

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE
INGENIEROS DE TELECOMUNICACIÓN



PROYECTO FIN DE CARRERA
INGENIERO DE TELECOMUNICACIÓN

**Calibración de parámetros e
implementación de un sistema de
ayuda para un simulador atomístico
de procesos tecnológicos**

Autor: Luis Miguel Vega Fidalgo

Tutor: Pedro Castrillo Romón

Septiembre 2006

| | |
|---------------|---|
| Título: | Calibración de parámetros e implementación de un sistema de ayuda para un simulador atomístico de procesos tecnológicos |
| Autor: | Luis Miguel Vega Fidalgo |
| Tutor: | Pedro Castrillo Romón |
| Departamento: | Electricidad y Electrónica |

Miembros del tribunal

| | |
|-------------|-------------------------|
| Presidente: | Martín Jaraíz Maldonado |
| Vocal: | Lourdes Pelaz Montes |
| Secretario: | Pedro Castrillo Romón |
| Suplente: | Ruth Pinacho Gómez |

| | |
|-------------------|--|
| Fecha de Lectura: | |
| Calificación: | |

Resumen del proyecto

A lo largo de este proyecto, se ha desarrollado un sistema de ayuda para el simulador atomístico DADOS. Se ha incluido información completa y de gran utilidad, no solamente a nivel de manejo, sino también sobre parámetros físicos e implementación de modelos. Por otro lado, se ha procedido a calibrar algunos parámetros físicos de interés, en particular el umbral de amorfización del silicio.

Abstract

In this thesis, a help system for the atomistic simulator DADOS has been developed. We have included in it full and useful information, not only at user level, but also about physical parameters and model implementation. Also, some interesting physical parameters have been calibrated, particularly, the amorphization threshold in silicon.

Palabras clave

Amorfización, calibración, DADOS, Monte Carlo cinético, simulación de procesos, sistema de ayuda, TCAD, UVAS.

Índice general

| | |
|--|----------|
| 1. Introducción y objetivos | 1 |
| 1.1. Motivación | 1 |
| 1.2. Etapas y metodología empleada | 3 |
| 1.3. Esquema del proyecto | 3 |
| 2. Defectos en semiconductores. Una visión atomística | 5 |
| 2.1. Introducción | 5 |
| 2.2. Defectos puntuales en el silicio | 5 |
| 2.2.1. Estructura cristalina del silicio | 5 |
| 2.2.2. Defectos en el silicio | 6 |
| 2.2.3. Difusión de defectos puntuales | 7 |
| 2.2.4. Generación térmica de intersticiales y vacantes | 9 |
| 2.3. Difusión de dopantes | 15 |
| 2.3.1. Estudio del boro (B) | 16 |
| 2.3.2. Estudio del antimonio (Sb) | 20 |
| 2.3.3. Trampas de intersticiales y vacantes | 21 |
| 2.4. Defectos extendidos | 23 |
| 2.4.1. Clasificación | 23 |
| 2.4.2. Análisis energético en los clusters | 24 |
| 2.4.3. Estabilidad de los clusters | 26 |
| 2.4.4. Acumulación de dañado. Amorphous pockets | 27 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 2.5. | Amorfización por implantación iónica | 28 |
| 2.5.1. | La solución al dañado: el recocido. Recristalización | 29 |
| 2.5.2. | El recocido dinámico | 30 |
| 2.5.3. | Dependencia de la amorfización con la masa iónica | 31 |
| 2.5.4. | Dependencia de la amorfización con la dosis | 31 |
| 2.5.5. | Dependencia de la amorfización con la tasa de implantación | 35 |
| 2.6. | Procesos atomísticos derivados de la implantación | 35 |
| 2.6.1. | Regiones del material | 36 |
| 2.6.2. | El modelo “+1” | 37 |
| 2.6.3. | Ostwald ripening | 37 |
| 2.6.4. | Evolución en el número de intersticiales en 311’s | 37 |
| 2.6.5. | Evolución temporal de la supersaturación | 39 |
| 2.6.6. | Efecto de la no idealidad de la superficie | 39 |
| 2.7. | TED (Transient Enhanced Diffusion) | 41 |
| 2.7.1. | El modelo +n | 41 |
| 2.7.2. | Dependencia de la TED con la dosis | 43 |
| 2.7.3. | Dependencia de la TED con la temperatura | 43 |
| 2.7.4. | Dependencia de la TED con la tasa de implantación | 44 |
| 2.8. | Complejos binarios | 44 |
| 2.8.1. | Clusters y desactivación eléctrica del boro | 45 |
| 2.8.2. | Clusters y desactivación eléctrica del arsénico | 48 |
| 2.8.3. | Difusión y <i>clustering</i> del carbono. Mecanismo de Frank-Turnbull | 49 |
| 2.9. | Conclusiones | 50 |
| 3. | Diseño e implementación de una ayuda para UVAS-DADOS | 51 |
| 3.1. | Introducción | 51 |
| 3.2. | Herramientas utilizadas | 51 |
| 3.2.1. | Microsoft HTML Help Workshop | 52 |

| | |
|---|-----------|
| 3.2.2. Microsoft FrontPage | 53 |
| 3.2.3. Hoja de estilo en cascada | 53 |
| 3.2.4. Microsoft Visual Studio 2005 | 54 |
| 3.3. Organización de la ayuda | 55 |
| 3.4. Comentarios adicionales. Consideraciones de diseño | 55 |
| 3.5. Integración de la ayuda en UVAS | 56 |
| 3.6. Conclusiones | 56 |
| 4. Calibración de parámetros | 57 |
| 4.1. Introducción | 57 |
| 4.2. Test Suite (I): Umbral de amorfización | 57 |
| 4.2.1. Fundamentos teóricos | 57 |
| 4.2.2. Descripción del script | 58 |
| 4.2.3. Resultados | 59 |
| 4.3. Test Suite (II): Implantación de arsénico | 61 |
| 4.3.1. Descripción del script | 61 |
| 4.3.2. Problemas encontrados | 62 |
| 4.3.3. Ajuste del tamaño de la caja | 62 |
| 4.4. Test Suite (III): <i>Spike</i> de boro | 62 |
| 4.4.1. Descripción del script | 63 |
| 4.4.2. Resultados. Ajuste del tamaño de la caja | 64 |
| 4.5. Calibración del umbral de amorfización | 65 |
| 4.5.1. Metodología | 66 |
| 4.5.2. Descripción de los scripts | 67 |
| 4.5.3. Resultados | 68 |
| 4.6. Conclusiones | 71 |
| 5. Conclusiones | 73 |

| | |
|---|-----------|
| 5.1. Conclusiones del proyecto | 73 |
| 5.2. Líneas futuras | 73 |
| A. UVAS Help (I): General information | 79 |
| A.1. General information | 79 |
| A.2. How to install and run UVAS | 79 |
| A.3. UVAS overview | 80 |
| A.4. Properties and options | 80 |
| A.4.1. File | 81 |
| A.4.2. Data Browser | 81 |
| A.4.3. Script Wizard | 82 |
| B. UVAS Help (II): Creating and running a simulation | 85 |
| B.1. Creating a script | 85 |
| B.2. UVAS commands | 85 |
| B.2.1. CreateDADOS | 86 |
| B.2.2. Anneal | 87 |
| B.2.3. Apply_Strain_Profile [TO BE DEVELOPED] | 89 |
| B.2.4. Implant | 90 |
| B.2.5. Implant_Read_Profile | 91 |
| B.2.6. Input_Data_Series | 92 |
| B.2.7. Load_To_Continue | 93 |
| B.2.8. Open_Graphics | 93 |
| B.2.9. Read_Profile | 93 |
| B.2.10. Run_Next_Simulation | 94 |
| B.2.11. Save_3D_Config [TO BE DEVELOPED] | 94 |
| B.2.12. Save_Output_Plots | 95 |
| B.2.13. Save_Simulation | 95 |

| | |
|--|------------|
| B.2.14. Save_To_Continue [TO BE DEVELOPED] | 95 |
| B.2.15. Set_Ge_Fraction_Profile [TO BE DEVELOPED] | 96 |
| B.2.16. Set_Material | 96 |
| B.2.17. Set_Output_Options | 97 |
| B.2.18. Surface_IV_gen_rec | 99 |
| B.2.19. Take_Snapshot | 99 |
| B.3. Running a script | 100 |
| B.4. Data files | 100 |
| B.4.1. In-plane lattice parameter | 101 |
| B.4.2. DDP file (I): One variable dependance. Binding energies | 101 |
| B.4.3. DDP file (II): One variable dependance. Amorphous pocket energies | 102 |
| B.4.4. DDP file (III): Two variables dependance | 102 |
| B.4.5. DA2IN files | 102 |
| C. UVAS Help (III): Particles and defects | 105 |
| C.1. Particles | 105 |
| C.2. Defects | 105 |
| C.2.1. Amorphous | 107 |
| C.2.2. AmorphousPockets | 108 |
| C.2.3. Complex | 110 |
| C.2.4. DLoops | 112 |
| C.2.5. I311 | 113 |
| C.2.6. Platelet [TO BE DEVELOPED] | 114 |
| C.2.7. PointD | 115 |
| C.2.8. SiInterface | 116 |
| C.2.9. SuperSat | 118 |
| C.2.10. Voids | 118 |

