velocidad de implantación. Respecto al swelling, básicamente consiste en que debido a la introducción de las impurezas en el cristal, éste aumenta su volumen muy ligeramente [29]. Respecto a la velocidad de implantación (o *dose rate*), sus efectos podrían notarse en que la recombinación cambia su comportamiento debido a la continua inserción de proyectiles, que



impide que se lleve a cabo con normalidad. Su efecto es muy tenue, y sólo se aprecia en las colas de acanalamiento [30]

Tanto el sputtering, el swelling y la velocidad de implantación tienen efectos que en primera aproximación no son relevantes, por lo que no constituyen una carencia relevante del IIS, pues además son muy pocos simuladores que los tienen en cuenta.

Un salto cualitativo en las características del simulador sería dotarle de la capacidad de simular también el proceso de difusión posterior a la implantación (recocido), o incluso, llegar a simular el recocido dinámico, es decir, la difusión que se produce mientras se efectúa la implantación. Así se podría conocer la distribución final de impurezas y su porcentaje de activación, así como el estado de amorfización en que queda la red cristalina tras las difusiones.



## Apéndice A

# Manual de referencia del módulo de dañado

Este manual de referencia no explica el funcionamiento del programa completo IIS, sino que se centra únicamente en las partes relevantes para el módulo de dañado. Si se desea obtener más información o un manual de referencia general del programa, se puede recurrir a la bibliografía [9, 31].

### A.1. Palabras clave

Para su funcionamiento, el programa IIS requiere de un fichero de entrada en el que figura toda la información acerca de la implantación que se va a simular. Este fichero se pasa como parámetro en la línea de comandos al ejecutarse el programa.

El archivo de entrada consta de unas palabras clave seguidas de los valores con las condiciones en que se va a efectuar la simulación. Si alguna palabra clave no aparece en el fichero de entrada, el programa toma un valor por defecto. Si una palabra clave aparece más de una vez en el archivo de entrada, el programa recoge el último valor que le ha sido asignado.

A continuación se muestra un listado de las palabras clave relativas al módulo de dañado con su valor por defecto indicado entre corchetes. En [9, 31] hay información sobre el resto de palabras clave.

#### Palabras clave principales

- `Dose` [10<sup>12</sup>]  
Fija la dosis de la implantación a simular en at/cm<sup>2</sup>.
- `NumberOfImplants` [10]  
Fija el número de proyectiles que se desea simular.

- **KinchinPeaseConstant** [0.8]  
Fija el valor de la constante  $k$ , utilizado en la fórmula 3.3. En principio, este valor es fijo y no debe ser alterado.
- **DisplacementEnergy** [15.0]  
Fija la energía  $E_d$  en eV necesaria para arrancar un átomo de su posición en la red cristalina. El valor por defecto es de 15 eV, el calculado experimentalmente para la red del silicio. A no ser que se implante sobre otro material, este valor no debe ser alterado.
- **RecombinationFactor** [0.06]  
Fija el valor de  $f_{surv}$  (la fracción de defectos que sobreviven a la recombinación, ya sea inter o intracascada). Se debe utilizar como parámetro de ajuste, dependiendo de las especies implantadas.
- **AmorphizationRatio** [0,1·4,99·10<sup>22</sup>]  
Fija el valor de  $N_\alpha$  (la densidad de defectos a partir de la cual se considera el cristal amorfizado). El valor por defecto es el del silicio:  $N_\alpha = 0,1·4,99·10^{22}$  defectos/cm<sup>3</sup>. En principio, este valor es fijo y no debe ser alterado.
- **LevelOfSimulation** [1]  
Selecciona la opción de seguir todas las subcascadas que puede provocar un proyectil al poner en movimiento a átomos de la red o no seguirlas. En caso de que se sigan, se debe fijar el valor 0 para esta palabra clave. En caso contrario, el valor 1.
- **CutOffEnergy** [0.15]  
Fija el valor de la energía de corte  $E_{cut-off}$  a considerar para no amorfizar en una sola colisión una caja entera. Sus unidades son eV/Å<sup>3</sup>, y el valor por defecto equivalente a 24eV/celdilla si se implanta sobre silicio. Es un parámetro de ajuste que sólo se debe utilizar en el caso de hacer uso de la aproximación de la energía de corte.
- **FullDoseOutput** [1]  
Selecciona si en las salidas provisionales que ofrece el programa antes de finalizar su ejecución se muestran los perfiles de impurezas escalados respecto a la dosis final (si se asigna valor 1) o respecto a la fracción de dosis cuya implantación ha sido simulada hasta ese momento (si se asigna valor 0).

### Palabras clave relativas a la implantación múltiple

- **PreviousDamageFile** [Nombre\_Fichero]  
Fija el nombre del archivo que contiene los datos relativos al dañado del blanco antes

de que se efectúe la siguiente implantación durante el transcurso de una implantación múltiple. No se toma ningún valor por defecto, es decir, se supone que, a no ser que se indique lo contrario, la implantación simulada no es múltiple. En este caso, la implantación múltiple se está efectuando mediante varias ejecuciones del programa IIS, cada una con su archivo de entrada.

#### ■ Projectiles

Es una palabra clave que se puede utilizar en lugar de **AtomP** para seleccionar el proyectil a implantar. Se incluye en este apartado porque también se utiliza en una especie de implantación múltiple: la implantación de especies compuestas. En este tipo de implantaciones, como sería la del  $\text{BF}_2$ , en el momento en que compuesto entra en el blanco se disocia. Con el  $\text{BF}_2$ , en cada cascada se simula la implantación de un solo proyectil de boro y continuación la implantación de los dos iones de flúor. Esto se indica en el fichero de entrada con la palabra clave seguida del número de orden en la lista de átomos del proyectil a implantar.

#### ■ NextSimulation

Indica que se va a simular una implantación múltiple en una sola ejecución del programa. Si se van a simular  $n$  implantaciones en una ejecución, esta palabra clave debe aparecer  $n - 1$  veces. Esta palabra clave afecta a las siguientes palabras clave<sup>1</sup>:

- **AtomP** Selecciona el proyectil a implantar.
- **ENERGY** Energía de implantación.
- **Tha** Ángulo polar de la implantación.
- **Phi** Ángulo azimutal de la implantación.
- **Divergency** Divergencia del haz.
- **NumberOfImplants** Número de proyectiles a implantar.
- **Dose** Dosis de la implantación.
- **Temperature** Temperatura a que se efectúa la implantación.
- **RareEvent** Activa o no el algoritmo de sucesos poco probables.
- **RSO** Fija el parámetro  $r_s^0$  que usa el modelo de frenado electrónico no local *Our*.

Los parámetros de entrada antes de la primera aparición de la palabra clave **NextSimulation**, se refieren a la primera implantación. Los parámetros que aparecen entre la primera y segunda aparición se refieren a la segunda implantación, y así sucesivamente hasta la última vez que aparece, en la ocasión  $n - 1$ , y que precede a los parámetros válidos para la implantación  $n$ -ésima.

---

<sup>1</sup>Más información sobre estas palabras clave en [9, 31]

### Palabras clave relativas al algoritmo de división de dosis

- **DoseSplitting** [0]

Selecciona la activación o no del algoritmo de división de dosis. En el caso de que se asigne valor 1, el algoritmo se activa. En caso contrario, no.

- **DoseDistribution**

Fija los valores de las dosis de cada una de las etapas a simular en el caso de que se use el algoritmo de división de dosis. Para ello se indican las dosis deseadas en orden creciente finalizando la serie con el valor 0. En el caso de que no lleguen a la dosis completa de la implantación, en la última etapa se simula la implantación de la dosis restante. Si esta palabra clave no aparece, el programa efectúa una selección del conjunto de dosis a simular automáticamente.

### Palabras claves relevantes en la implantación en 3D

- **WinA y WinB**

Define las aristas de las ventanas de implantación en los ejes  $z$  u horizontal e  $y$  o vertical del cristal, respectivamente.

- **ImplantationArea** [100]

Fija el área (en  $\text{\AA}^2$ ) del que se va a tener información en el caso de las simulaciones tridimensionales. De este modo se puede seleccionar la resolución deseada para el dañado.

## A.2. Opciones de compilación

No todas las prestaciones del programa están disponibles sobre un mismo archivo ejecutable, con lo que no pueden ser seleccionadas simplemente desde el archivo de entrada. Así ocurre, por ejemplo, con las opciones de ejecución secuencial o paralela, que requieren de dos archivos ejecutables diferentes. De igual modo ocurre con las versiones unidimensional o tridimensional o, dentro de la versión tridimensional, la ejecución utilizando o no la réplica incondicional.

A partir del código fuente se puede generar en cualquier momento un archivo con las prestaciones que se quieren usar empleando la compilación condicional de distintas partes del código. De este modo se dispondrá de distintos archivos ejecutables entre los que habrá que elegir según las características de la simulación de la implantación que se va a efectuar.

Otra de las ventajas de la compilación condicional es la capacidad de generar ejecutables optimizados para distintas máquinas y sistemas operativos.

### A.3. Listado de ejemplo

El listado mostrado a continuación corresponde a una implantación múltiple de boro sobre un blanco de silicio.

Respecto a las palabras clave de interés para el dañado, se ha escogido un valor  $f_{surv} = 0,13$ , y una densidad de defectos para considerar el cristal amorfizado de un 10 % la densidad de la red del silicio (aproximadamente  $5 \cdot 10^{21}$  at/cm<sup>3</sup>). Se simulan las cascadas completas, con lo que no se utiliza la aproximación de la energía de corte.

Respecto a las etapas de las simulaciones, las tres se efectúan con la misma orientación (tilt=0°, rot=0°). La primera de las implantaciones tiene una dosis de  $8 \cdot 10^{15}$  at/cm<sup>3</sup>, una energía de 80 keV, y se simulan 2000 proyectiles. En la segunda implantación, la dosis es de  $4 \cdot 10^{14}$  at/cm<sup>3</sup>, una energía de 15 keV y se simulan 3000 iones. En la última implantación la dosis es de  $10^{12}$  at/cm<sup>3</sup>, la energía de 7 keV y se simulan 1000 proyectiles.

```

Ionization[ ZBL ]
ASINTOTICO 0
RS0 1.85 0.0 *****
Divergency 1.5 degrees *****
DivType 0
RareEvent 2

RecombinationFactor 0.13
AmorphizationDensity 5e21

Stopping[ Our ]
LevelOfSimulation 0

Dose 8e15
ENERGY 80000 eV
NumberOfImplants 2000
Tha 0 degrees (tilt)
Phi 0 degrees

Therm 1
Temperature 300 kelvin

AtomP 1

Atom B 5 11.000 519.0
Atom Si 14 28.086 519.0

ABC 1 0 0

// Si <100>

XTal 2 6 0.00 0.00 0.00 15 // Si
XTal 2 6 0.25 0.25 0.25 15 // Si
Amorphous 0
XMin 0.0 A
XMax 1e10 A

```

```
EDTFile[ EDT_Si ]

NextSimulation

NumberOfImplants 3000
ENERGY 15000 eV
Dose 4e14

NextSimulation

NumberOfImplants 1000
ENERGY 7000 eV
Dose 1e12
```

## A.4. Salidas del programa

A lo largo de la ejecución del programa se genera un subdirectorio en el que se crean una serie de archivos con información relevante acerca de la simulación:

- **Parameters.out**

Recopila toda la información acerca de los parámetros de entrada con que se ha efectuado la simulación. Junto a cada parámetro se indica su valor, que es el que se ha indicado en el archivo de entrada o en su defecto, el valor predeterminado por el programa.

- **[NombreFichero].i\_j**

Contiene la información en formato ASCII del histograma de las concentraciones de impurezas a distintas profundidades. En el caso de una simulación tridimensional, se trata de las concentraciones en la hilera de cajas centrales. El valor  $i$  indica la etapa dentro de una implantación múltiple. El  $j$  indica la posición del tipo de proyectil en la lista **Projectiles** del archivo de entrada al que corresponden los resultados en el caso de la implantación de un compuesto (como el  $\text{BF}_2$ ). **NombreFichero** se puede elegir en el archivo de entrada de la simulación. Si alguno de los componentes de una implantación múltiple se implanta varias veces (como el flúor en el  $\text{BF}_2$ , que se implanta dos veces por cada boro implantado), en lugar de usarse **NombreFichero** se usa **Histo**, y contiene la suma de los perfiles de los proyectiles del mismo tipo.

- **Ion.i.histo3D.bin**

Contiene la información en formato binario acerca de las distintas concentraciones de impurezas de los iones del tipo  $i$  de la lista de proyectiles (tras la palabra clave **Projectiles** del archivo de entrada) implantados en todas las cajas en que se ha dividido el cristal. Se pueden visualizar cortes del cristal cómodamente mediante el programa **ver3d2**. En la figura A.1 se muestra un ejemplo de la visualización de dicho archivo de salida.



## Apéndice B

# Publicaciones

En este apéndice se recopilan los distintos artículos y comunicaciones con información acerca del trabajo desarrollado durante la elaboración de este proyecto. Los datos correspondientes a cada uno de ellos son:

- Cumulative damage model in atomistic ion implant simulation  
Se reproduce en la página 104, y fue publicado en el libro de actas de la “Conferencia de Dispositivos Electrónicos” celebrada en Granada en febrero de 2001.
- Statistical 3D damage accumulation model for ion implant simulators.  
Se reproduce en la página 110, y fue publicado en el número 202:138-142 (2003) de la revista “Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B”.
- Parallelization of a statistical 3D damage accumulation model for ion implant simulation  
Se reproduce en la página 116, y fue publicado en el libro de actas de la “Conferencia de Dispositivos Electrónicos”, celebrada en Calella (Barcelona) en el mes de febrero de 2003.
- Dose division algorithm: improvements of damage accumulation on ion implant simulators  
Se reproduce en la página 122. También fue publicado en el libro de actas de la “Conferencia de Dispositivos Electrónicos”, celebrada en Calella (Barcelona) en el mes de febrero de 2003.



## **B.1. Cumulative damage model in atomistic ion implant simulation**

En la siguiente página se presenta el artículo con este título, publicado entre las páginas 121 y 124 del libro de actas de la “Conferencia de Dispositivos Electrónicos” celebrada en Granada en febrero de 2001.

# Cumulative damage model in atomistic ion implant simulation

J. Lázaro, J. M. Hernández Mangas, L. Bailón, J. Arias, M. Jaraiz.

Dept. Electricidad y Electrónica, Univ. de Valladolid, Spain

## Abstract

A cumulative damage model for the ion implant simulation based on the modified Kinchin-Pease formula is presented. It has been implemented in a BCA-based simulator with a new way to simulate the interaction with damage. The model can predict impurity profiles and damage profiles in depth. A parallel version has been implemented to reduce its calculation time without losing the good agreement obtained in the sequential version between simulation and experimental SIMS profiles. The model has also the faculty to simulate multiple implant experiments.

## 1. Introduction

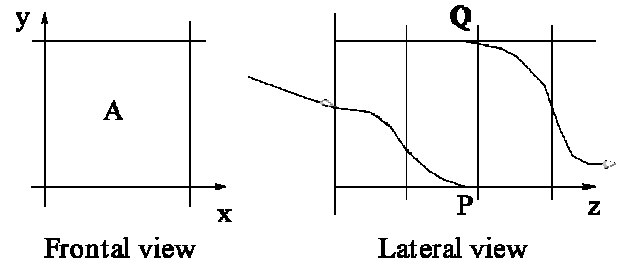
Ion implantation has become one of the main processes used in the fabrication of integrated microelectronic devices, allowing controlled doping of the active areas. The simulation of ion implantation in electronic materials is used to predict the impurity profiles, avoiding expensive and time-consuming experiments. To perform those simulations the binary collision approximation (BCA) is widely used [1-5]. When the dose implanted is important, ions cause damage to the crystal lattice, and effects like the channelling of the ions decrease at the same time as the material amorphizes. This damage accumulation is a non-linear phenomenon. Several models have been proposed. The Kinchin-Pease model [6] has been widely used [7-9].

Our contribution uses a Kinchin-Pease modified model that includes a new method to simulate the interaction between the ions and the damage already present. Boron implantations in silicon at various directions have been simulated with doses between  $10^{13}$  and  $8 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  for energies ranging from 15 keV to 80 keV.

This work presents the basis of the model divided in the defect generation, with the optional cut-off energy or complete simulation, and the interaction with damage; Also other abilities implemented are described: multiple implant simulation in order to describe any technological process; parallel calculus that reduces the calculation time. Finally results and conclusions are presented.

## 2. Model description

The damage model described above has been incorporated to the Binary Collision Approximation



**Fig. 1.** Lateral and frontal view of the sectors used in the damage model. Each section A is repeated periodically in x and y axis. A projectile stepping out the sector in point P will enter into the sector in point Q. This approach is only used for the damage model.

(BCA) code developed at the University of Valladolid UVA-Marlowe[10-14].

In order to describe the damage model, the crystal is divided into slices that are perpendicular to the z axis (see Figure 1). The section, A, depends on the dose,  $\phi$ , and on the number of ions simulated,  $N_S$ :  $A = N_S / \phi$ . These quadrangular prisms are considered to be repeated in the x and y axes, as shown in figure 1. As a result of this periodicity, if an implanted ion moves from the central prism to an adjacent prism (trajectory P), a translation of its coordinates makes it enter to the central prism in the opposite side (trajectory Q).

Due to the simplified nature of this model, we talk about defects in general, without specifying if they are interstitials or vacancies. Our damage model is based on the modified Kinchin-Pease model, and it has two parts: the defect generation/recombination and the damage modelling.

### Defect generation/recombination

The number of point defects generated,  $n$ , is proportional to the energy lost,  $E$ , by nuclear scattering in each sector:

$$n = \frac{kE}{2E_d} \quad [\text{Eq. 1}]$$

where  $k$  is a fitting parameter and  $E_d$  is the displacement threshold energy. For boron into silicon implants  $k = 0.8$  and  $E_d = 15 \text{ eV}$ .

Part of the point defects generated recombines with other defects created in the same or in previous cascades, so the net increase of point defects after

recombination,  $\Delta n$ , is given by:

$$\Delta n = n_{f_{rec}}^f \left( 1 - \frac{N}{N_\alpha} \right) \quad [\text{Eq. 2}]$$

where  $f_{rec}$  is the fraction of point defects surviving both intracascade and intercascade recombination,  $N$  is the previous local defect density, and  $N_\alpha = \alpha N_L$  is the local defect density necessary to consider the sector amorphized;  $N_L$  is the atom density. For boron into silicon we use  $\alpha = 0.1$ . This formula means that the number of defects surviving the recombination is less if a previous damage exists. When a sector of the crystal is completely amorphized no more defects can be incorporated, and then  $\Delta n = 0$ . The trajectories of all displaced atoms are followed to keep in mind all the energy distributed in the whole crystal.

In order to reduce the computational overload generated by following the complete cascade, a simplification could be used [6-8]. It consists in following only the primary ion. When a scattering event occurs the energy transferred to the target atom  $E$  is compared with a cut-off energy ( $E_{cut-off}$ ). If this is greater than the cut-off energy then the mechanism considers only a transfer energy  $E = E_{cut-off}$ . This energy is defined as energy needed to amorphize completely a sector as the result of a single collision. The number of local defect density will be less than  $N_\alpha$ . The approximation does not take into account the effect of the energy deposited by the secondary atoms.

This new parameter is tunable and must be fitted to obtain a good agreement between simulations with complete cascade development and with only primary ion cascade. A reduction of calculation time of about 30% is obtained (depending on the simulation characteristics).

### Interaction with damage

The trajectory of an ion depends on how amorphized is the crystal at each sector. If the local defect density in a sector is near  $N_\alpha$  the behaviour of the ion will be as in an amorphous material.

In order to take into account the damage several authors [6-8] place an interstitial in the  $\langle 110 \rangle$  dumbbell configuration (two atoms centered in the lattice site and displaced along the  $\langle 110 \rangle$  direction by about one bond distance). This configuration has the lowest energy for a neutral interstitial silicon atom, and the simulation takes place taking into account the new configuration.

Our modelization is even more simple. The local defect density is a measure of the amorphization of each sector in the crystal. If the sector is completely amorphous a random rotation of the crystal lattice is performed for each collision as MARLOWE does [14].

For a partially amorphized section, a random number is compared with the corresponding percentage of amorphization  $N/N_\alpha$ . If the random number does not

exceed  $N/N_\alpha$ , a random rotation of the crystal lattice is done and the scattering event occurs. Later, the crystal is restored to prevent to change the original crystal orientation.

### 3. Multiple implant simulation

In multiple implant experiences, the same target is used for two or more consecutive implantations, so in the beginning of the second or further implantations the crystal is already damaged. Multiple implants have become a useful tool, which is specially interesting in the crystal preamorphization cases (using as implanted species Si or Ge) in order to prevent boron channelling in techniques as ultra-shallow junction formation, and in As or B implants, to reduce their diffusivities and to avoid the generation of hot-carriers in the production of short-channel MOS devices.

In the present model, during an implantation simulation the percentage of amorphization of each sector is stored in a file, which is continuously updated. That is useful information because the amorphization's evolution can be followed, and the buried amorphous layers can be predicted without problems.

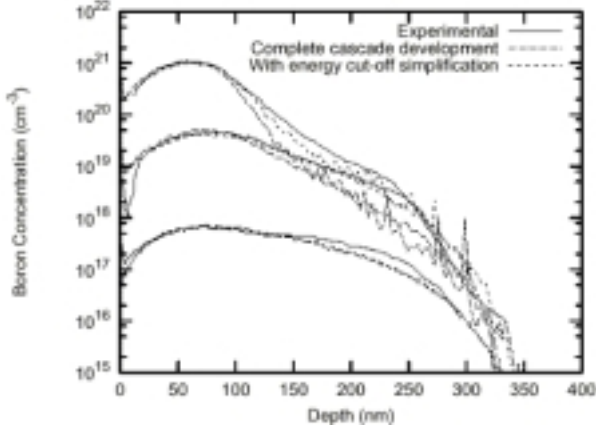
With the crystal damage profile stored in a file, it is easy to simulate multiple implantations, because they appear like only one simulation in various steps for the damage model. It does not matter if the specie implanted is not the same in all implantations, or if the energy or the orientation of the crystal has been varied, because this damage model is independent of those variables.

When a multiple implant is simulated, the damage generated by the previous one is used as the initial damage profile for the current one.

### 4. Parallel version

The modelization described can be parallelized in order to execute the simulation in a workstation cluster and to reduce the computation time. The PVM library [15, 16] is used. A master-slave configuration is implemented in our simulator [13]. Master program serves work to the slave processes. When the slave performs the task assigned it sends the partial results to the master to be used in order to obtain the new crystal status (damage, etc.). The network's speed is not enough to send all the information produced about damage from the slave to the master. Our approach to the problem uses the slave to simulate one primary ion completely (using or not the cut-off energy simplification), without sending any results to the master and without using the intra-cascade damage generated. The slave accumulates the information necessary to increase the global damage at the end of the ion simulation. This approximation has proved to be good enough for our purposes.

The number of defects,  $\Delta n$ , is not directly proportional to the energy, so the total number of defects cannot be obtained simply by addition of those generated in each



**Fig. 2.** Illustration of the ability of the UVA-MARLOWE with the presented damage model to predict dose-dependent impurity profiles for boron implantation into  $\langle 100 \rangle$  ( $0^\circ$ ,  $0^\circ$ ) silicon with energy of 15 keV, with doses of  $10^{13}$ ,  $5 \cdot 10^{14}$  and  $8 \cdot 10^{15}$  cm $^{-2}$ . A comparison between the complete cascade development and the cut-off simplification is made.

slave process. At the end of each simulation, master process uses:

$$N_{j+1} = N_j A_{final} + B_{final} \quad [\text{Eq. 3}]$$

to obtain the current defect density  $N_{j+1}$  using the previous one  $N_j$ ;  $A_{final}$  and  $B_{final}$ , are provided by the slaves. These two new parameters come from an iterative process, which is dose and energy dependent. When an ion cascade begins,  $A_0 = 1$  and  $B_0 = 0$  for all sectors and later equation 4 is used:

$$\begin{aligned} A_{i+1} &= A_i \left( 1 - \frac{f_{rec} n}{N_\alpha V} \right) \\ B_{i+1} &= B_i \left( 1 - \frac{f_{rec} n}{N_\alpha V} \right) + \frac{n f_{rec}}{V} \end{aligned} \quad [\text{Eq. 4}]$$

where  $n$  is the number of point defects, and  $V$  is the volume of the sector.

Eq. 3 and 4 arise from a manipulation of Eq. 1 and 2.

The damage profile is obtained at this point like in the sequential version and it is sent to the slaves for new ion cascades simulations. Then the master will wait for another slave that finished its work and so on.

## 5. Results

The model has been used to simulate boron into silicon implantations under a wide range of energies, crystal orientations and doses. Good agreement with experimental profiles has been obtained particularly where primary ion cascade was used, with energies of 15 and 80 keV, crystal orientations in the  $\langle 100 \rangle$  channel with both ( $0^\circ$ ,  $0^\circ$ ) and ( $7^\circ$ ,  $30^\circ$ ) angles of tilt and rotation. It is expected to obtain better profiles using the complete cascade development than using primary ion cascade, so we are now working to fit all the tunable parameters. Nowadays, profiles obtained using

complete cascade development agree with the experiment in the amorphization peak, but they do not at more depth. On the other hand, the experimental results [7] are not completely characterized, because data about dose rate is not given. The dose rate modifies impurity profiles, particularly in channelling conditions [17]. The simulator does not take into account dose rate.