| | |
|--|------------|
| D. UVAS Help (IV): Viewing results | 121 |
| D.1. Data structure | 121 |
| D.2. Extracting and viewing results | 123 |
| D.2.1. Text mode | 124 |
| D.2.2. Graphic mode | 124 |
| D.2.3. Transferring data into a file | 125 |
| D.3. 2D Graphs | 125 |
| D.4. 3D Graphs | 127 |
| D.5. Plotting data | 129 |
| D.5.1. Plotting the number of electrons or holes versus depth | 130 |
| D.5.2. Plotting the concentration of an immobile type of particle versus depth | 131 |
| D.5.3. Plotting the concentration of a mobile type of particle versus depth | 132 |
| D.5.4. Plotting the concentration of a type of particle versus time | 133 |
| D.5.5. Plotting the concentration of a type of particle versus temperature | 133 |
| D.5.6. Plotting the atomic configuration | 134 |
| D.5.7. Plotting only some structures from the atomic configuration | 136 |
| D.5.8. Viewing the evolution in different times | 136 |
| D.5.9. Plotting amorphous pockets histograms (I): I+V or min(I,V) | 137 |
| D.5.10. Plotting amorphous pockets histograms (II): I and V contained | 138 |
| D.5.11. Plotting binary complex maps | 140 |
| D.5.12. Plotting a particular binary complex versus time | 140 |
| D.5.13. Plotting dopants histograms | 141 |
| D.5.14. Plotting more than one graph in the same draw area | 142 |
| | |
| E. UVAS Help (V): Input physical parameters | 145 |
| E.1. Input physical parameters | 145 |
| E.2. DDP file | 145 |
| E.2.1. dados.ddp | 145 |

| | |
|--|-----|
| E.3. Global options | 160 |
| E.3.1. randomSeed | 160 |
| E.3.2. BitsBoxes | 161 |
| E.3.3. ChargeVarPercent | 161 |
| E.3.4. InitOutputTime | 161 |
| E.3.5. DebugFlag | 161 |
| E.3.6. T-ramps: dTBase, nInit, dTLimit | 162 |
| E.4. Thermal generation | 162 |
| E.4.1. Eform_? | 162 |
| E.4.2. C0relEq_? | 163 |
| E.5. Point defects migration | 165 |
| E.5.1. Dm_? | 165 |
| E.5.2. Em_? | 166 |
| E.6. Point defects binding | 166 |
| E.6.1. Db_? | 166 |
| E.6.2. Eb_? | 167 |
| E.7. Electronic levels | 168 |
| E.7.1. e_?0 | 168 |
| E.8. Band gap | 169 |
| E.8.1. Eg0 | 169 |
| E.8.2. Agap | 170 |
| E.8.3. Bgap | 170 |
| E.8.4. Nc300 | 171 |
| E.8.5. Nv300 | 171 |
| E.8.6. expNc | 172 |
| E.8.7. expNv | 172 |
| E.8.8. A??1_? | 173 |

| | |
|--|-----|
| E.9. Amorphization and recrystallization | 174 |
| E.9.1. V0recryst | 174 |
| E.9.2. Erecryst | 174 |
| E.9.3. recrystDepositProb_? | 174 |
| E.9.4. recrystMaxActive_? | 175 |
| E.9.5. maxDepositedCxSize_? | 176 |
| E.9.6. inRelDamChange | 176 |
| E.9.7. AmorphizationThreshold | 177 |
| E.9.8. MaxIVStorage | 177 |
| E.9.9. LatticeCollapse_nm3 | 178 |
| E.9.10. ExponentAmorphousPocket | 178 |
| E.9.11. D0AmorphousPocket | 179 |
| E.9.12. Eb_AmorphousPocket | 179 |
| E.9.13. Clusters | 179 |
| E.9.14. Eb_SmallestCluster ? | 180 |
| E.9.15. Eb_LargeCluster ? | 181 |
| E.9.16. exponent_Cluster ? | 181 |
| E.9.17. Eb_Cluster ? | 182 |
| E.10. I311 | 183 |
| E.10.1. MIN311SIZE | 183 |
| E.10.2. size0_Clusterto311 | 183 |
| E.10.3. EClusterto311 | 184 |
| E.11. Dislocation loops | 184 |
| E.11.1. size0_311toDLoop | 184 |
| E.11.2. E311toDLoop | 185 |
| E.11.3. R0_311toDL | 185 |
| E.11.4. Ebar0_311ToDL | 186 |

| | |
|--|-----|
| E.11.5. Ebar1_311ToDL | 186 |
| E.11.6. expo_311ToDL | 187 |
| E.11.7. D0DLoopProp | 187 |
| E.11.8. gamma | 188 |
| E.11.9. mu | 188 |
| E.11.10nu | 188 |
| E.11.11burgVectMod | 189 |
| E.12. Platelets | 189 |
| E.12.1. D0PlateletProp | 189 |
| E.13. Voids | 189 |
| E.13.1. size0_ClustertoVoids | 190 |
| E.13.2. EClustertoVoids | 191 |
| E.14. Complexes | 191 |
| E.14.1. D0F_ComplexProp ?? | 191 |
| E.14.2. Etotal_Complex ?? | 192 |
| E.14.3. EbarrierB_Complex ?? | 193 |
| E.14.4. EbarrierF_Complex ?? | 194 |
| E.15. Interfaces | 194 |
| E.15.1. Csol0_? | 194 |
| E.15.2. Esol_? | 195 |
| E.15.3. Surf_h0_? | 196 |
| E.15.4. Surf_Eh_? | 197 |
| E.15.5. Surf_e_a0_? | 198 |
| E.15.6. Surf_Ee_a_? | 198 |
| E.15.7. SurfMaxTrap_? | 199 |
| E.15.8. Segreg_pref_? | 200 |
| E.15.9. Segreg_eV_? | 200 |

| | |
|--|------------|
| E.15.10RecLnm_? | 201 |
| E.15.11SuperSat_? | 202 |
| F. UVAS Help (VI): Physical magnitudes | 203 |
| F.1. Break-up of charged impurity-"native defect" pairs | 203 |
| F.1.1. Boron | 203 |
| F.1.2. Long-hop distance | 204 |
| F.2. Concentration ratio of charged species | 205 |
| F.3. Equilibrium concentrations | 205 |
| F.3.1. Diffusivities | 206 |
| F.3.2. Direct diffusivity of single impurities | 206 |
| F.3.3. Effective diffusivity of native defect | 206 |
| F.3.4. Silicon self-diffusion | 207 |
| F.3.5. Effective diffusivity of dopants | 207 |
| F.4. Electric drift | 209 |
| F.5. Carriers and Fermi levels | 209 |
| F.6. Formation energies for charged species | 210 |
| F.7. Intrinsic carrier concentration and intrinsic level | 211 |
| F.8. Probabilities and charge states | 212 |
| F.9. Recombination length | 212 |
| F.10. Sheet resistance | 213 |
| F.11. Solubility | 214 |
| F.11.1. Solubility dependence on Fermi level | 214 |
| F.12. Supersaturation | 215 |
| F.13. List of symbols | 216 |
| G. UVAS Help (VII): DADOS mechanisms | 217 |
| G.1. Amorphous implementation | 217 |

| | |
|---|-----|
| G.1.1. Amorphization | 217 |
| G.1.2. Recrystallization | 218 |
| G.2. Amorphous pocket implementation | 219 |
| G.2.1. Emission | 219 |
| G.2.2. Growth | 220 |
| G.2.3. Shrinkage | 220 |
| G.3. Charge model implementation | 221 |
| G.3.1. Band gap narrowing | 222 |
| G.3.2. Charge attractions and repulsions | 223 |
| G.3.3. Charge update | 223 |
| G.3.4. Electric drift implementation | 224 |
| G.3.5. Fermi level calculation | 224 |
| G.3.6. Smoothing the dopant distribution | 225 |
| G.3.7. Temperature dependance of band structure | 226 |
| G.4. Cluster implementation | 227 |
| G.4.1. Emission | 227 |
| G.4.2. Growth | 228 |
| G.4.3. Binding energy | 228 |
| G.4.4. Shrinkage | 230 |
| G.5. Complex implementation | 230 |
| G.5.1. Back particle emission | 230 |
| G.5.2. Front particle emission | 231 |
| G.5.3. Back particle capture | 234 |
| G.5.4. Front particle capture | 235 |
| G.5.5. Shrinkage | 237 |
| G.5.6. Complementary emission | 238 |
| G.5.7. Complementary recombination | 239 |

| | |
|--|-----|
| G.6. Dislocation loops implementation | 240 |
| G.6.1. Emission | 241 |
| G.6.2. Growth | 241 |
| G.6.3. Formation energy | 242 |
| G.6.4. Shrinkage | 242 |
| G.6.5. Complementary emission | 242 |
| G.7. I311 implementation | 242 |
| G.7.1. Emission | 244 |
| G.7.2. Growth | 244 |
| G.7.3. Shrinkage | 245 |
| G.8. Interface implementation | 245 |
| G.8.1. Interface geometry | 245 |
| G.8.2. Native defect recombination length | 245 |
| G.8.3. Native defect generation at the interface | 246 |
| G.8.4. Segregation | 246 |
| G.8.5. Trapping and detrapping | 247 |
| G.8.6. Dopant diffusion at interfaces | 248 |
| G.9. Point defect implementation | 248 |
| G.9.1. Break-up | 248 |
| G.9.2. Captures | 248 |
| G.9.3. Jumps | 249 |
| G.9.4. Pile-up | 249 |
| G.10. Simulation box | 249 |
| G.11. Voids implementation | 250 |
| G.11.1. Emission | 250 |
| G.11.2. Growth | 251 |
| G.11.3. Shrinkage | 251 |

| | |
|--|-----|
| G.12.Extended defect transformations | 251 |
| G.12.1.Amorphous pockets to I311 | 251 |
| G.12.2.Amorphous pockets to voids | 252 |
| G.12.3.I311 to dislocation loops | 253 |