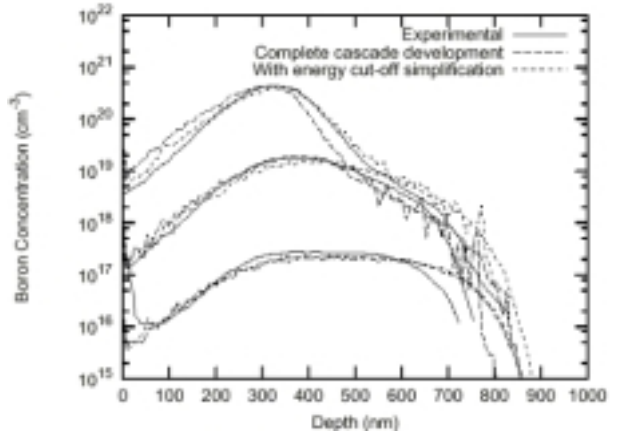
Figure 2 shows a 15 keV implantation into  $\langle 100 \rangle$  ( $0^\circ$ ,  $0^\circ$ ) silicon. Good agreement is obtained in the amorphization peak for various doses, but complete cascade development does not give as good results as the energy cut-off simplification in the channelling tails.

Figure 3 illustrates the results of a simulation in the same conditions of the figure 2, except the energy, which in this case is 80 keV. The amorphization peak is also well described, but in the channelling tails, differences appear.

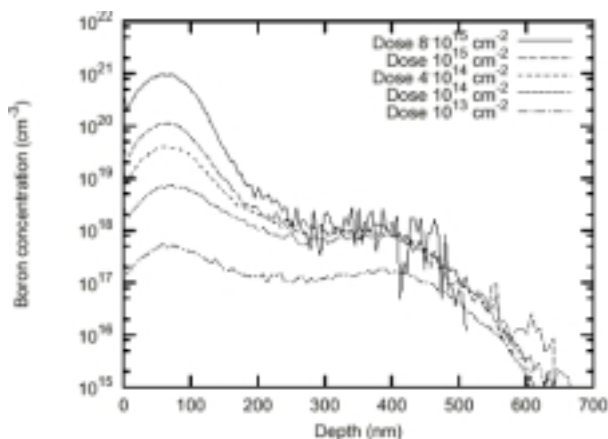
Figure 4 shows the results of the implantation in which the channelling effects are more relevant: boron into  $\langle 110 \rangle$  ( $0^\circ$ ,  $0^\circ$ ) silicon. The energy used is 15 keV. The dechannelling effects appear when dose increases, and the amorphization peak grows up quickly.

Figure 5 refers to the same implantation than figure 4, but here the evolution of the amorphization percentage is presented. Only a thin layer of the crystal suffers a significant amorphization, but it causes the dechannelling effects showed in figure 4. There will be a critical dose, over  $10^{15}$  cm $^{-2}$ , at which the first sector completely amorphized appears. That critical dose depends on the specie implanted.

Figure 6 presents the increase of the simulation speed using the parallel version. The evolution of the number of ions simulated per second with the number of processors is linear. A saturation can be expected to appear if the number of processors grows, and it would be caused by the limitation of the master to process all the information from the slaves or by the network speed.



**Fig. 3.** Illustration of the ability of the UVA-MARLOWE with the presented damage model to predict dose-dependent impurity profiles for boron implantation into  $\langle 100 \rangle$  ( $0^\circ$ ,  $0^\circ$ ) silicon with energy of 80 keV and doses of  $10^{13}$ ,  $5 \cdot 10^{14}$  and  $8 \cdot 10^{15}$  cm $^{-2}$ . A comparison between the complete cascade development and the cut-off simplification is made.



**Fig. 4.** Simulation of the amorphization process of a  $\langle 110 \rangle$  ( $0^\circ$ ,  $0^\circ$ ) silicon crystal when the boron dose implanted increases, with an energy of 15 keV. Impurity profile becomes sharper when the dose increases, an amorphization peak appears and the dechannelling effect can be clearly appreciated.

## 6. Conclusions

This model has obtained good agreement in the simulation of implantation of boron into silicon with experimental SIMS profiles in a wide range of energies and doses, and with different orientations of the crystal in both versions, using cut-off energy and full simulation. In addition, the parallel operation has obtained impurity profiles identical to the sequential version, but with the faculty of reducing the calculation time significantly.

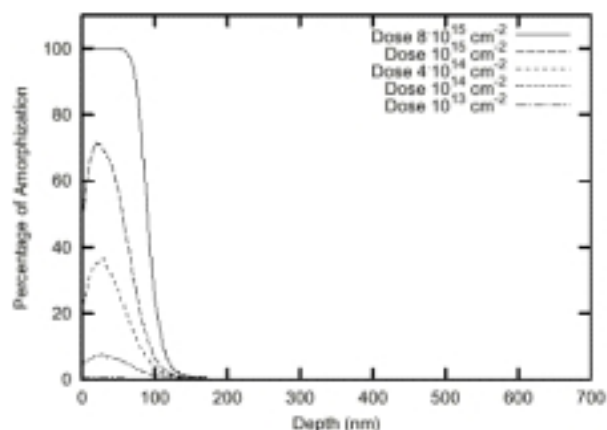
We are now working on a new deterministic model. That model will be able to characterize the defect nature (interstitials, vacancies...) and to simulate the interactions between them.

## Acknowledgments

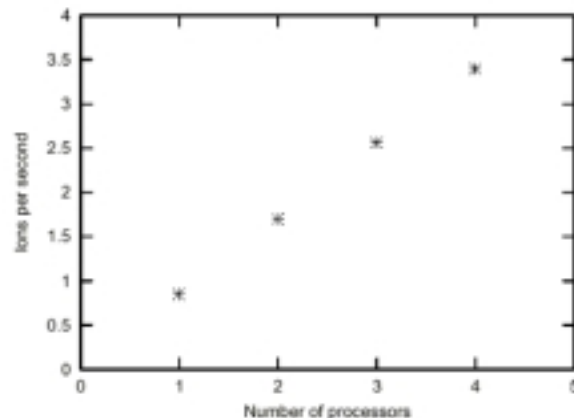
This work was performed under the auspices of the Junta de Castilla y León (VA 14/00B) and the DGICYT project n° PB 98-0398.

## References

- [1] J. Hernández, M. Jaraiz, J. Arias, L. Bailón, J. Barbolla, A. Rubio and J. L. Orantes. In *Conferencia de Dispositivos Electrónicos*, Madrid, 1999.
- [2] Cheruvu S. Murthy and G. R. Srinivasan. *IEEE Trans. Elect. Dev.*, 39(2):264-273, 1992.
- [3] David Cai, Niels Gronbech-Jensen, C. M. Snell, and K. M. Beardmore. *Phys. Rev. B*, 54(23):17147-17157, 1996.
- [4] Kevin M. Klein, Changae Park, and A. F. Tasch. *IEEE Trans. Elect. Dev.*, 39(7):1614-1621, 1992.
- [5] J. Arias, J. Hernández, M. Jaraiz, L. Bailón and J. Barbolla. In *Conferencia de Dispositivos Electrónicos*, Barcelona, 1997.
- [6] G. H. Kinchin, R. S. Pease. *Rep. Progress Phys.* Vol 18, pp. 1-51, 1955.
- [7] Kinchin – Pease Damage Model. U. T. Marlowe V. 4.0 Ion Simulation Program, Appendix H, User's guide.
- [8] Y. Chen, B. Obradovic, M. Morris, G. Wang, G. Balamurugan, D. Li, A. F. Tasch, D. Kamenitsa, W. McCoy,



**Fig. 5.** Simulation of the variation of the percentage of amorphization in a  $\langle 110 \rangle$  silicon crystal when the boron dose implanted increases. Doses are  $10^{13}$ ,  $10^{14}$ ,  $4 \cdot 10^{14}$ ,  $10^{15}$  and  $8 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . In the last one, completely amorphized sectors appear.



**Fig. 6.** Simulation speed variation when the number of processors increases in boron into  $\langle 100 \rangle$  ( $0^\circ$ ,  $0^\circ$ ) silicon, with an energy of 10 keV and with 7000 ions simulated.

- S. Bauman, D. Sietoff, D. Dyer, and P. Zeitroff. <http://tcad.stanford.edu/tcad-journal/archive>, 1999
- [9] K. M. Klein, C. Park, and A. F. Tasch. *Nucl. Instr. and Meth. B*, 59/60:60-64, 1991.
- [10] J. Arias, M. Jaraiz, L. Pelaz, L. Bailón and J. Barbolla. *Nucl. Instr. and Meth. B*, 102:228-231, 1995.
- [11] J. Arias, M. Jaraiz, J. E. Rubio, L. Pelaz, L. A. Marqués, and J. Barbolla. *Journal Mat. Sci. and Tech.*, 11:1191-1193, 1995.
- [12] J. Arias. *PhD thesis, University of Valladolid*, Valladolid, 1995.
- [13] J. M. Hernández-Mangas. *PhD Thesis, University of Valladolid*, Valladolid, 2000.
- [14] M. T. Robinson. Radiation Shielding Information Center, ORNL, Oak Ridge, TN 37831-6362, pages 1-115, 1984.
- [15] Oak Ridge National Laboratory. PVM Library. <http://www.netlib.org/pvm3/>, 1999.
- [16] J. Dongarra, A. Geist, R. Moncheck and V. Sunderman. *Computer in physics*, 7(2):166-175, 1993.
- [17] S. Tian, S.-H. Yang, S. Morris, K. Parab, A. F. Tasch, D. Kamenitsa, R. Reece, B. Freer, R. B. Simonton, C. Magee. In *Electronics Materials Conference*, Charlottesville, VA, 1995.





## **B.2. Statistical 3D damage accumulation model for ion implant simulators**

En la siguiente página se presenta el artículo con este título. Fue publicado entre las páginas 138 y 142 del número 202 de la revista “Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B”, en el año 2003.



ELSEVIER

Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

SCIENCE @ DIRECT®

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 202 (2003) 138–142

**NIM B**  
Beam Interactions  
with Materials & Atoms

[www.elsevier.com/locate/nimb](http://www.elsevier.com/locate/nimb)

## Statistical 3D damage accumulation model for ion implant simulators

J.M. Hernández-Mangas \*, J. Lázaro, L. Enriquez, L. Bailón,  
J. Barbolla, M. Jaraíz

*Departamento de Electricidad y Electrónica, Universidad de Valladolid, E-47011 Valladolid, Spain*

### Abstract

A statistical 3D damage accumulation model, based on the modified Kinchin–Pease formula, for ion implant simulation has been included in our physically based ion implantation code. It has only one fitting parameter for electronic stopping and uses 3D electron density distributions for different types of targets including compound semiconductors. Also, a statistical noise reduction mechanism based on the dose division is used. The model has been adapted to be run under parallel execution in order to speed up the calculation in 3D structures. Sequential ion implantation has been modelled including previous damage profiles. It can also simulate the implantation of molecular and cluster projectiles. Comparisons of simulated doping profiles with experimental SIMS profiles are presented. Also comparisons between simulated amorphization and experimental RBS profiles are shown. An analysis of sequential versus parallel processing is provided.

© 2002 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

*PACS:* 34.10.+x; 61.72.Tt; 61.72.-y; 61.82.-d; 61.85.+p; 68.55.Ln

*Keywords:* Ion implantation; Computer simulation; Damage accumulation

### 1. Introduction

Ion implantation is one of the most important methods employed for selective doping of semiconductors. The prediction of impurity distributions obtained in ion implantations is feasible using computer simulation, avoiding expensive experiments. Two methods are, usually, employed to make the simulations: molecular dynamics

(MD) [1] and binary collision approximation (BCA) [2–4], which is faster although less accurate than MD.

Physically based models must be used to simulate the behavior and trajectories of projectiles in a three-dimensional crystalline target structure in order to predict the 3D doping and amorphization profiles. Our simulator includes a physically based model for inelastic stopping that uses only one fitting parameter,  $r_s^0$ , that depends on the ion-target combination [4,5]. It also uses 3D electron density distributions.

This work presents several new features of our BCA ion implant simulator (IIS) that includes a statistical 3D damage model based on the

\* Corresponding author. Tel.: +34-983-423000; fax: +34-983-423675.

E-mail address: [jesman@ele.uva.es](mailto:jesman@ele.uva.es) (J.M. Hernández-Mangas).

Kinchin–Pease modified formula [6], an automated statistical noise reduction mechanism based on dose division and a new parallelized scheme to speed up the total calculation time.