Índice de tablas

| | |
|---|-----|
| 2.1. Energías de migración y formación de intersticiales y vacantes usados en el simulador atómico DADOS (ver apéndice C) | 14 |
| 2.2. Valores del parámetro “+n” para distintos iones [24] | 43 |
| 4.1. Dosis críticas a $T = -170\text{ °C}$ [22] | 67 |
| 4.2. Parámetros de entrada a DADOS | 67 |
| 4.3. Resultados de calibración de umbral de amorfización para el antimonio | 68 |
| 4.4. Resultados de calibración de umbral de amorfización para el fósforo | 68 |
| 4.5. Resultados de calibración de umbral de amorfización para el boro | 69 |
| 4.6. Umbrales de amorfización. Resultados | 70 |
| A.1. UVAS directory | 80 |
| A.2. Symbols used for data in UVAS | 82 |
| B.1. Extensions and particles for Read_Profile command | 94 |
| C.1. Particles in DADOS | 120 |
| D.1. Example of selecting atomic configuration | 136 |
| F.1. List of symbols | 216 |
| G.1. Charged particles in DADOS | 221 |

Índice de figuras

| | |
|---|----|
| 1.1. La ley de Moore [1] | 2 |
| 2.1. Celda unidad del silicio cristalino [4] | 6 |
| 2.2. Algunas configuraciones típicas para los intersticiales: tetraédrica (T) y dumbbell (D) [5] | 7 |
| 2.3. Diagrama energético de la difusión de defectos puntuales | 8 |
| 2.4. Mecanismo de difusión del intersticial entre dos estructuras tetraédricas a través de una dumbbell [5] | 8 |
| 2.5. Representación esquemática de configuraciones para la definición de la energía de formación | 10 |
| 2.6. Esquema energético de la activación del intersticial | 12 |
| 2.7. Esquema del volumen explorado por la vacante | 12 |
| 2.8. Diagrama energético de la generación de un par de Frenkel | 13 |
| 2.9. Difusividad de intersticiales y vacantes | 14 |
| 2.10. Visión esquemática del par dopante-vacante y del par dopante-intersticial | 16 |
| 2.11. Diagrama energético del <i>break-up</i> | 17 |
| 2.12. Difusión del antimonio asistida por vacantes | 21 |
| 2.13. Diagrama energético del antimonio | 22 |
| 2.14. Comparativa entre diagramas energéticos sin y con trampas | 23 |
| 2.15. Defectos extendidos tras una implantación iónica en silicio | 24 |
| 2.16. Diagrama energético asociado a la liberación de un intersticial por un cluster | 25 |
| 2.17. Diagrama energético de la formación de un intersticial libre y en un cluster | 26 |

| | |
|---|----|
| 2.18. Energías de disociación (formación más migración) de los clusters de intersticiales en función del tamaño [10] | 27 |
| 2.19. Energía de barrera para la recombinación de pares IV | 28 |
| 2.20. Perfil de intersticiales y vacantes tras implantar | 29 |
| 2.21. Evolución de una implantación de silicio a 5 keV [16]. Los puntos negros representan intersticiales, los grises oscuros vacantes y los grises claros, pares IV. (a) Dañado tras implantar a temperatura ambiente. (b) Dañado tras recocido a 550°C. (c) Dañado tras recocido a 800°C. | 30 |
| 2.22. Morfología del dañado producido por sendas implantaciones de boro y arsénico [17] | 31 |
| 2.23. Dependencia del dañado con la dosis de implantación a temperatura ambiente [18] | 32 |
| 2.24. Dependencia del dañado con la dosis de implantación a temperatura ambiente para distintos iones [20] | 32 |
| 2.25. Dependencia de la dosis crítica con la energía de implantación [21] | 33 |
| 2.26. Dependencia de la dosis crítica con la temperatura (I) [20] | 34 |
| 2.27. Dependencia de la dosis crítica con la temperatura (II) [22] | 34 |
| 2.28. Temperaturas de transición en función de la tasa de implantación [23] | 35 |
| 2.29. Concentración de intersticiales en función de la profundidad tras la implantación. Se admite una superficie ($x = 0$) de comportamiento ideal | 38 |
| 2.30. Concentración de intersticiales en función del tiempo | 39 |
| 2.31. Supersaturación de intersticiales en función del tiempo | 40 |
| 2.32. Supersaturación de vacantes en función del tiempo | 41 |
| 2.33. Longitud de recombinación | 41 |
| 2.34. Distancia de <i>voids</i> | 42 |
| 2.35. Difusividad relativa en función de la masa del ión implantado [24] | 42 |
| 2.36. Saltos de intersticiales por sitio de red en función de la masa del ión implantado [25] | 43 |
| 2.37. Saltos de intersticiales por sitio de red en función de la temperatura [25] | 44 |
| 2.38. Saltos de intersticiales por sitio de red en función de la tasa de implantación [25] | 44 |
| 2.39. <i>Spike</i> de boro sin implantación | 46 |
| 2.40. <i>Spike</i> de boro con implantación | 46 |
| 2.41. <i>Spikes</i> de boro con implantación tras recocido [26] | 47 |

| | |
|--|----|
| 2.42. <i>Clustering</i> del boro (línea continua) [27] | 48 |
| 2.43. Desactivación eléctrica del arsénico [28] | 49 |
| 2.44. <i>Clustering</i> del carbono [7] | 50 |
| 3.1. Estructura general de una ayuda CHM (ejemplo de Internet Explorer 7) | 52 |
| 4.1. Perfil de intersticiales y vacantes implantado para el umbral de amorfización . . . | 58 |
| 4.2. Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con <code>LatticeCollapse_nm3=40</code> y temperatura 60 °C | 59 |
| 4.3. Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con <code>LatticeCollapse_nm3=40</code> y temperatura -170 °C | 60 |
| 4.4. Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con <code>LatticeCollapse_nm3=2</code> y temperatura -170 °C | 60 |
| 4.5. Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con <code>LatticeCollapse_nm3=10</code> y temperatura -170 °C | 61 |
| 4.6. Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con <code>LatticeCollapse_nm3=60</code> y temperatura -170 °C | 61 |
| 4.7. Implantación de arsénico con <code>randomSeed = 1</code> | 63 |
| 4.8. Implantación de arsénico con <code>randomSeed = 1562</code> | 63 |
| 4.9. Implantación de arsénico con <code>randomSeed = 8654</code> | 64 |
| 4.10. <i>Spike</i> de boro utilizada para la simulación | 64 |
| 4.11. <i>Spike</i> de boro tras la implantación de silicio | 65 |
| 4.12. Concentraciones de boro en distintos estados | 65 |
| 4.13. Dosis crítica para diversos materiales en función de la temperatura [22] | 66 |
| 4.14. Resultados de calibración de umbral de amorfización | 69 |
| 4.15. Dosis crítica para diversos materiales en función de la temperatura [22] y resultados de las simulaciones | 70 |
| A.1. General structure UVAS-DADOS | 79 |
| A.2. Generic window | 81 |
| A.3. File options | 83 |
| A.4. Data Browser options | 83 |

| | |
|---|----|
| A.5. Script Wizard options | 84 |
| B.1. New simulation | 86 |
| B.2. UVAS commands | 87 |
| B.3. CreateDADOS command | 88 |
| B.4. CreateDADOS and Set_Material to create different simulation boxes | 88 |
| B.5. Information shown in the messages window when executed CreateDADOS | 88 |
| B.6. Anneal command | 89 |
| B.7. Constant annealing technique | 89 |
| B.8. Apply_Strain_Profile command | 89 |
| B.9. Information shown in the messages window when executed Implant | 90 |
| B.10. Implant command | 91 |
| B.11. Tilt and rotation | 92 |
| B.12. Mask parameters | 92 |
| B.13. Implant_Read_Profile command | 93 |
| B.14. Input_Data_Series command | 93 |
| B.15. Load_To_Continue command | 93 |
| B.16. Open_Graphics command | 94 |
| B.17. Read_Profile command | 95 |
| B.18. Run_Next_Simulation command | 95 |
| B.19. Save_3D_Config command | 96 |
| B.20. Save_Output_Plots command | 96 |
| B.21. Save_Simulation command | 97 |
| B.22. Save_To_Continue command | 97 |
| B.23. Set_Ge_Fraction_Profile command | 98 |
| B.24. Set_Material command | 98 |
| B.25. Set_Output_Options command | 98 |
| B.26. Surface_IV_gen_rec command | 99 |