## 2. Three-dimensional damage accumulation model

### 2.1. Model basis

The crystalline target is divided into regions as shown in Fig. 1. The front surface of each region has an area,  $A = N_{\text{sim}}/\Phi$ , where  $N_{\text{sim}}$  is the number of simulated ions and  $\Phi$  is the dose. The depth of each region is dynamically adjusted to keep a fixed number of boxes in depth, so as not to increase the computational resources. The damage accumulation process has two stages:

- (a) First, the projectile generates damage along its trajectory. The number of point defects generated,  $n$ , is obtained by means of the modified Kinchin–Pease formula:  $n = kE/(2E_d)$ , where  $E$  is the energy transferred by the projectile to the target atoms in nuclear scattering,  $k = 0.8$  is a constant and  $E_d$  is the displacement energy (e.g. 15 eV for silicon) of the lattice atoms. Only a fraction,  $f_{\text{surv}}$ , of the point defects survives the recombination with other defects, so the net increase of point defects  $\Delta n$  is given by:  $\Delta n = nf_{\text{surv}}(1 - N/N_\alpha)$ , where

$N$  is the previous local defect density of the crystal and  $N_\alpha$ , the local defect density above which the crystal is amorphized (e.g.  $N_\alpha = 10\%$  of the atomic density of silicon [7]). The increase in the number of defects is greater when the crystal is not amorphized than when the crystal is partially amorphized. Finally, the new defect density at each box will be  $N = N + \Delta n/V$ ,  $V$  being the box volume.

- (b) Second, when a projectile enters a partially damaged region, its trajectory depends on the amorphization level of that region. If the local defect density,  $N$ , is near 0 the behavior is like the projectile entering a perfect crystalline target. On the contrary, if  $N$  almost reaches  $N_\alpha$  the behavior is like entering an amorphous target, then a random number is compared with the fraction  $N/N_\alpha$  before performing each scattering event. If the random number exceeds  $N/N_\alpha$ , then the scattering takes place like in a perfect crystalline lattice. Otherwise, the scattering is simulated like in an amorphous target: the crystal lattice is rotated randomly [4], the scattering is performed, and finally the crystal lattice orientation is restored.

The inset in Fig. 2 shows a two-dimensional slice ( $y = 0$ ) of the three-dimensional statistical

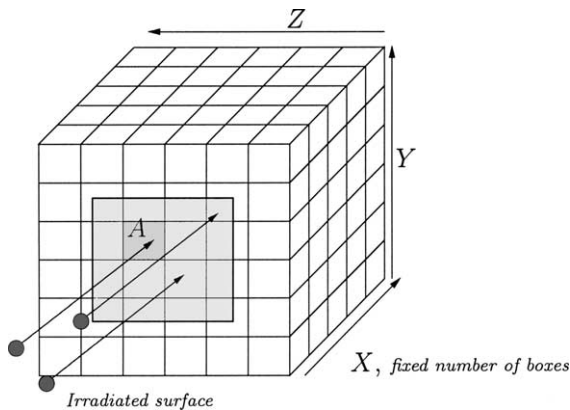


Fig. 1. Three-dimensional scheme of the crystal division into regions. Crystal amorphization is calculated for each region.

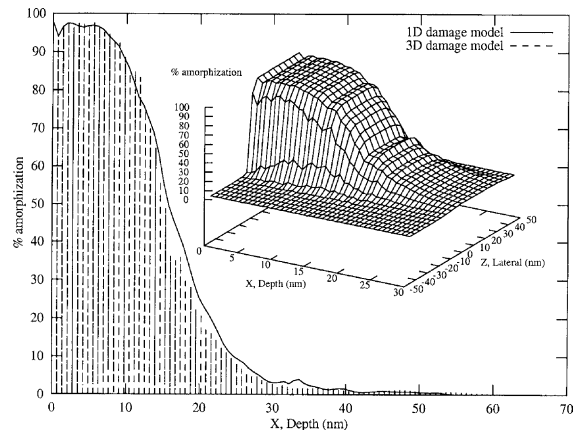


Fig. 2. Comparison between one-dimensional and three-dimensional damage model at line  $y = 0$ ,  $z = 0$ . Inset: two-dimensional slice for  $y = 0$  of the three-dimensional damage.

damage obtained with our new model for an implantation of boron ( $0^\circ$  tilt,  $0^\circ$  rot.) into silicon  $\{100\}$ . The implantation window in the three-dimensional simulation is  $44.7$  by  $44.7$  nm<sup>2</sup> wide and there are not periodic boundary conditions. The damage description is three-dimensional but for illustration purposes we only show a two-dimensional slice. A comparison between three-dimensional projection (line  $y = 0$ ,  $z = 0$ ) and one-dimensional [4] damage model is shown in Fig. 2. They both show the same behavior in the center region of the three-dimensional profile. This means that the three-dimensional model works at least as well as one-dimensional damage model.

In order to avoid the statistical noise in the low concentration doping zones an automatic noise reduction mechanism based on dose division [8] has been developed. The total number of ions simulated is  $M_T$ . We simulate  $m$  stages of  $M$  ions ( $M_T = mM$ ). At each stage, each simulated ion represents a different dose fraction. The first  $M$  ions represent a very low dose fraction (e.g.  $10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>). We achieve statistical accuracy in the lower concentration doping zone of the final profile due to the low damage generated and the channelling phenomena. Next  $M$  ions represent a higher dose fraction (e.g. 10 times more than the previous one) and they are implanted taking into account the previous damage. We obtain statistical accuracy in the middle concentration zones of the final profile due to a higher damage and a lower channelling

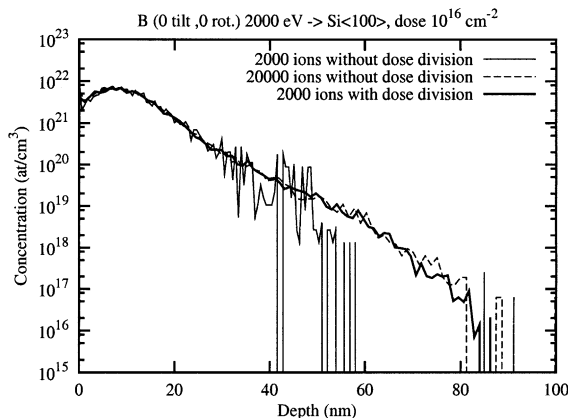


Fig. 3. Simulated doping profiles using and not using the dose division algorithm.

Table 1

Time simulation comparison using and not using the dose division algorithm

Energy (eV)	Time (s)	Time (s)	Time (s)
	2000 Ions	20,000 Ions	2000 Ion with dose division
2000	46.5 ( $\times 1$ )	631 ( $\times 13.4$ )	205 ( $\times 4.3$ )
20,000	265 ( $\times 1$ )	3163 ( $\times 11.9$ )	1116 ( $\times 4.2$ )
200,000	1424 ( $\times 1$ )	14,253 ( $\times 10.0$ )	4648 ( $\times 3.2$ )

phenomena. Finally, last  $M$  ions represent the remainder dose fraction. With this algorithm, we describe with enough statistical accuracy the whole doping concentration range of the final profile. Fig. 3 shows a comparison of simulated profiles using and not using the noise reduction algorithm. To achieve enough statistical accuracy in the tail of the impurity profile of a high dose implant we need to simulate 20,000 ions. Only 1/3 calculation time (see Table 1) is needed when using the dose division algorithm ( $m = 4$  stages and  $M = 2000$  ions) to achieve similar statistical accuracy.

## 2.2. Model parallelization

Three-dimensional damage accumulation modelization is very time and resources consuming. In order to speed up the simulations a parallelized version of the IIS code, that runs in a heterogeneous workstation cluster, has been developed. We use the PVM library [9] using a master–slave configuration. Master process distributes work among slave processes. Each slave simulates one projectile's cascade and returns data about damage and projectile's position to the master process. The slave processes do not see the damage produced by other concurrent cascades to prevent communication network overload. We need to know the incremental damage produced by each slave process in order to be accumulated by the master process because the damage accumulation is not linear. Then, the master will propagate the new defect density among the slave processes.

The master process, after the  $i$ th cascade, accumulates total damage using the equation  $N_i[\ ] = N_{i-1}[\ ]A[\ ] + B[\ ]$  where  $N_i[x, y, z]$  is the updated defect density for each box and  $A[x, y, z]$

and  $B[x, y, z]$  are two 3D arrays that include the incremental damage information generated by the slave. Initially,  $A_0[] = 1$  and  $B_0[] = 0$ . These arrays are updated after each collision (index  $j$ ) following the equations  $A_j[] = A_{j-1}[] (1 - (n_j f_{\text{surv}} / N_\alpha V))$  and  $B_j[] = B_{j-1}[] (1 - (n_j f_{\text{surv}} / N_\alpha V)) + (n_j f_{\text{surv}} / V)$  that have been obtained from the basic model (see Section 2.1). Each slave process, at the end of a cascade simulation, sends final  $A[]$  and  $B[]$  arrays to the master to update the total damage that will be taken into account in subsequent cascades.

The simulator throughput is practically multiplied by the number of slaves. However, a weak saturation is observed when the number of slaves grows, due to data transfers between processes.

### 3. Experimental validation

Fig. 4 shows the comparison between simulated and experimental SIMS [8] impurity profiles for an implantation of boron into silicon {100} with energies of 15, 35 and 80 keV, dose of  $5 \times 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup> and 1° tilt and 0° rotation. We use only one fitting parameter,  $r_s^0 = 1.85$ , for electronic stopping and,  $f_{\text{surv}} = 0.06$  and  $N_\alpha = 4.99 \times 10^{21}$  at/cm<sup>3</sup> for the 3D damage accumulation model. The agreement with experimental profiles is excellent.

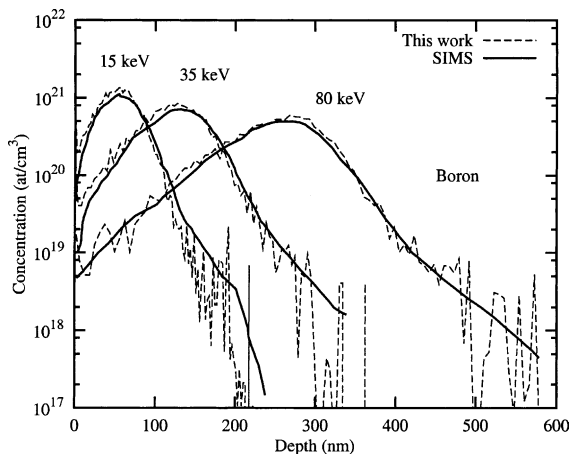


Fig. 4. Simulated and experimental SIMS [12] impurity profiles corresponding to boron (1°, 0°) into silicon {100} implantation. Energies are 15, 35, 80 keV, dose is  $8 \times 10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>.

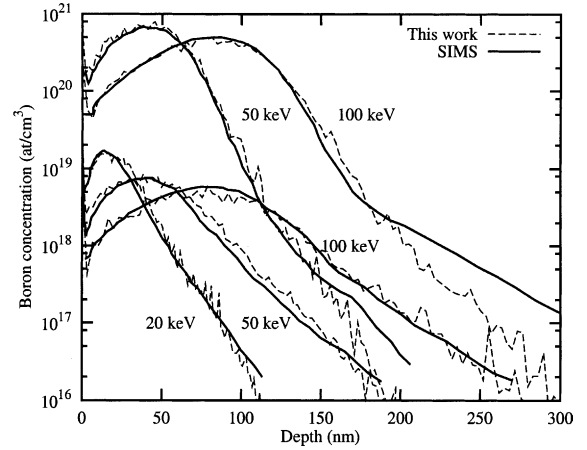


Fig. 5. Multiple implant of  $\text{BF}_2$  projectile with several energies and orientations: 20, 50, 100 keV (7°, 22°), with  $5 \times 10^{13}$  at/cm<sup>2</sup>; 50, 100 keV (7°, 0°) with  $4 \times 10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>. Comparison with experimental SIMS profiles [10] is presented. The agreement is good enough.

An example of molecular implantation is shown in Fig. 5. It shows the impurity profiles for a wide range of  $\text{BF}_2$  implantations into silicon {100}: energies of 20, 50 and 100 keV, doses of  $5 \times 10^{13}$  and  $4 \times 10^{15}$  at/cm<sup>2</sup>, and several crystal orientations (7°, 22°) and (7°, 0°). The agreement between simulated and experimental SIMS [10] profiles is excellent for, at least, three orders of magnitude.

Comparison between SIMS experimental results and simulated impurity profiles for arsenic (1°, 0°) into silicon {100} implants with 50 and 100 keV with doses of  $10^{14}$  and  $5 \times 10^{14}$  at/cm<sup>2</sup>, respectively are shown in Fig. 6 (top). In general the agreement is good enough. A comparison with RBS experimental damage profiles are also shown in Fig. 6 (bottom). In these cases we use a value of 2.00 for  $r_s^0$  and  $f_{\text{surv}} = 0.40$  and  $N_\alpha = 4.99 \times 10^{21}$  at/cm<sup>3</sup>. The main features of the experimental profiles are given by the simulated profiles in this case.

### 4. Conclusions

The simulation results obtained with the presented 3D model match well with the results provided by the previous one-dimensional model. This 3D model has been validated by means of a

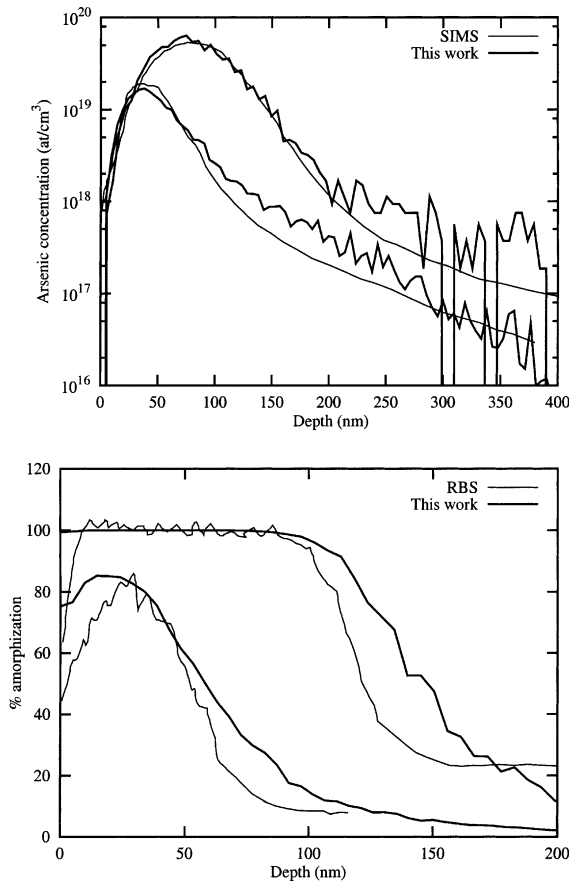


Fig. 6. Comparison of simulated and experimental SIMS (top) and RBS (bottom) profiles [8] for arsenic ( $1^\circ, 0^\circ$ ) into silicon {100} with energies and doses of 50 keV,  $10^{14}$  at/cm $^2$  and 100 keV,  $5 \times 10^{14}$  at/cm $^2$ , respectively.

comparison set between simulated and experimental results covering several projectiles and implant conditions. Two methods are suggested to speed up the calculation time: a parallelized algo-

rithm and an automatic dose division algorithm. Another method could be a trajectory replication mechanism as proposed by Li et al. [11].

### Acknowledgements

This work was performed under the auspices of the Junta de Castilla y León (VA 14/00B) and the DGICYT project no. PB 98-0398.

### References

- [1] K. Beardmore, N. Gronbech-Jensen, Phys. Rev. E 57 (6) (1998) 7278.
- [2] K. Klein, C. Park, A. Tasch, IEEE Trans. Elect. Dev. 39 (7) (1992) 1614.
- [3] D. Cai, N. Gronbech-Jensen, C. Snell, K. Beardmore, Phys. Rev. B 54 (23) (1996) 17147.
- [4] J. Hernández-Mangas, J. Arias, M. Jaraíz, L. Bailón, J. Barbolla, J. Appl. Phys. 91 (2) (2002) 658.
- [5] J. Hernández-Mangas, L. Enriquez, J. Arias, M. Jaraíz, L. Bailón, Solid State Electron. 46 (2002) 1315.
- [6] G. Kinchin, R. Pease, Rep. Prog. Phys. 18 (1955) 1.
- [7] G. Wang, S. Tian, M. Morris, B. Obradovich, G. Balamurugan, A. Tasch, Microelectronic Device Technology, Austin, TX, USA, SPIE-Int., Soc. Opt. Eng. (1997) 324.
- [8] T. University of Austin, UT-MARLOWE 5.0 User's guide., <http://homer.mer.utexas.edu/TCAD/utmarlowe>, 1999.
- [9] J. Dongarra, A. Geist, R. Mancheck, V. Sunderman, Comput. Phys. 7 (2) (1993) 166.
- [10] A. Hössinger, S. Selberherr, M. Kimura, I. Nomachi, S. Kusanagi, Electrochem. Soc. Proc. 99-2 (1999) 18.
- [11] D. Li, G. Wang, Y. Chen, L. Lin, G. Shrivastav, S. Oak, A. Tasch, S. Banerjee, S. Obradovich, Nucl. Instr. and Meth. B 184 (2001) 500.
- [12] A. Hössinger, S. Selberherr, in: Proceedings of 2nd International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, 1999.

linearity is expected due to network limitations if the number of processes grows too much.

Replication method allows a reduction in calculation time, but the assumption of the unconditional replication generates an error which is expected to be avoided with the new conditional replication method which is being studied.

## References

- [1] J.. Hernández-Mangas, J. Arias, M. Jaraíz, L. Bailón, J. Barbolla. Journal of Applied Physics 91 (2) pp. 658-667 (2002).
- [2] D. Cai, N. Gronbech-Jensen, C.M. Snell, K. Beardmore. Physical Review B 54 (23) pp. 17147-17157 (1996).
- [3] K. Beardmore, N. Gronbech-Jensen. Physical Review E 57 (6) pp. 7278-7287 (1998).
- [4] J.M. Hernández-Mangas, L. Enríquez, J. Arias, M. Jaraíz, L. Bailón. Solid State Electronics 46 pp. 1315-1324 (2002).
- [5] G.H. Kinchin, R.S. Pease. Report on Progress in Physics, Vol: 18, pp. 1-51, 1955.
- [6] J. Lázaro, J.M. Hernández-Mangas, L. Bailón, J. Arias, M. Jaraíz. In Conferencia de Dispositivos Electrónicos, Granada, pp. 121-124, February 2001.
- [7] J.M. Hernández-Mangas, J. Lázaro, L. Enríquez, L. Bailón, J. Barbolla, M. Jaraíz. Nuclear Instruments and Methods B, In press, 2002.
- [8] J.M. Hernández-Mangas, J. Lázaro, M. Jaraíz, J. Barbolla, L. Bailón. In Conferencia de Dispositivos Electrónicos, Calella, 2003.
- [9] G. Wang, S. Tian, M. Morris, B. Obradovic, G. Balamurugan, A. Tasch. SPIE-International Society for Optical Engineering (1997) pp. 324-333.
- [10] J. Dongarra, A. Geist, R. Mancheck, V. Sunderman. Computer in Physics 7 (2) pp. 166-175 (1993).
- [11] D. Li, G. Wang, Y. Chen, L. Lin, G. Shrivastav, S. Oak, A. Tasch, S. Banerjee, and S. Obradovic. Nuclear Instruments and Methods B. 184:500-508, 2001.
- [12] UT-MARLOWE 5.0 User's guide. <http://homer.mer.utexas.edu/TCAD/utmarlowe/>, 1999.





#### **B.4. Dose division algorithm: improvements of damage accumulation on ion implant simulators**

En la siguiente página se reproduce el artículo con este nombre, que al igual que el mostrado en la sección B.3, fue publicado en el libro de actas de la “Conferencia de Dispositivos Electrónicos”, celebrada en Calella (Barcelona) en el mes de febrero de 2003.

# Dose division algorithm: improvements of damage accumulation on ion implant simulators

J.M. Hernández-Mangas, J. Lázaro, M. Jaraíz, J. Barbolla, L. Bailón

Dpto. Electricidad y Electrónica, E.T.S.I. Telecomunicación, C.P.: 47011, Universidad de Valladolid

## 1. Abstract

To obtain statistical accuracy at low concentration zones, when simulating high dose ion implantations, we need to solve the trajectories of a large number of implanted ions. It means that the total simulation time is also huge. In order to reduce this time and improve the statistical accuracy of damage and concentration simulated profiles we have developed a dose division algorithm in both 1D and 3D cases.

## 2. Introduction

Ion implantation is one of the most important methods employed for selective doping of semiconductors. The prediction of impurity distributions obtained in ion implantations is feasible using computer simulation, avoiding expensive experiments. We use a Monte Carlo approach based on the Binary Collision Approximation [1].

The main goals of a ion implantation simulator must be to be predictive in a wide range of implant conditions (energy, dose, orientation, etc.) and atom species implanted [2], and, to give a three-dimensional view of the experiment simulated. The drawback of the Monte Carlo simulators is the large number of ion trajectories necessary to be simulated to obtain statistical accuracy. In a three dimensional case this number of trajectories grows geometrically with the dimensions of the target crystal and the calculation time becomes unpractical.

As a solution to improve the statistical accuracy of the concentration profiles obtained by the simulator and to reduce the total calculation time when simulating high dose implantations, we present a dose division algorithm that works in both 1D and 3D cases.

## 2. One dimensional model

The damage accumulation model used in our simulator code (IIS: Ion Implantation Simulator [1,2]) is based on the modified Kinchin-Pease model [1-3]. It means that

the number of defects generated,  $n$ , depends on the elastic energy,  $E$ , transferred to the lattice:  $n=kE/(2E_d)$ , where  $k=0.8$  is a constant and  $E_d$  is the displacement energy of an atom from its lattice site. A certain number of which will recombine. Each trajectory simulated represents a fraction of the total dose simulated. As the simulation of trajectories is a statistical process we obtain, finally, some probable zones in the concentration profiles and some others less probable.

In order to avoid the statistical noise in the low concentration doping zones an automatic noise reduction mechanism based on dose division has been developed. The total number of ions simulated is  $M_T$ . We simulate  $m$  stages of  $M$  ions ( $M_T = m M$ ). At each stage, each simulated ion represents a different dose fraction. The first  $M$  ions represent a very low dose fraction (e.g.  $10^{12}$  at/cm<sup>2</sup>). We achieve statistical accuracy in the lower concentration doping zone of the final profile due to the low damage generated and the channeling phenomena. Next  $M$  ions represent a higher dose fraction (e.g. ten times more than the previous one) and they are implanted taking into account the previous damage. We obtain statistical accuracy in the middle concentration zones of the final profile due to a higher damage and a lower channeling phenomena. We repeat this algorithm  $m-1$  times. Last  $M$  ions represent the remainder dose fraction and are also simulated.

With this algorithm, we describe with enough statistical accuracy the whole doping concentration range of the final profile [4].

Figure 1 shows a 2000 eV boron into silicon <100> implantation with 0 degrees tilt and 0 degrees rotation with a dose of  $10^{16}$  cm<sup>-2</sup>. The thin continuous line is the concentration profile obtained simulating 2000 trajectories without using the dose division algorithm. We can see the statistical noise at the tail of the profile. The dashed line is obtained simulating ten times more ions and shows a better representation of the tail. The thick line is obtained using the dose division algorithm with only 2000 ions simulated.

## Apéndice C

### Congresos

En los congresos citados a continuación se ha presentado parte del trabajo que se ha ido realizando a lo largo del proyecto.

- 3<sup>a</sup> Conferencia de Dispositivos Electrónicos (*CDE-2001*)  
Celebrada en febrero de 2001 en Granada. Se presentó el trabajo “Cumulative damage model in atomistic ion implant simulation” mediante una presentación oral.
- 6<sup>th</sup> International Conference on computer Simulation of Radiation Effects in Solids (*COSIRES*)  
Celebrada en Dresde (Alemania) en junio de 2002. Se presentó un póster (mostrado en la página 128) con el trabajo “Statistical 3D damage accumulation model for ion implant simulators”.
- 13<sup>th</sup> International Conference on Ion Beam Modification of Materials (*IBMM 2002*)  
Celebrado en Kobe (Japón) en septiembre de 2002. El trabajo “Fast 3D high dose ion implant simulation in compound semiconductors” fue aceptado para la presentación de un póster, aunque no se pudo asistir. El abstract enviado se muestra en la página 130
- 4<sup>a</sup> Conferencia de Dispositivos Electrónicos (*CDE 2003*)  
Se celebró en Calella (Barcelona) en el mes de febrero de 2003, y se presentaron los siguientes pósters:
  - “Parallelization of a statistical 3D damage accumulation model for ion implant simulation”  
El póster se muestra en la página 132.
  - “Dose division algorithm: improvements of damage accumulation on ion implant simulators”  
El póster se muestra en la página 136.



## C.2. 13<sup>th</sup> International Conference on Ion Beam Modification of Materials (*IBMM*)

Se envió el trabajo “Fast 3D high dose ion implant simulation in compound semiconductors”. Dicho trabajo fue aceptado para la presentación de un póster, aunque no se pudo asistir. Este congreso se celebró en Kobe (Japón) en septiembre de 2002. El abstract se muestra en la siguiente página.