| | |
|--|-----|
| B.27. Take_Snapshot command | 99 |
| B.28. Pausing a simulation | 100 |
| B.29. In-plane lattice parameter structure | 101 |
| B.30. DDP file (I): Onv variable dependance. Binding energies structure | 101 |
| B.31. DDP file (II): One variable dependance. Amorphous pockets energies structure | 102 |
| B.32. DDP file (III): Two variables dependance structure | 102 |
| B.33. DA2IN file structure | 103 |
| | |
| C.1. Events in the messages window | 106 |
| | |
| D.1. Snapshots | 121 |
| D.2. UVAS data structure | 123 |
| D.3. Accessing snapshots | 124 |
| D.4. Vectors treatment | 125 |
| D.5. Transferring data into a file | 126 |
| D.6. 2D graph options | 127 |
| D.7. 2D graph | 128 |
| D.8. 3D graph | 128 |
| D.9. XYZ format | 129 |
| D.10. Creating a new 2D graph | 130 |
| D.11. Plotting the number of electrons or holes versus depth | 131 |
| D.12. Plotting the concentration of an immobile type of particle versus depth | 132 |
| D.13. Plotting the concentration of a mobile type of particle versus depth | 133 |
| D.14. Plotting the concentration of a type of particle versus time | 134 |
| D.15. Plotting the concentration of a type of particle versus temperature | 135 |
| D.16. Plotting the atomic configuration (I) | 135 |
| D.17. Plotting the atomic configuration (II) | 136 |
| D.18. Plotting only some structures from the atomic configuration | 137 |
| D.19. Viewing the evolution in different times | 138 |

| | |
|---|-----|
| D.20. Plotting amorphous pockets histograms (I): I+V | 138 |
| D.21. Plotting amorphous pockets histograms (II): I and V contained | 139 |
| D.22. Plotting binary complex maps | 141 |
| D.23. Plotting a particular binary complex versus time | 142 |
| D.24. Plotting dopants histograms | 143 |
| D.25. Plotting more than one graph in the same draw area | 144 |
| | |
| E.1. T-ramps implementation | 162 |
| | |
| F.1. Boron break-up | 203 |
| F.2. Boron energies | 204 |
| F.3. Boron energies | 208 |
| F.4. Electric drift | 209 |
| F.5. Energies for vacancies | 211 |
| F.6. Energies for interstitials | 211 |
| F.7. Recombination length | 213 |
| F.8. Sheet resistance | 213 |
| F.9. Extrinsic solubility | 215 |
| | |
| G.1. Amorphization in DADOS | 217 |
| G.2. Related to amorphization data in the messages window | 218 |
| G.3. Related to amorphization data in the messages window | 219 |
| G.4. Band gap narrowing | 223 |
| G.5. Electric drift implementation | 224 |
| G.6. Debye radius | 225 |
| G.7. Binding energy for cluster growth | 228 |
| G.8. Binding energy for I clusters | 229 |
| G.9. Binding energy for V clusters | 229 |
| G.10. Back particle emission. Associated energies | 231 |

| | |
|--|-----|
| G.11.Front particle emission (I). Associated energies | 233 |
| G.12.Front particle emission (II). Associated energies | 234 |
| G.13.Back particle capture. Associated energies | 235 |
| G.14.Front particle capture (I). Associated energies | 236 |
| G.15.Front particle capture (II). Associated energies | 237 |
| G.16.Shrinkage. Associated energies | 238 |
| G.17.Complementary emission | 239 |
| G.18.Dislocation loop structure implementation | 241 |
| G.19.I311 structure implementation | 243 |
| G.20.I311 hysteresis | 244 |
| G.21.Interface implementation | 245 |
| G.22.Box split data in the messages window | 250 |
| G.23.Amorphous pockets to I311 transformation | 252 |
| G.24.Amorphous pockets to void transformation | 252 |
| G.25.I311 to dislocation loops to void transformation. Transition size model | 253 |
| G.26.I311 to dislocation loops to void transformation. Transition rate model | 254 |

Introducción y objetivos

1.1 Motivación

El mundo de la Ingeniería de Telecomunicación ha ido desde siempre e indudablemente ligado al campo de la Microelectrónica. La invención del transistor en el año 1947 supuso un hito que marcó un antes y un después en el desarrollo de nuevas tecnologías. Atrás quedaron los viejos aparatos de válvulas. Todo era posible con un diminuto dispositivo basado en tecnología de estado sólido.

Sin embargo, la industria microelectrónica no quedó ahí. El desarrollo posterior fue enorme debido, fundamentalmente, a la alta relación rendimiento/coste que tenía, lo cual era un incentivo muy interesante. De hecho, los dispositivos cada vez son más pequeños y contienen más transistores, lo cual les dota de una mayor funcionalidad y capacidad de trabajo. Tradicionalmente, se ha venido considerando una formulación empírica denominada ley de Moore, que expresa que, aproximadamente cada dos años, se duplica el número de transistores en un microprocesador [1]. Esta ley fue formulada por Gordon E. Moore el 19 de abril de 1965, y su cumplimiento se ha podido constatar hasta la actualidad. Más tarde, modificó su propia ley al afirmar que el ritmo bajaría, y la densidad de los datos se doblarían aproximadamente cada 18 meses. Esta progresión de crecimiento exponencial, doblar la capacidad de los microprocesadores cada año y medio, es lo que se considera realmente la ley de Moore. La consecuencia directa de la ley de Moore es que los precios bajan al mismo tiempo que las prestaciones aumentan. En la figura 1.1 se muestra un gráfico representativo de la ley de Moore, comparado con los procesadores populares de la historia reciente.

El desarrollo de *hardware* a nivel microelectrónico es algo complejo que debe realizarse de manera adecuada y precisa. Las grandes empresas y entidades basan sus proyectos en un análisis exhaustivo no solamente de requisitos, sino también de funcionamiento de los dispositivos cada vez más pequeños. Errores en la implementación suponen un elevado coste [1], por lo que se ha buscado desde siempre un alto nivel de seguridad en resultados en el desarrollo de productos. Aquí es donde entra en juego la simulación. Simular el comportamiento de un dispositivo electrónico o de un semiconductor tras realizar procesos tecnológicos es una técnica muy atractiva ya que permite conocer, con un alto grado de fidelidad, el resultado final del proyecto. Sin embargo, las técnicas de simulación no son sencillas y el estudio que se ha llevado a cabo sobre ellas ha supuesto un esfuerzo considerable por parte de empresas y centros de investigación. En adelante

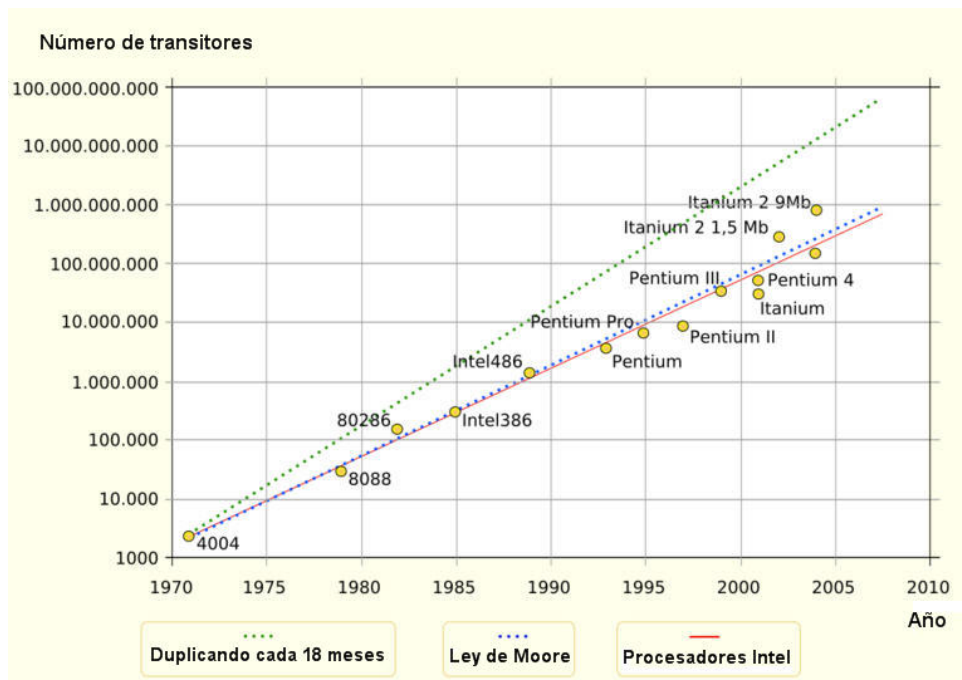


Figura 1.1: La ley de Moore [1]

hablaremos exclusivamente de los simuladores de procesos tecnológicos.

Tradicionalmente, se han utilizado simuladores de carácter continuo. Estas aplicaciones *software* se basan en el modelado de los movimientos de partículas mediante flujos continuos. Se plantean diversas ecuaciones diferenciales que se intentan resolver con métodos numéricos. Sin embargo, a medida que los dispositivos se hacen cada vez más pequeños, las aproximaciones que asumen los simuladores continuos dejan de ser válidas. Es preciso, pues descender hasta el nivel atómico para estudiar las interacciones que tienen lugar entre las partículas.

La dinámica molecular es una teoría interesante puesto que permite estudiar las interacciones atómicas a nivel de fuerzas elementales. Cuando se producen choques, se transfiere energía de unos átomos a otros provocando vibraciones y otra fenomenología de interés [2]. Sin embargo, a pesar de que tiene utilidades evidentes, no es una técnica válida para simular procesos completos puesto que los pasos temporales que utiliza son demasiado cortos, por lo que únicamente se pueden simular breves instantes de tiempo (por debajo del milisegundo).