## FAST 3D HIGH DOSE ION IMPLANT SIMULATION IN COMPOUND SEMICONDUCTORS

J.M. Hernández-Mangas, J. Lázaro, L.A. Marqués, L. Bailón, M. Jaraíz, J. Barbolla

University of Valladolid, Dpto. Electrónica, Valladolid, Spain

A faster and improved version of Ion Implant Simulation into Semiconductors (IISS) code is presented. It includes an electronic stopping model with only one fitting parameter and uses a 3D target electron density. It implements a new 3D statistical damage accumulation model based on the modified Kinchin-Pease formula. To improve the calculation time we have developed several strategies: a statistical noise reduction mechanism based on dose division, an ion replication model and a full parallelization of the code that practically let us to multiply the performance by the number of processors employed. These improvements have been used to simulate high dose implants into several compound semiconductors. Contrasts with experimental SIMS profiles are provided.

Number of the related conference topic: 1

Publication in the conference proceedings is intended: yes

Corresponding author name and address:

Dr. J.M. Hernández-Mangas

University of Valladolid, Dpto. Electrónica, E.T.S.I. Telecomunicación, 47011, Valladolid, Spain

e-mail: [jesus.hernandez.mangas@tel.uva.es](mailto:jesus.hernandez.mangas@tel.uva.es)

## Apéndice D

# Código fuente

En este capítulo se recoge el código fuente de los archivos relativos al modelo de acumulación de dañado implementado. Están programados en lenguaje C++, y en la sección D.1 se muestran los archivos de cabecera y de funciones de la versión unidimensional, y en la sección D.2 los archivos correspondientes a la versión tridimensional.

### D.1. Modelo unidimensional

#### D.1.1. Archivo de cabecera de la versión 1D

El archivo de cabecera de la versión unidimensional es `amorf.h`, que se reproduce a continuación:

```
////////////////////////////////////
//
//  AMORF.H
//  Modified Kinchin-Pease model for Damage Accumulation
//
////////////////////////////////////
#ifndef _INCLUDE_AMORF_H_
#define _INCLUDE_AMORF_H_

#include "varhst.h"
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <fstream.h>
#include <string.h>
#include <stdlib.h>

extern char DIRECTORY[ ];

class clase_Amorfizacion {
private:
#ifdef FAST_KP
    double KK3;
#else
    double KK, KK2;
```

```

#endif
public:
    VarHst DefectDensity;      // The positions are in (A)
#ifdef FAST_KP
    VarHst E_Acc;
#else
    VarHst AA, BB;
#endif
    double Area;               // (A^2)
    double CutOffEnergy;       // Energia de corte por unidad de volumen (eV/A^3)
    double DisplacementEnergy; // Energia de desplazamiento (eV)
    double frec;               // Surviving recombination factor
    double k;                   // Kinchin-Pease constant
    double Na;                  // Amorphization density (defects/A^3)

    int LevelOfSimulation;
    int NNN;

#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
    double ETOTAL;
    ofstream OO;
#endif

    // Constructor -----
    clase_Amorfizacion();

    // Init -----
    void Init( double Dose, double IA, int LS,
               double RecombinationFactor, double KinchinPeaseConstant,
               double Na_, double COE, double DE=15.0,
               int MultipleImplant=0, char PreviousDamageFile[\\:]="" );

    // Damage accumulation -----
    void DamageAccumulation
        ( double posx, double energia, char tipo, double Weigth );

    // Update defect density -----
    void UpdateDefectDensity();

    // Damage accumulation. Sequential version -----
    void SeqDamageAccumulation
        ( double posx, double energia, char tipo='I', double Weigth=1.0 );

    // Write amorphization histogram -----
    void WriteAmorfizacion();

    // SUMA Energia -----
#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
    void Suma(double X, double Y, double Z, double Energy,
              char C[2], double Weigth=1);
#endif

    // Destructor -----
    ~clase_Amorfizacion();
}; #endif //_INCLUDE_AMORF_H_
// -----

```



### D.1.2. Archivo de funciones de la versión 1D

El archivo de funciones de la versión unidimensional `amorf.cpp` del modelo de dañado se muestra a continuación:

```

////////////////////////////////////
//
//  AMORF.CPP
//  Modified Kinchin-Pease model for Damage Accumulation
//
////////////////////////////////////
#include "amorf.h"

//  Constructor -----
class_Amorfizacion::class_Amorfizacion()
{
    DefectDensity.Set();
    DefectDensity.Clear();
#ifdef FAST_KP
    E_Acc.Set(); E_Acc.Clear(0.0);
#else
    AA.Set();   AA.Clear(1.0);
    BB.Set();   BB.Clear(0.0);
#endif
    k    = 0.8;           // Kinchin-Pease constant
    frec = 0.06;          // Surviving recombination factor
    Na   = 0.0049968;     // Amorphization density (for Si)
    NNN  = 0;             // Number of damage accumulation operations

#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
    ETOTAL = 0.0;
    OO.open("Energia_Depositada");
#endif
}

// Init -----
void class_Amorfizacion::Init( double Dose, double IA, int LS,
    double RecombinationFactor, double KinchinPeaseConstant,
    double Na_, double COE, double DE,
    int MultipleImplant, char PreviousDamageFile[ ] )
{
    ifstream In;
    double depth, percentage;

    frec          = RecombinationFactor;
    k              = KinchinPeaseConstant;
    Na             = Na_;
    CutOffEnergy   = COE;
    LevelOfSimulation = LS;
    DisplacementEnergy= DE;

    Area = IA;                                     // (A^2)
#ifdef FAST_KP
    KK3  = k/(2*DisplacementEnergy) * frec;
#else
    KK2  = k/(2*DisplacementEnergy) * frec/ Area;
    KK   = KK2/Na;

```

```

#endif
// Multiple implant inicialization -----
if( MultipleImplant==0 )
{
#ifdef FAST_KP
    E_Acc.Clear(0.0);
#else
    AA.Clear(1.0);
    BB.Clear(0.0);
#endif
}
// Read previous damage if exists -----
if ( strlen(PreviousDamageFile)!=0 )
{
    PreviousDamageFile[strlen(PreviousDamageFile)-1]=0;
    In.open( PreviousDamageFile );
    if(In == NULL)
    {
        cerr << "# I can't open ("<<PreviousDamageFile<<")\n";
        exit(1);
    }
    cout << "# Reading ("<<PreviousDamageFile<<")\n";
    int i=0; char C;
    In >> C
        >> DefectDensity.mPrimero
        >> DefectDensity.mUltimo
        >> DefectDensity.mAncho;
    for(i=0; i<N_BINS; i++)
        In >> depth >> DefectDensity.M[i] >> percentage;
    In.close();
#ifdef FAST_KP
    E_Acc.mPrimero=DefectDensity.mPrimero;
    E_Acc.mUltimo =DefectDensity.mUltimo;
    E_Acc.mAncho  =DefectDensity.mAncho;
#else
    AA.mPrimero=DefectDensity.mPrimero;
    AA.mUltimo =DefectDensity.mUltimo;
    AA.mAncho  =DefectDensity.mAncho;
    BB.mPrimero=DefectDensity.mPrimero;
    BB.mUltimo =DefectDensity.mUltimo;
    BB.mAncho  =DefectDensity.mAncho;
#endif
}
}

// Damage accumulation -----
#ifdef FAST_KP
void clase_Amorfizacion::DamageAccumulation
( double posx, double energia, char tipo, double Weigth )
{
    int l;
    l = E_Acc.GetIndex( posx );
    double Dens_energia = energia/E_Acc.mAncho;
    if(l>=0)
    {
        if(LevelOfSimulation==1)
        { // Simple case. Follow only the primary ion =====
            if(Dens_energia>CutOffEnergy*Area)

```

```

        energia = CutOffEnergy*Area*E_Acc.mAncho;
    }
    else
    { // Complex case. Complete cascade =====
        if(tipo=='B') energia=DisplacementEnergy*Weigth;
    }
    E_Acc.M[l] = E_Acc.M[l] + energia;
}
};

#else
void clase_Amorfizacion::DamageAccumulation
    ( double posx, double energia, char tipo ,double Weigth )
{
    int l;
    l = AA.GetIndex( posx );
    l = BB.GetIndex( posx );
    if(l>=0)
    {
        energia=energia/AA.mAncho;
        if(LevelOfSimulation==1)
        { // Simple case. Follow only the primary ion =====
            if(energia>CutOffEnergy*Area)
                energia = CutOffEnergy*Area;
        }
        else
        { // Complex case. Complete cascade =====
            if(tipo=='B') energia=DisplacementEnergy*Weigth/AA.mAncho;
        }
        AA.M[l]=AA.M[l]*(1-KK*energia);
        BB.M[l]=BB.M[l]*(1-KK*energia)+ KK2*energia;
    }
}
#endif

// Update defect density -----
#ifdef FAST_KP
void clase_Amorfizacion::UpdateDefectDensity()
{
    int l;
    DefectDensity.ReScale(0.0,E_Acc.mUltimo);
    double K = KK3/Area/DefectDensity.mAncho;
    for(l=0;l<N_BINS;l++)
    {
        DefectDensity.M[l] = DefectDensity.M[l]
            + K*E_Acc.M[l]*( 1 - DefectDensity.M[l]/Na );
        E_Acc.M[l]=0.0;
    }
    if(NNN%100==0) WriteAmorfizacion();
    NNN++;
}
#else
void clase_Amorfizacion::UpdateDefectDensity()
{
    int l;
    DefectDensity.ReScale(0.0,AA.mUltimo);
    for(l=0;l<N_BINS;l++)
    {

```

```

        DefectDensity.M[l] = AA.M[l]*DefectDensity.M[l] + BB.M[l];
        AA.M[l] = 1.0;
        BB.M[l] = 0.0;
    }
    if(NNN%100==0) WriteAmorfizacion();
    NNN++;
}
#endif

// Damage accumulation. Sequential version -----
void clase_Amorfizacion::SeqDamageAccumulation
    ( double posx, double energia, char tipo ,double Weigth )
{
    double delta_n, n, volume;

    int l=DefectDensity.GetIndex(posx);
    if(l>=0)
    {
        volume = Area*DefectDensity.mAncho;
        if(LevelOfSimulation==1)
        { if( energia > CutOffEnergy*volume ) energia = CutOffEnergy*volume; }
        else
        { if( tipo=='B')                energia = DisplacementEnergy*Weigth; }
        n = k * energia/( 2*DisplacementEnergy );

    if(delta_n/volume + DefectDensity.M[l]>Na) {
        cerr << "Error delta_n= " << delta_n << endl;
        cerr << " n = " << n <<endl;
        cerr << " DD = " << DefectDensity.M[l] << endl;
        cerr << " Na = " << Na << endl;
        cerr << " Volume = " << volume << endl;

        exit(-1);
    };

    if(delta_n<0) {
        cerr << "Error delta_n= " << delta_n << endl;
        cerr << " n = " << n <<endl;
        cerr << " DD = " << DefectDensity.M[l] << endl;
        cerr << " Na = " << Na << endl;

        exit(-1);
    };

        DefectDensity.M[l]
            = DefectDensity.M[l]+delta_n/volume;
    }
    if(NNN%10000==0) WriteAmorfizacion();
    NNN++;
}

// Write amorphization histogram -----
void clase_Amorfizacion::WriteAmorfizacion()
{
    ofstream Out;
    int m;

```

```

char F[300];
sprintf(F, "%s/Amorph.hst", DIRECTORY );
Out.open(F);
if(!Out) { cerr << "# I can't write in " << F << endl; exit(1); };
Out << "# " << DefectDensity.mPrimero <<
      " " << DefectDensity.mUltimo <<
      " " << DefectDensity.mAncho << endl;
for(m=0; m<N_BINS; m++)
{
    Out << m*DefectDensity.mAncho/10 << " " // (nm)
    << DefectDensity.M[m] << " " // (defects/A^3)
    << DefectDensity.M[m]*100/Na << endl; // percentage
}
Out.close();
}

// SUMA Energia -----
#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
void clase_Amorfizacion::Suma(double X, double Y, double Z, double Energy,
                             char C[2], double Weigth)
{
    // Para comprobar la Energia total depositada es necesario activar
    // LevelOfSimulation = 0 para que simule cascadas completas. La
    // energia total obtenida debe coincidir con el producto del numero
    // de iones simulados por la energua inicial de los iones.
    //
    // R -> Energia restante. La que le queda al proyectil cuando dejamos de seguirlo
    // F -> Vuelo libre (perdida electronica)
    // Q -> Perdidas inelasticas durante una colision (electronica mas inelastica)
    // B -> Perdidas nucleares cuando el atomo se va a convertir en proyectil
    // I -> Perdidas nucleares transferidas a un atomo
    if(strcmp(C,"B")==0) ETOTAL = ETOTAL + DisplacementEnergy*Weigth;
    else ETOTAL = ETOTAL + Energy;
    OO << X << " " << Y << " " << Z << " " << Energy << " " << C << endl;
};
#endif

// Destructor -----
clase_Amorfizacion::~clase_Amorfizacion()
{
#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
    cout << "##### Energia total = " << ETOTAL << endl;
#endif
    WriteAmorfizacion();
}

clase_Amorfizacion Amorfizacion;

// -----