En la Universidad de Valladolid, se ha desarrollado un simulador atómico basado en los métodos de Monte Carlo (kMC, *kinetic Monte Carlo*, [3]). Su nombre es DADOS (*Diffusion of Atomistic Defects, Object-Oriented Simulator*) y se utiliza en la actualidad como núcleo de un entorno llamado UVAS (*University of Valladolid Atomistic Simulator*). La principal característica de esta aplicación es que no tiene en cuenta los átomos de silicio que están correctamente colocados en la red, sino únicamente se preocupa de los defectos que se producen. Otra idea interesante es que es autoajutable en tiempo, de tal forma que no simula instantes de tiempo donde apenas ocurran eventos. Todo esto hace que sea un simulador muy eficiente desde el punto de vista computacional.

1.2 Etapas y metodología empleada

La primera fase de este proyecto ha consistido en un estudio de la teoría existente sobre la materia. A través de la lectura de artículos varios se ha desarrollado una visión general para poder realizar este trabajo.

El grueso de este proyecto se ha dedicado a crear un sistema de ayuda, denominado *UVAS Help*. En él, se han incluido datos varios sobre el simulador atómico UVAS-DADOS, como información sobre manejo, parámetros de entrada o implementación de modelos físicos. Junto con este trabajo, también se ha realizado una “auditoría informática”, consistente en la revisión del código fuente del programa para comprobar que los mecanismos se implementan correctamente.

Como aplicación práctica de los conocimientos adquiridos, se ha procedido a experimentar con simulaciones en grado creciente de dificultad hasta llegar a la calibración de parámetros y el estudio de otros nuevos implementados durante la etapa de desarrollo del proyecto.

Las herramientas informáticas, tales como el Microsoft Visual Studio o el Microsoft HTML Help Workshop, han sido esenciales para este trabajo. Se ha aprendido su manejo gracias a los manuales y la documentación disponible.

1.3 Esquema del proyecto

El esquema del proyecto se expone a continuación. En el capítulo 2 se ofrece al lector un tutorial básico de defectos en semiconductores desde la perspectiva atómica. Dicho tutorial es un compendio de las lecturas realizadas y sienta las bases para comprender cómo se ha implementado el simulador DADOS. A continuación, el capítulo 3 explica cómo se ha desarrollado e implementado un sistema de ayuda para el simulador UVAS-DADOS. La documentación de la ayuda se ha adjuntado en los apéndices de esta memoria. En el capítulo 4 se expone cómo se han calibrado ciertos parámetros del DADOS y se ofrece información de interés sobre algunas simulaciones realizadas. Para finalizar, en el capítulo 5 se realiza una visión general del proyecto y se ofrecen un conjunto de líneas para futuras investigaciones.

Defectos en semiconductores. Una visión atomística

2.1 Introducción

El silicio es un material ampliamente utilizado en la actualidad y es la base de la industria microelectrónica. El propósito de este capítulo es presentar un pequeño tutorial sobre defectos en semiconductores, formulado desde un punto de vista atomístico, en contraposición con el tradicional enfoque “continuo”. Resulta claro entender que la minituarización de los dispositivos exige pensar en términos discretos ya que las aproximaciones clásicas dejan de ser totalmente válidas.

La estructura de este capítulo se ha dispuesto como sigue. Tras describir someramente la estructura cristalina del silicio (material al que nos referiremos), veremos los defectos que existen en el mismo. Estudiaremos los intersticiales y vacantes y los fenómenos a los que están asociados, tales como la generación, la difusión o su agrupamiento en estructuras complejas. Posteriormente entraremos a analizar el papel que desempeña el daño producido en los procesos de implantación iónica, estudiando, por un lado, los fenómenos de amorfización y recristalización y, por otro, el aumento transitorio de la difusión (TED). Finalizaremos el capítulo hablando de los agregados (clusters) de dopantes, estructuras que son las principales responsables de la desactivación eléctrica de los dopantes, efecto altamente perjudicial en la fabricación de los dispositivos.

2.2 Defectos puntuales en el silicio

2.2.1 Estructura cristalina del silicio

El silicio cristalino (tipo diamantino) presenta una estructura como se muestra en la figura 2.1. Se trata de una red FCC (*face centered cubic*) con dos átomos equivalentes diferentes.

Cada átomo de la red tiene cuatro primeros vecinos (átomos más próximos). La celda unidad convencional (mostrada en la figura), cuyo lado a se denomina **parámetro de red**, contiene

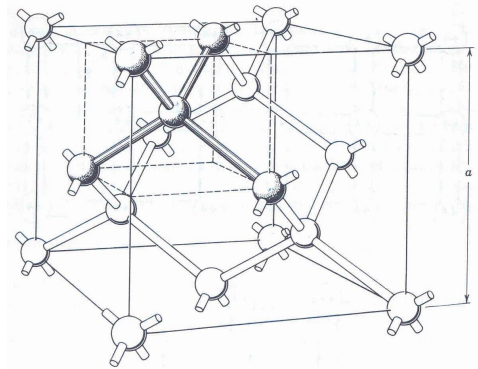


Figura 2.1: Celda unidad del silicio cristalino [4]

ocho átomos. Es trivial demostrar que la distancia entre posiciones cristalinas equivalentes consecutivas, que coincide con la distancia entre segundos vecinos es:

$$d_{2^{\text{os}} \text{ vecinos}} = \frac{a}{\sqrt{2}} = \frac{0.543 \text{ nm}}{\sqrt{2}} = 0.384 \text{ nm} \quad (2.1)$$

Existe una amplia bibliografía sobre cristalografía [4], por lo que no repetiremos nada en esta memoria. Simplemente comentaremos, de cara a secciones posteriores, que para poder trabajar con la red de silicio, se utiliza un sistema de coordenadas tridimensional cartesiano. Por otra parte, los planos se definen por su vector normal, (n_1, n_2, n_3) , siguiendo la notación de los “índices de Miller”.

2.2.2 Defectos en el silicio

En el silicio real, aparecen ciertos defectos cristalinos. Se puede hacer una primera clasificación como sigue.

- **Defectos nativos.** Puede ocurrir que un átomo de silicio abandone su posición en la red, creándose un intersticial (átomo desplazado) y una vacante (vacío dejado por el átomo). Este par aislado se denomina de Frenkel. Intersticiales y vacantes pueden interactuar entre sí, lo cual estudiaremos más adelante.
- **Defectos asociados a dopantes.** Los átomos de dopantes¹ (fósforo, arsénico, boro, carbono, fluor, etc.) pueden ocupar posiciones que antes eran ocupadas por el silicio (dopante sustitucional) o bien, pueden asociarse a defectos nativos (par dopante-intersticial o dopante-vacante). Estos defectos asociados a dopantes también pueden interactuar entre sí o con defectos nativos.

El tamaño de los defectos es un aspecto también importante, y se pueden clasificar también atendiendo al mismo:

¹A lo largo de este tutorial, denominaremos dopantes a toda especie distinta al silicio. Según esta notación, los dopantes no tienen por qué ser necesariamente eléctricamente activos.

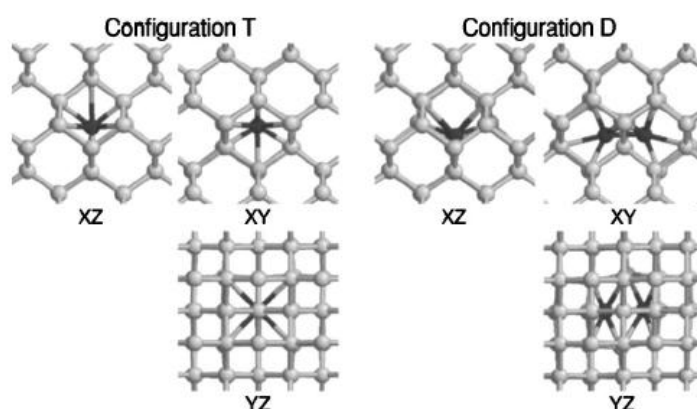


Figura 2.2: Algunas configuraciones típicas para los intersticiales: tetraédrica (T) y dumbbell (D) [5]

- **Defectos puntuales.** Están formados por una partícula, que puede ser un defecto nativo (intersticial o vacante), un dopante sustitucional (flour, antimonio,...) o un par dopante-defecto nativo.
- **Defectos extendidos.** Son agregados de varias partículas (del mismo tipo o de tipos distintos) y son inmóviles. A lo largo de este capítulo, especialmente en la sección 2.4 se estudiarán en profundidad.

Realizaremos, por último, una clasificación desde el punto de vista eléctrico:

- **Defectos eléctricamente activos.** Modifican el estado eléctrico del material donando electrones (donores, como el arsénico) o aceptándolos (aceptores, como el boro). Los dopantes de los grupos III y V del sistema periódico, cuando están en posición sustitucional son eléctricamente activos.
- **Defectos eléctricamente inactivos.** No donan ni aceptan electrones manteniendo, por tanto, el carácter neutro del silicio. Dopantes en estado no sustitucional presentan este comportamiento.

En la figura 2.2 podemos apreciar algunas configuraciones comunes del intersticial del silicio.

A su vez, los defectos pueden ser fijos o móviles. Los procesos de difusión de defectos por la red es un aspecto que trataremos en profundidad en el apartado siguiente.

2.2.3 Difusión de defectos puntuales

El proceso por el cual un defecto cambia de una posición a otra en la red de silicio se conoce con el nombre de **migración**. Se trata de un proceso de carácter discreto, que tendrá asociada una determinada probabilidad por unidad de tiempo (frecuencia). Por otro lado, el movimiento es aleatorio (*random walk*), en el sentido de que los defectos pueden saltar a cualquiera de las posiciones equivalentes, distribuidas uniformemente en las direcciones del espacio y siguiendo los

vectores de traslación de la red FCC. Si consideramos que cada proceso individual de migración queda completo cuando el átomo llega a la posición cristalina equivalente contigua, la distancia de salto será un parámetro constante, conocido como λ , y coincidente con la distancia entre segundos vecinos (2.1).

Como ya hemos mencionado, la migración de defectos puntuales está asociada a una cierta frecuencia, ν_m , con dependencia de la temperatura de tipo Arrhenius:

$$\nu_m = \nu_{m,0} \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right) \quad (2.2)$$

donde k es la constante de Boltzmann. El prefactor de la expresión anterior sería la frecuencia de salto a temperatura infinita, $\nu_{m,0}$. E_m es la energía necesaria para que un defecto puntual salte de una posición a otra, denominada energía de migración. Los defectos tienden a localizarse en posiciones asociadas a los estados de energía más bajos posibles. La figura 2.3 muestra, de manera simplificada, los estados energéticos que atraviesa un defecto a lo largo de su existencia. El eje de abscisas puede emplearse para posición, o de forma más general, para configuración.

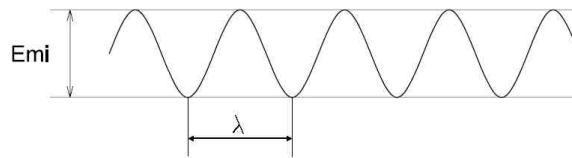


Figura 2.3: Diagrama energético de la difusión de defectos puntuales

En la práctica, el camino de migración puede ser bastante complicado presentando estados metaestables (mínimos relativos), y rutas diversas. En la figura 2.4 se puede ver un ejemplo de la migración del intersticial a nivel estructural donde se puede apreciar la transición de una estructura tetraédrica hacia otra del mismo tipo a través de una dumbbell (ver figura 2.2).

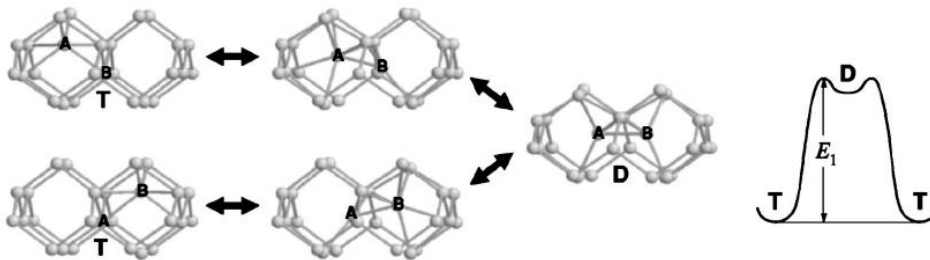


Figura 2.4: Mecanismo de difusión del intersticial entre dos estructuras tetraédricas a través de una dumbbell [5]

La **difusividad** (D) o coeficiente de difusión es proporcional a la frecuencia de salto, según indica (2.3).

$$D = \frac{\lambda^2}{6} \nu_m \quad (2.3)$$

Al aumentar la frecuencia de salto, es decir, el número de saltos por segundo, aumenta la

difusividad. El coeficiente “6” que aparece en la ecuación hace referencia a las seis direcciones ortogonales de movimiento posible.

Al igual que la frecuencia de salto, la difusividad es un parámetro dependiente de la temperatura, siguiendo la forma de Arrhenius ya comentada.

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right) \quad (2.4)$$

La expresión (2.4) es inmediata de demostrar, tras verificarse la linealidad entre frecuencia de migración y difusividad (2.3). Si, como ya dijimos, suponemos que λ es constante para todos los defectos, la frecuencia y la difusividad pueden ser tomadas como magnitudes equivalentes, relacionadas de forma biunívoca, siendo $\lambda^2/6$ el factor de conversión.

2.2.4 Generación térmica de intersticiales y vacantes

La generación de intersticiales y vacantes en una estructura cristalina de silicio puede tener dos orígenes:

- **Generación térmica.** Se trata de un mecanismo intrínseco al semiconductor y es función de la temperatura siguiendo la dependencia de Arrhenius. Se verifica que la generación térmica es la misma que en el equilibrio, salvo en situaciones de dañado muy elevado.
- **Generación por dañado.** Se debe a la penetración en el semiconductor de partículas que chocan con los átomos de la red, transfiriéndoles parte de su energía cinética para arrancarlos de sus posiciones y crearse, por tanto, pares de Frenkel. Las partículas de las que hablamos pueden ser iones (procesos de implantación), electrones (procesos de irradiación) o incluso fotones de alta energía.

Generación térmica

Nótese que el concepto de generación térmica, tal y como se ha definido, implica necesariamente que, a cualquier temperatura por encima de 0 K, siempre habrá una determinada concentración de intersticiales y vacantes, la cual denotaremos como concentración de equilibrio, C_I^* y C_V^* . Más adelante realizaremos los cálculos necesarios para deducir expresiones matemáticas de estos parámetros.

Supongamos la situación simplificada y esquemática de la figura 2.5. Admitamos que se trata de redes de silicio a temperatura T. Es evidente que la figura superior de la izquierda (red cristalina perfecta) es más estable, es decir, posee una menor energía por átomo. Denotamos la energía de los N átomos presentes en la red sin defectos por $E_{sd}(N)$. La figura superior de la derecha es menos estable que $N + 1$ átomos de cristal perfecto (posee, por tanto, más energía). La energía necesaria para formar un intersticial, E_{fI} , viene dada por las siguientes expresiones:

$$E_{fI} = E_{con I}(N + 1) - E_{sd}(N + 1) \quad (2.5)$$

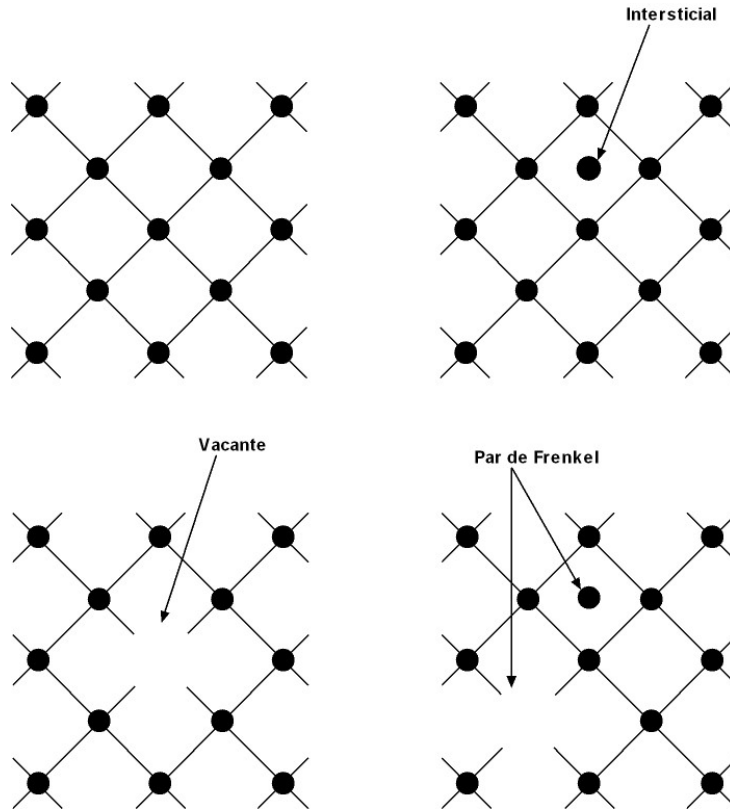


Figura 2.5: Representación esquemática de configuraciones para la definición de la energía de formación

$$E_{fI} = E_{\text{con I}}(N + 1) - \frac{N + 1}{N} E_{\text{sd}}(N) \quad (2.6)$$

El esquema para las vacantes (figura inferior izquierda) es análogo:

$$E_{fV} = E_{\text{con V}}(N - 1) - \frac{N - 1}{N} E_{\text{sd}}(N) \quad (2.7)$$

Para poder crear un par de Frenkel (figura inferior derecha), es necesaria una aportación energética que, si el intersticial y la vacante estuvieran suficientemente alejados, sería igual a la suma de las energías de formación de ambos defectos:

$$E_{fIV} = E_{fI} + E_{fV} \quad (2.8)$$

Generación de intersticiales y vacantes en la superficie

Admitamos que la concentración de intersticiales en situación de equilibrio sigue la dependencia clásica de Arrhenius con la temperatura:

$$C_I^* = C_{I,0}^* \exp\left(-\frac{E_{fI}}{kT}\right) \quad (2.9)$$

Según el principio de equilibrio microscópico, se debe cumplir la igualdad entre el número de emisiones desde la superficie y el de capturas por la superficie. Las siguientes expresiones para el caso de intersticiales son fácilmente deducibles:

- N° de capturas por unidad de tiempo y superficie = $\frac{\nu_{mI}}{6} C_I^* \lambda$, ya que, desde la superficie, las interacciones únicamente se pueden producir hasta una distancia λ y, además, de las 6 direcciones del espacio, sólo se produciría captura en una de ellas.
- N° de emisiones por unidad de tiempo y superficie = $\alpha \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right)$, donde E_a es la energía de activación del intersticial y α es un prefactor.