```

## D.2. Modelo tridimensional

### D.2.1. Archivo de cabecera de la versión 3D

El archivo de cabecera de la versión tridimensional es `amorf3d.h`, que se reproduce íntegramente a continuación:

```

////////////////////////////////////
//
//  AMORF3D.H
//  Modified Kinchin-Pease model for Damage Accumulation
//
////////////////////////////////////
#ifndef _INCLUDE_AMORF_H_
#define _INCLUDE_AMORF_H_

#include "varhst.h"
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <fstream.h>
#include <string.h>
#include <stdlib.h>

extern char DIRECTORY[ ];

class clase_Amorfizacion3D
{
private:
#ifdef FAST_KP
    double KK3;
#else
    double KK, KK2;
#endif
public:
    VarHst3D DefectDensity;      // The positions are in (A)
#ifdef FAST_KP
    VarHst3D E_Acc;
#else
    VarHst3D AA, BB;
#endif
    double Area;                // (A^2)
    double WinA, WinB;          // (A)
    double min_y,max_y,min_z,max_z; // Indexes
    double CutOffEnergy;        // Energia de corte por unidad de volumen (eV/A^3)
    double DisplacementEnergy;   // Energia de desplazamiento (eV)
    double frec;                // Surviving recombination factor
    double k;                   // Kinchin-Pease constant
    double Na;                  // Amorphization density (defects/A^3)

    int LevelOfSimulation;
    int NNN;

#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
    double ETOTAL;
    ofstream OO;
#endif
#endif

```

```

// Constructor -----
clase_Amorfizacion3D();

// Init -----
void Init3D( double Dose, double IA, int LS,
            double RecombinationFactor, double KinchinPeaseConstant,
            double Na_, double COE, double WA, double WB, double DE=15.0,
            int MultipleImplant=0, char PreviousDamageFile[ ]="" );

// Damage accumulation -----
void DamageAccumulation3D
    ( Vector pos, double energia, char tipo, double Weigth );

// Update defect density -----
void UpdateDefectDensity3D(Vector InitPos);

// Damage accumulation. Sequential version -----
void SeqDamageAccumulation3D
    ( Vector pos, double energia,
      char tipo='I',double Weigth=1.0 );

// Write amorphization histogram -----
void WriteAmorfizacion3D(int Opciones);

// SUMA Energia -----
#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
void Suma(double X, double Y, double Z, double Energy,
          char C[2], double Weigth=1);
#endif

// Destructor -----
~clase_Amorfizacion3D();

};
#endif //_INCLUDE_AMORF_H_
// -----

```

### D.2.2. Archivo principal de la versión 3D

El archivo de funciones `amorf3d.cpp` de la versión tridimensional del modelo de dañado tiene el siguiente código:

```

////////////////////////////////////
//
//  AMORF3D.CPP
//  Modified Kinchin-Pease model for Damage Accumulation
//
////////////////////////////////////
#include "amorf3d.h"

// Constructor -----
class_Amorfizacion3D::class_Amorfizacion3D()
{
    DefectDensity.Set3D();
    DefectDensity.Clear3D();
#ifdef FAST_KP
    E_Acc.Set3D(); E_Acc.Clear3D(0.0);
#else
    AA.Set3D();   AA.Clear3D(1.0);
    BB.Set3D();   BB.Clear3D(0.0);
#endif
    k      = 0.8;      // Kinchin-Pease constant
    frec   = 0.06;     // Surviving recombination factor
    Na     = 0.0049968; // Amorphization density (for Si)
    NNN    = 0;        // Number of damage accumulation operations

    min_y = min_z = N_SECTOR;
    max_y = max_z = 0;

#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
    ETOTAL = 0.0;
    OO.open("Energia_Depositada");
#endif
}

// Init -----
void class_Amorfizacion3D::Init3D( double Dose, double IA, int LS,
    double RecombinationFactor, double KinchinPeaseConstant,
    double Na_, double COE, double DE, double WA, double WB,
    int MultipleImplant, char PreviousDamageFile[ ] )
{
    ifstream In;
    double depthx,depthy,depthz, percentage, lado;

    frec          = RecombinationFactor;
    k             = KinchinPeaseConstant;
    Na            = Na_;
    CutOffEnergy   = COE;
    LevelOfSimulation = LS;
    DisplacementEnergy= DE;

    Area = IA; // (A^2)
    lado = sqrt(Area);

```



```

    if(lado > WA) WinA = lado; else WinA = WA;
    if(lado > WB) WinB = lado; else WinB = WB;

    DefectDensity.mExtremoY = lado*(N_SECTOR/2); DefectDensity.mAnchoY = lado;
    DefectDensity.mExtremoZ = lado*(N_SECTOR/2); DefectDensity.mAnchoZ = lado;
#ifdef FAST_KP
    KK3 = k/(2*DisplacementEnergy) * frec;
    E_Acc.mExtremoY = lado*(N_SECTOR/2); E_Acc.mAnchoY = lado;
    E_Acc.mExtremoZ = lado*(N_SECTOR/2); E_Acc.mAnchoZ = lado;
#else
    KK2 = k/(2*DisplacementEnergy) * frec/ Area;
    KK = KK2/Na;
    AA.mExtremoY = lado*(N_SECTOR/2); AA.mAnchoY = lado;
    AA.mExtremoZ = lado*(N_SECTOR/2); AA.mAnchoZ = lado;
    BB.mExtremoY = lado*(N_SECTOR/2); BB.mAnchoY = lado;
    BB.mExtremoZ = lado*(N_SECTOR/2); BB.mAnchoZ = lado;
#endif
    // Multiple implant inicialization -----
    if( MultipleImplant==0 )
    {
#ifdef FAST_KP
        E_Acc.Clear3D(0.0);
#else
        AA.Clear3D(1.0);
        BB.Clear3D(0.0);
#endif
    }
    // Read previous damage if exists -----
    if ( strlen(PreviousDamageFile)!=0 )
    {
        PreviousDamageFile[strlen(PreviousDamageFile)-1]=0;
        In.open( PreviousDamageFile );
        if(In == NULL)
        {
            cerr << "# I can't open ("<<PreviousDamageFile<<")\n";
            exit(1);
        }
        cout << "# Reading ("<<PreviousDamageFile<<")\n";
        int i,j,k;
        while(!In.eof())
        for(i=0;i<N_BINS;i++)
        for(j=0;j<N_SECTOR;j++)
        for(k=0;k<N_SECTOR;k++)
        {
            In >> depthx >> depthy >> depthz
                >> DefectDensity.M[i][j][k] >> percentage;
        }
        DefectDensity.Set3D(0.0,depthx,depthy,depthz);
    }
}

// Damage accumulation -----
#ifdef FAST_KP
void clase_Amorfizacion3D::DamageAccumulation3D
    ( Vector pos, double energia, char tipo, double Weigth )
{
    Vector l;
    l = E_Acc.GetIndex( pos );

```

```

double Dens_energia = energia/DefectDensity.mAncho;
if(l.X>=0)
{
    if(LevelOfSimulation==1)
    { // Simple case. Follow only the primary ion =====
        if(Dens_energia>CutOffEnergy*Area)
            energia = CutOffEnergy*Area*DefectDensity.mAncho;
    }
    else
    { // Complex case. Complete cascade =====
        if(tipo=='B') energia=DisplacementEnergy*Weigth;
    }
    E_Acc.M[(int)l.X][(int)l.Y][(int)l.Z] =
    E_Acc.M[(int)l.X][(int)l.Y][(int)l.Z] + energia;

    if( l.Y > max_y) max_y = l.Y;
    if( l.Z > max_z) max_z = l.Z;
    if( l.Y < min_y) min_y = l.Y;
    if( l.Z < min_z) min_z = l.Z;
}
};

#else
void clase_Amorfizacion3D::DamageAccumulation3D
    ( Vector pos, double energia, char tipo ,double Weigth )
{
    Vector l;
    l = AA.GetIndex( pos );
    l = BB.GetIndex( pos );
    if(l.X>=0)
    {
        energia=energia/AA.mAncho;
        if(LevelOfSimulation==1)
        { // Simple case. Follow only the primary ion =====
            if(energia>CutOffEnergy*Area) energia = CutOffEnergy*Area;
        }
        else
        { // Complex case. Complete cascade =====
            if(tipo=='B') energia=DisplacementEnergy*Weigth/AA.mAncho;
        }
        AA.M[(int)l.X][(int)l.Y][(int)l.Z]=
        AA.M[(int)l.X][(int)l.Y][(int)l.Z]*(1-KK*energia);
        BB.M[(int)l.X][(int)l.Y][(int)l.Z]=
        BB.M[(int)l.X][(int)l.Y][(int)l.Z]*(1-KK*energia)+ KK2*energia;

        if( l.Y > max_y) max_y = l.Y;
        if( l.Z > max_z) max_z = l.Z;
        if( l.Y < min_y) min_y = l.Y;
        if( l.Z < min_z) min_z = l.Z;
    }
}
#endif

// Update defect density -----
#ifdef FAST_KP
void clase_Amorfizacion3D::UpdateDefectDensity3D(Vector InitPos)

```

```

{
    int    jj, kk;
    double y, z;
    int    i, j, k;

    DefectDensity.ReScaleX(0.0, E_Acc.mUltimo);
    double K = KK3/Area/DefectDensity.mAncho;

    double min_InitPosY = -WinA/2-InitPos.Y;
    double max_InitPosY =  WinA/2-InitPos.Y;
    double min_InitPosZ = -WinB/2-InitPos.Z;
    double max_InitPosZ =  WinB/2-InitPos.Z;

//1°.- Barrido por todas las zonas
    y = -E_Acc.mExtremoY;

    for(jj=-N_SECTOR/2; jj<N_SECTOR/2; jj++)
    {
        z = -E_Acc.mExtremoZ;

        for(kk=-N_SECTOR/2; kk<N_SECTOR/2; kk++)
        {
            //2°.- Validacion de la zona (**) Cuidado con los trozos de zona
            if(y>=min_InitPosY && y<=max_InitPosY &&
               z>=min_InitPosZ && z<=max_InitPosZ)
            {
                //3°.- Actualizacion de la densidad de defectos para esa zona
                for(j=0; j<N_SECTOR; j++)
                for(k=0; k<N_SECTOR; k++)
                {
                    int la_j= j+jj;
                    int la_k= k+kk;

                    if(la_j>=min_y && la_j<=max_y && la_k>=min_z && la_k<=max_z )
                    for(i=0; i<N_BINS; i++)
                    {
                        DefectDensity.M[i][j][k] +=
                            K*E_Acc.M[i][la_j][la_k]*( 1 - DefectDensity.M[i][j][k]/Na );
                    }
                }
            }
            z += E_Acc.mAnchoZ;
        }
        y += E_Acc.mAnchoY;
    }
//4°.- Iniciacion de las matrices

    t_real * PP;
    PP = &E_Acc.M[0][0][0];
    for(i=0; i<N_BINS*N_SECTOR*N_SECTOR; i++)
        *PP++=0.0;

    if(NNN%100==0 && NNN!=0) WriteAmorfizacion3D(0);
    NNN++;
}
#else
void clase_Amorfizacion3D::UpdateDefectDensity3D(Vector InitPos)
{

```

```

double y,z;
int jj,kk;
int i,j,k;
DefectDensity.ReScaleX(0.0,AA.mUltimo);
#ifdef DAMAGE3D_FASE1

double min_InitPosY = -WinA/2-InitPos.Y;
double max_InitPosY = WinA/2-InitPos.Y;
double min_InitPosZ = -WinB/2-InitPos.Z;
double max_InitPosZ = WinB/2-InitPos.Z;

//1º.- Barrido por todas las zonas
y = -AA.mExtremoY;
for(jj=-N_SECTOR/2;jj<N_SECTOR/2;jj++)
{
    z = -AA.mExtremoZ;
    for(kk=-N_SECTOR/2;kk<N_SECTOR/2;kk++)
    {
        //2º.- Validacion de la zona (**) Cuidado con los trozos de zona
        if(y>=min_InitPosY && y<=max_InitPosY &&
           z>=min_InitPosZ && z<=max_InitPosZ)
        {
            //3º.- Actualizacion de la densidad de defectos para esa zona
            for(j=0;j<N_SECTOR;j++)
            for(k=0;k<N_SECTOR;k++)
            {
                int la_j= j+jj;
                int la_k= k+kk;
                if(la_j>=min_y && la_j<=max_y && la_k>=min_z && la_k<=max_z )
                for(i=0;i<N_BINS;i++)
                {
                    DefectDensity.M[i][j][k] =
                        AA.M[i][la_j][la_k]*DefectDensity.M[i][j][k]
                        + BB.M[i][la_j][la_k];
                }
            }
        }
        z += AA.mAnchoZ;
    }
    y += AA.mAnchoY;
}

//4º.- Iniciacion de las matrices
for(i=0;i<N_BINS;i++)
for(j=0;j<N_SECTOR;j++)
for(k=0;k<N_SECTOR;k++)
{
    AA.M[i][j][k] = 1.0;
    BB.M[i][j][k] = 0.0;
}
#else
for(i=0;i<N_BINS;i++)
for(j=0;j<N_SECTOR;j++)
for(k=0;k<N_SECTOR;k++)
{
    DefectDensity.M[i][j][k] = AA.M[i][j][k]*DefectDensity.M[i][j][k] + BB.M[i][j][k];
    AA.M[i][j][k] = 1.0;
    BB.M[i][j][k] = 0.0;
}