Si igualamos las expresiones y recordamos la dependencia exponencial de la frecuencia de migración y de la concentración de intersticiales se cumple lo que sigue:

$$\frac{\nu_{mI,0} \exp\left(-\frac{E_{mI}}{kT}\right)}{6} C_{I,0}^* \exp\left(-\frac{E_{fI}}{kT}\right) \lambda = \alpha \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (2.10)$$

Concluimos que:

- El valor del prefactor α es deducible a partir de (2.9):

$$\alpha = \frac{\nu_{mI,0} C_{I,0}^*}{\lambda} \quad (2.11)$$

- La energía de activación del intersticial es la suma de la de formación y la de migración. La figura 2.6 clarifica este razonamiento. La situación para las vacantes es análoga:

$$E_{aI} = E_{fI} + E_{mI} \quad (2.12)$$

$$E_{aV} = E_{fV} + E_{mV} \quad (2.13)$$

La concentración de intersticiales a temperatura infinita, $C_{I,0}^*$ coincidiría aproximadamente con la concentración atómica del silicio, es decir $5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-2}$, en el caso en que no hubiera cambios de entropía. Esto se debe a que, a tales temperaturas, la red se encuentra totalmente desordenada. Insistimos en que no se deben considerar cambios entrópicos para que esto sea cierto. Dado que realmente existen, diremos simplemente que los valores son próximos en órdenes de magnitud.

En general, para volúmenes pequeños, la generación en la superficie es más frecuente que en el volumen. Esto se debe, fundamentalmente, a que la superficie actúa como fuente y sumidero de intersticiales y vacantes y ayuda, por tanto, a reestablecer el equilibrio.

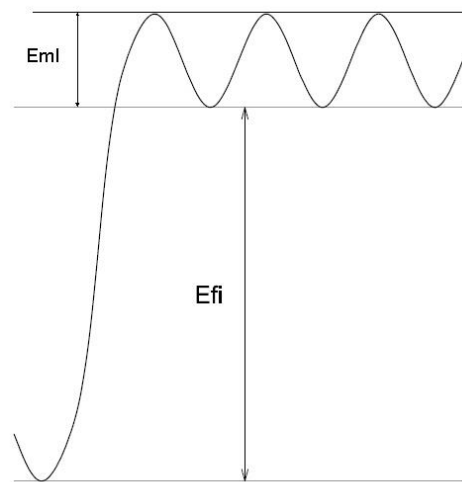


Figura 2.6: Esquema energético de la activación del intersticial

Generación de intersticiales y vacantes en el volumen

Supondremos en primer lugar una vacante que salta a posiciones alejadas una distancia λ . Dicha vacante eventualmente se encontrará con un intersticial a una distancia menor o igual que λ , con el que admitiremos que interacciona y con el que finalmente se recombinará. Supondremos que antes de que se produzca la recombinación, no llega ningún otro defecto puntual a las inmediaciones del par intersticial vacante. Podemos definir, pues, un radio de captura igual la distancia de interacción, igual a λ .² El esquema de trabajo es el mostrado en la figura 2.7. Nótese que consideramos a los intersticiales como defectos fijos (sin movimiento).

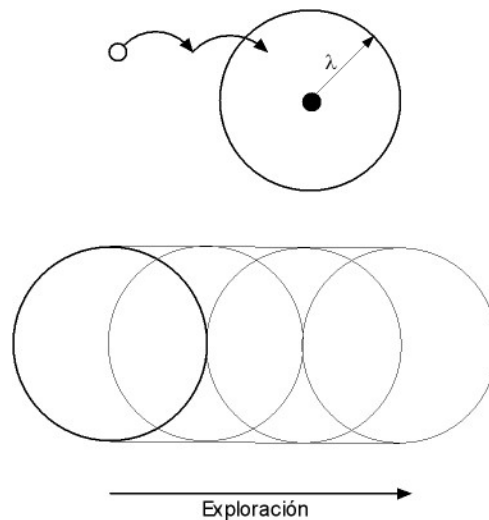


Figura 2.7: Esquema del volumen explorado por la vacante

La frecuencia con la que una vacante es capturada por los intersticiales es igual al producto de la concentración de intersticiales por el volumen explorado por la vacante por unidad de tiempo.

²Nótese que λ en nuestra teoría se utiliza para dos parámetros diferentes: distancia de salto y distancia de interacción (o de captura). Además, concide con la distancia entre segundos vecinos del silicio.

Esto es:

$$f_{1V} = \left(\frac{4}{3} \pi \lambda^3 \nu_{mV} \beta \right) (C_I) \quad (2.14)$$

El término β es un factor de corrección debido a que cuando el defecto salta a una posición adyacente, parte del volumen debe ser descontado ya que estaba explorado en la fase anterior. Matemáticamente, se demuestra que su valor es 0,5. Si ahora consideramos que no hay una vacante, sino una concentración C_V de vacantes:

$$f_V = \frac{4}{3} \pi \lambda^3 \nu_{mV} \beta C_I C_V = v_c \nu_{mV} C_I C_V \quad (2.15)$$

Donde $v_c = \beta \frac{4}{3} \pi \lambda^3$ se puede definir como el volumen eficaz de captura de un defecto puntual genérico.

Si tenemos en cuenta que los intersticiales también son móviles, debemos sumar la frecuencia de migración de los mismos.

$$f_{IV} = v_c (\nu_{mI} + \nu_{mV}) C_I C_V \quad (2.16)$$

La expresión (2.16) representa las recombinaciones o capturas de defectos puntuales por unidad de tiempo y volumen. Como ya hemos visto, este parámetro, en el equilibrio, debe coincidir con la generación de dichos defectos, por lo que se cumple:

$$G = v_c (\nu_{mI} + \nu_{mV}) C_I^* C_V^* \quad (2.17)$$

El esquema energético presentado en la figura 2.8 resume lo visto hasta ahora.

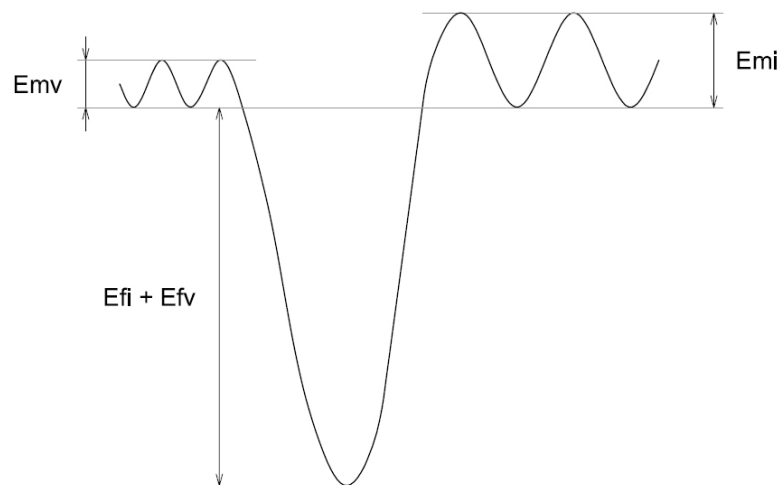


Figura 2.8: Diagrama energético de la generación de un par de Frenkel

Las energías de formación, tanto de intersticiales (E_{fI}) como de vacantes (E_{fV}), son elevadas, luego las concentraciones de estos defectos en equilibrio son pequeñas. El producto $C_I^* C_V^*$ que aparece en (2.17) va a tomar, por tanto, un valor muy bajo, cumpliéndose que, en situación de equilibrio, va a haber muy pocas recombinaciones de intersticiales y vacantes por unidad de volumen y tiempo. Por tanto, por reversibilidad microscópica, también habrá muy pocas generaciones de pares de Frenkel por volumen y tiempo. Los valores de energías de migración y formación de defectos puntuales usados en la actualidad en el simulador atómico DADOS (ver apéndice C) vienen dadas por la tabla 2.1.

Tabla 2.1: Energías de migración y formación de intersticiales y vacantes usados en el simulador atómico DADOS (ver apéndice C)

| | I | V |
|------------|-----|-----|
| E_m (eV) | 0,8 | 0,4 |
| E_f (eV) | 4,0 | 3,8 |
| E_a (eV) | 4,8 | 4,2 |

Autodifusión en equilibrio

La difusividad en equilibrio del silicio en silicio (autodifusión en equilibrio) es debida a la contribución conjunta de intersticiales y vacantes, y viene dada por la siguiente expresión:

$$D_{SD}^* = f_I \frac{C_I^*}{C_{Si}} D_I + f_V \frac{C_V^*}{C_{Si}} D_V \quad (2.18)$$

Donde $f_I \approx 0,72$ y $f_V \approx 0,50$.

En la figura 2.9 se muestra la difusividad de intersticiales y vacantes. Como vemos, a alta temperatura dominan los intersticiales, mientras que las vacantes lo hacen a baja temperatura. En la figura, se muestra en línea más gruesa la difusividad de la partícula dominante en cada tramo.