```

```

#endif
    if(NNN%100==0 && NNN!=0) WriteAmorfizacion3D(0);
    NNN++;
}
#endif

// Damage accumulation. Sequential version -----
void clase_Amorfizacion3D::SeqDamageAccumulation3D
    ( Vector pos, double energia, char tipo ,double Weigth )
{
    double delta_n, n, volume;

    Vector l=DefectDensity.GetIndex(pos);
    if(l.X>=0)
    {
        volume = Area*DefectDensity.mAncho;
        if(LevelOfSimulation==1)
        { if( energia > CutOffEnergy*volume ) energia = CutOffEnergy*volume; }
        else
        { if( tipo=='B')          energia = DisplacementEnergy*Weigth; }
        n = k * energia/( 2*DisplacementEnergy );
        delta_n = n * frec * (1-DefectDensity.M[(int)l.X][(int)l.Y][(int)l.Z]/Na);
        DefectDensity.M[(int)l.X][(int)l.Y][(int)l.Z]
            = DefectDensity.M[(int)l.X][(int)l.Y][(int)l.Z]+delta_n/volume;
    }
    if(NNN%10000==0) WriteAmorfizacion3D(0);
    NNN++;
}

// Write amorphization histogram -----
void clase_Amorfizacion3D::WriteAmorfizacion3D(int Opciones)
{
    FILE * OF;
    int i,j,k;
    char F[300];

    // Output 3D Damage in Binary =====

    sprintf(F, "%s/Target.damage3D.bin", DIRECTORY );
    OF= fopen(F,"wb");
    if(!OF) { cerr << "# I can't write in " << F << endl; exit(1); };

    int auxi;
    double auxf;
    auxi = N_BINS;    fwrite( &auxi, sizeof(int ), 1, OF); // N_X
    auxi = N_SECTOR;  fwrite( &auxi, sizeof(int ), 1, OF); // N_Y
    auxi = N_SECTOR;  fwrite( &auxi, sizeof(int ), 1, OF); // N_Z
    auxf = 0.0;        fwrite( &auxf, sizeof(double), 1, OF); // X
    auxf = N_BINS*DefectDensity.mAncho; fwrite(&auxf,sizeof(double),1,OF);
    auxf = -N_SECTOR/2*DefectDensity.mAnchoY;fwrite(&auxf,sizeof(double),1,OF); // Y
    auxf = N_SECTOR/2*DefectDensity.mAnchoY;fwrite(&auxf,sizeof(double),1,OF);
    auxf = -N_SECTOR/2*DefectDensity.mAnchoZ;fwrite(&auxf,sizeof(double),1,OF); // Z
    auxf = N_SECTOR/2*DefectDensity.mAnchoZ;fwrite(&auxf,sizeof(double),1,OF);

    for(i=0;i<N_BINS;i++)
        for(j=0;j<N_SECTOR;j++)
            for(k=0;k<N_SECTOR;k++)
            {

```

```

        double realTemp = DefectDensity.M[i][j][k]*100/Na;
        fwrite( &realTemp, sizeof(double),1, OF );
    }
    fclose(OF);

    // Output 3D damage file in ASCII =====
    if(Opciones)
    {
        sprintf(F, "%s/Target.damage3D.dat", DIRECTORY );
        OF= fopen(F,"w");
        if(!OF) { cerr << "# I can't write in " << F << endl; exit(1); };
        fprintf(OF,"# 3D damage file %d x %d x %d boxes\n",N_BINS,N_SECTOR,N_SECTOR);
        fprintf(OF,"#      X (nm)      Y(nm)      Z(nm) Defects_density (A^-3) %%Amorphization\n");
        for(i=0;i<N_BINS;i++)
            for(j=0;j<N_SECTOR;j++)
            {
                for(k=0;k<N_SECTOR;k++)
                    fprintf(OF,"%10.2lf %10.2lf %10.2lf %12.2lf %18.2lf\n",
                        i*DefectDensity.mAncho /10,
                        (j-N_SECTOR/2)*DefectDensity.mAnchoY/10,
                        (k-N_SECTOR/2)*DefectDensity.mAnchoZ/10,
                        DefectDensity.M[i][j][k],
                        DefectDensity.M[i][j][k]*100/Na);
                fprintf(OF,"\n");
            };
        fclose(OF);
    }
}

// SUMA Energia -----
#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
void clase_Amorfizacion3D::Suma(double X, double Y, double Z, double Energy,
    char C[2], double Weigth)
{
    // Para comprobar la Energia total depositada es necesario activar
    // LevelOfSimulation = 0 para que simule cascadas completas. La
    // energia total obtenida debe coincidir con el producto del n{\u}mero
    // de iones simulados por la energia inicial de los iones.
    //
    // R -> Energia restante. La que le queda al proyectil cuando dejamos de seguirlo
    // F -> Vuelo libre (perdida electronica)
    // Q -> Perdidas inelasticas durante una colision (electronica mas inelastica)
    // B -> Perdidas nucleares cuando el atomo se va a convertir en proyectil
    // I -> Perdidas nucleares transferidas a un atomo
    if(strcmp(C,"B")==0) ETOTAL = ETOTAL + DisplacementEnergy*Weigth;
    else ETOTAL = ETOTAL + Energy;
    OO << X << " " << Y << " " << Z << " " << Energy << " " << C << endl;
};
#endif

// Destructor -----
clase_Amorfizacion3D::~clase_Amorfizacion3D()
{
#ifdef ENERGIA_DEPOSITADA
    cout << "##### Energia total = " << ETOTAL << endl;
#endif
    WriteAmorfizacion3D(0);
}

```

```
clase_Amorfizacion3D Amorfizacion3D;
```

```
// -----
```





# Bibliografía

- [1] J. D. Plummer, M. D. Deal, and P. B. Griffin. *Silicon VLSI technology*. Prentice Hall, 2000.
- [2] W. R. Runyan and K. E. Bean. *Semiconductor integrated circuit processing technology*. Addison-Wesley, 1990.
- [3] Manual de Usuario. *UT-Marlowe 4.0*.  
<http://homer.mer.utexas.edu/TCAD/utmarlowe/>.
- [4] J. Arias. *Simulación de la implantación iónica en cristales incluyendo baja energía y acumulación de dañado*. PhD thesis, Universidad de Valladolid, 1995.
- [5] J.M. Hernández-Mangas, J. Arias, L. Bailón, M. Jaraíz, and J. Barbolla. Improving the prediction capabilities of binary collision approximation ion implant. *Journal of Applied Physics*, 91(2):658–667, 2002.
- [6] S. M. Sze. *VLSI Technology*. Mcgraw-Hill, 1988.
- [7] Hong Xiao. *Introduction to semiconductor manufacturing technology*. Prentice Hall College, 2000.
- [8] The Evans analytical group. The CEA online tutorial.  
<http://www.cea.com/tutorial.htm>.
- [9] J. M. Hernández-Mangas. *Simulación BCA de la implantación iónica en materiales cristalinos: mejora de los modelos físicos y del tiempo de cálculo*. PhD thesis, Universidad de Valladolid, 2000.
- [10] BDM Federal inc. *Ion beam processing technologies - Sector study*.  
<http://www.dtic.mil/natibo/docs/ibp-2.pdf>, 1996.
- [11] M. T. Robinson. A guide for users - version 15b.  
<http://www.ssd.ornl.gov/Programs/MARLOWE/Marlowe.htm>, 3 2003.

- [12] W. Bohmayr, A. Burenkov, J. Lorenz, H. Ryssel, and S. Serberherr. Monte Carlo simulation of silicon amorphization during ion implantation. *IEEE transactions on computer-aided design of integrated circuits and systems*, 17(12):1236–1243, December 1998.
- [13] S. K. Ghandhi. *VLSI fabrication principles*. John Wiley & sons Inc., 1994.
- [14] G. Wang, S. Tian, M. Morris, B. Obradovich, G. Balamurugan, and A. Tasch. A computationally efficient ion implantation model and its application to multiple implant simulations. *Microelectronic Device Technology, Austin TX, USA, SPIE-Int., Soc. Opt. Eng.*, pages 324–333, 1997.
- [15] Y. Chen, B. Obradovic, M. Morris, G. Wang, G. Balamurugan, D. Li, A. F. Tasch, D. Kamenitsa, W. McCoy, S. Baumann, R. Bleier, D. Sieloff, D. Dyer, and P. Zeitsoff. Monte carlo simulation of heavy species (indium and germanium) ion implantation into silicon, 1999.
- [16] G. Hobler, A. Simionescu, L. Palmethofer, C. Tian, and G. Stingeder. Boron channeling implantations in silicon: modeling of electronic stopping and damage accumulation. *Journal of Applied Physics*, 77(8):3697–3703, April 1995.
- [17] G.H. Kinchin and R.S. Pease. The displacement of atoms in solids by radiation. *Reports on Progress in Physics*, 18:1–51, 1955.
- [18] M.S. Son, J. S. Kwon, J. W. Kand, and H.J. Hwang. Modeling of damage accumulation in binary-collision approximation / monte carlo simulation for ion implantation in silicon. *Journal of Modeling and Simulation of Microsystems*, 1(2):121–130, 1999.
- [19] P. Sigmund. On the number of atoms displaced by implanted ions or energetic recoil atoms. *Applied Physics Letters*, 14:114–117, 1969.
- [20] J. Lázaro, J. M. Hernández-Mangas, L. Bailón, J. Arias, and M. Jaraíz. Cumulative damage model in atomistic ion implant simulation. *Conferencia de Dispositivos Electrónicos*, 2001.
- [21] J. M. Hernández-Mangas, J. Lázaro, M. Jaraíz, J. Barbolla, and L. Bailón. Dose division algorithm: improvements of damage accumulation on ion implant simulators. *Conferencia de Dispositivos Electrónicos*, 2003.
- [22] J. M. Hernández-Mangas, J. Lázaro, L. Enríquez, L. Bailón, J. Barbolla, and M. Jaraíz. Statistical 3d damage accumulation model for ion implant simulators. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 202:138–142, 2003.

- 
- [23] J. Dongarra, A. Geist, R. Mancheck, and V. Sunderman. Integrated PVM framework supports heterogeneous network. *Computer in Physics*, 7(2):166–175, 1993.
- [24] Oak Ridge National Laboratory. PVM library. 1999.
- [25] J. Lázaro, J. M. Hernández-Mangas, M. Jaraíz, and L. Bailón. Parallelization of a statistical 3d damage accumulation model for ion implant simulation. *Conferencia de Dispositivos Electrónicos*, 2003.
- [26] D. Li, G. Wang, Y. Chen, L. Lin, G. Shrivastav, S. Oak, A. Tasch, S. Banerjee, and B. Obradovic. A computationally efficient simulator for three-dimensional monte carlo simulation of ion implantation into complex structures. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 184:500–506, 2001.
- [27] R. D. Goldberg, J. S. Williams, and R. G. Elliman. Amorphization of silicon by elevated temperature ion irradiation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 106:242–247, 1995.
- [28] R. K. Janev, Y. V. Ralchenko, T. Kenmotsu, and K. Hosaka. Unified analytic representation of physical sputtering yield. *Journal of Nuclear Materials*, 290-293:104–106, 2001.
- [29] A. F. Komarov, F. F. Komarov, P. Żukowski, C. Karwat, and A. A. Kamarou. Simulation of two-beam ion implantation in the multilayer and multicomponent targets. *Vacuum*, 63:495–499, 2001.
- [30] S. Tian, S. -H. Yang, S. Morris, K. Parab, A. F. Tasch, D. Kamenitsa, R. Reece, B. Freer, R. B. Simonton, and C. Magee. The effect of dose rate on ion implanted impurity profiles in silicon. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 112:144–147, 1996.
- [31] J. M. Hernández-Mangas. IIS simulation tokens.  
[http://bellota.ele.uva.es/~jesman/Papers/cap\\_tokens.pdf](http://bellota.ele.uva.es/~jesman/Papers/cap_tokens.pdf).