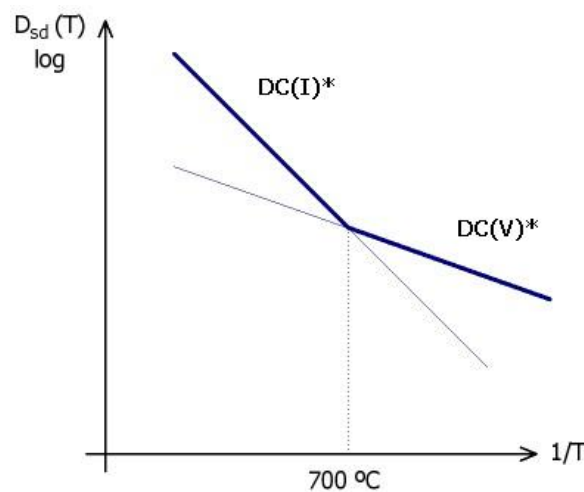


Figura 2.9: Difusividad de intersticiales y vacantes

Difusividad efectiva de intersticiales y vacantes en el equilibrio

El flujo de intersticiales se puede calcular como la difusividad por la concentración, $D_I C_I$. Es inmediato deducir que, en el equilibrio, se cumple lo que sigue:

$$D_I C_I^* \propto \exp\left(-\frac{E_{mI} + E_{fI}}{kT}\right) \quad (2.19)$$

Y la energía de difusión que aparece en la exponencial, $E_{diff,I} = E_{mI} + E_{fI}$ es lo que normalmente se mide en experimentos de difusión, (2.18).

Es útil definir la “difusividad efectiva” de los intersticiales de la forma siguiente:

$$D_I^{eff} = D_I \frac{C_I}{C_{Si}} \quad (2.20)$$

donde $C_{Si} = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ es la concentración del silicio. En equilibrio, la energía de activación del D_I^{eff} es igual a $E_{diff,I}$

La situación para las vacantes es análoga, por lo que no repetiremos los resultados.

Supersaturación

La supersaturación de intersticiales o vacantes se define como el cociente entre la concentración de estas partículas y su concentración en el equilibrio, esto es:

$$\begin{aligned} \text{Supersaturación de intersticiales} &= \frac{C_I}{C_I^*} \\ \text{Supersaturación de vacantes} &= \frac{C_V}{C_V^*} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Como veremos más adelante, la supersaturación es un parámetro importante y muy relacionado con la difusividad de dopantes.

2.3 Difusión de dopantes

Hasta ahora, hemos estudiado el caso de defectos puntuales nativos de silicio. Ahora nos centraremos en los dopantes. Como ya vimos, los dopantes podían encontrarse en posición sustitucional o bien formando pares con los intersticiales o vacantes (par dopante-defecto nativo). Los dopantes sustitucionales son inmóviles y eléctricamente activos (donan o aceptan electrones), en caso de no pertenecer al mismo grupo que el silicio. Desde el punto de vista eléctrico, los pares dopante-defecto nativo suelen actuar como defectos profundos.

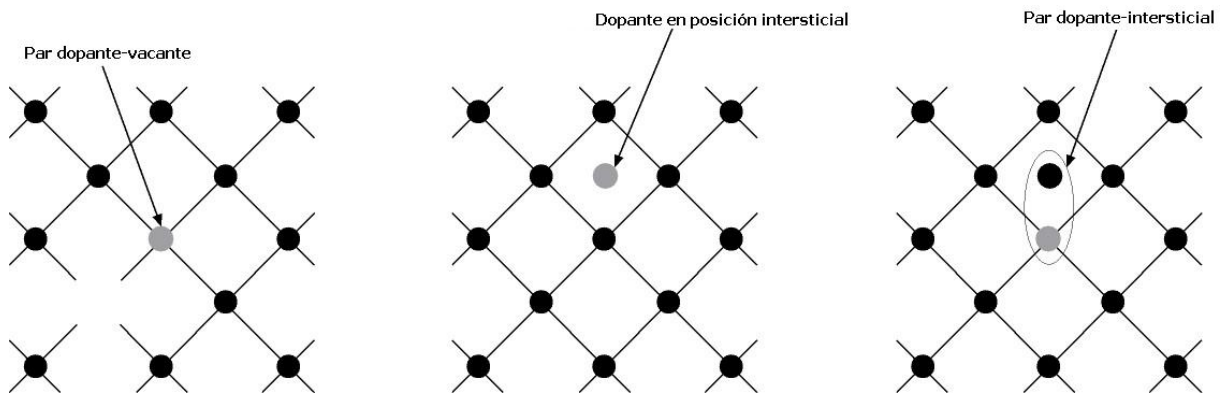


Figura 2.10: Visión esquemática del par dopante-vacante y del par dopante-intersticial

Existen dos estructuras de interés en Microelectrónica mostradas en la figura 2.10 y comentadas a continuación:

Par dopante-vacante. Se trata de un átomo dopante en posición sustitucional con una vacante en un lugar próximo. Es habitual en dopados con átomos grandes, como el antimonio (Sb).

Par dopante-intersticial. De manera simplificada, existen dos morfologías de esta estructura mostradas en la figura 2.10. En primer lugar, podemos tener un átomo de dopante en posición intersticial. Otra opción es tener el dopante en posición sustitucional y un intersticial de silicio próximo a él y asociados. A pesar de que son estructuras distintas, el paso de una a la otra será cuestión de energías (en analogía con las configuraciones D y T del intersticial de silicio mostradas en las figuras 2.4 y 2.2). Desde el punto de vista de los fenómenos de difusión, va a ser indistinguible cuál de las dos morfologías microscópicas va a corresponder con el mínimo de energía. Esta configuración (en la morfología que sea) es habitual con dopantes de masa atómica pequeña, como puede ser el boro (B).

Dado que los dopantes sustitucionales (si forman pares dopante-defecto nativo) son inmóviles, la difusividad de los dopantes va a estar promovida por los intersticiales o por las vacantes. Es evidente que se buscará que estos procesos no ocurran en la medida de lo posible ya que, en la actualidad, se intentan fabricar uniones muy superficiales, y la difusión provoca el efecto contrario. Por esto mismo, es necesario controlar el número de intersticiales y vacantes. La difusión de dopantes sin intervención de intersticiales ni de vacantes (difusión directa) es totalmente despreciable.

A continuación vamos a estudiar dos ejemplos de interés. Un dopante cuya difusión está promovida principalmente por intersticiales, que es el boro; y otro en cuya difusión intervienen sobre todo las vacantes, el antimonio. Completaremos esta sección estudiando la influencia de algunas impurezas que actúan como trampas de intersticiales o de vacantes.

2.3.1 Estudio del boro (B)

Denotemos por B_s al ion de boro sustitucional y, por tanto, inmóvil. B_i , va a ser, por tanto, el boro intersticial y móvil, que también podría verse como un par BI. Un boro sustitucional puede

interactuar con un intersticial, creándose un boro intersticial. Este mecanismo es ampliamente conocido y se denomina *kick-out*. Por otro lado, el boro intersticial puede colocarse en posición sustitucional, generando un átomo de silicio intersticial que escapa de la interacción (ruptura o *break-up*). Estas relaciones físicas pueden escribirse como sigue:



Estados energéticos

Como es evidente, en estos procesos intervienen energías. Concretamente, para romper un boro intersticial ($B_i \rightarrow I + B_s$), es necesaria una energía de activación, E_{bk,B_i} que será igual a la de *binding* o enlace (E_{b,B_i}) más la energía de migración del intersticial para crear el par propiamente dicho (E_{mI}). Este esquema se puede ver en la figura 2.11. Suponemos, de momento, que no existe barrera adicional de interacción ($E_{barr} = 0$).

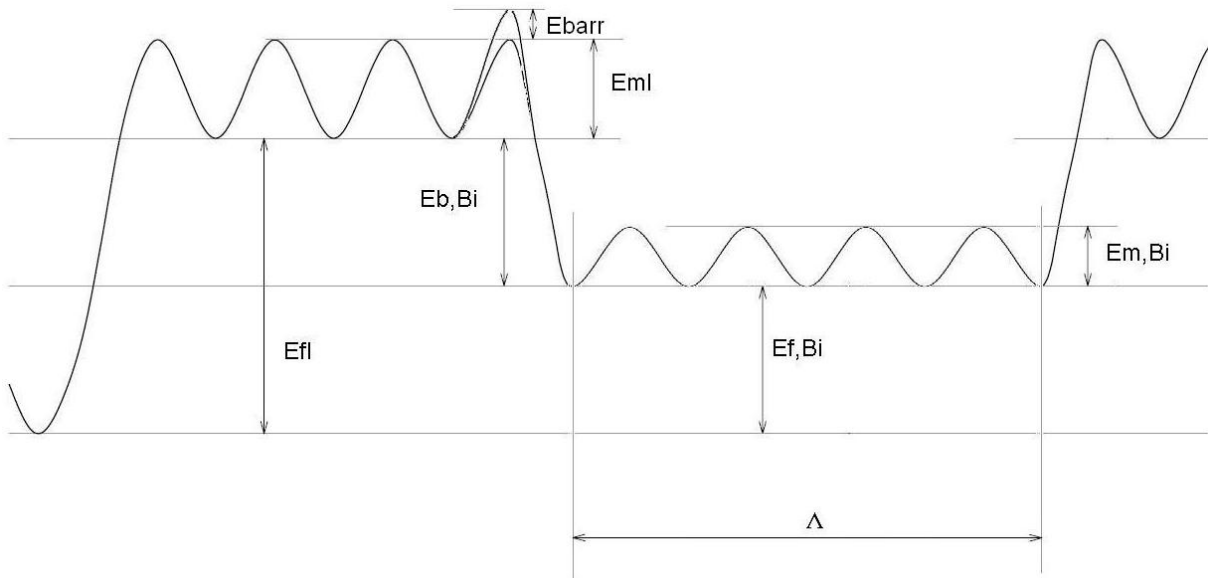


Figura 2.11: Diagrama energético del *break-up*

Veamos la concentración de boro intersticial creado y destruido en función de parámetros conocidos:

- Concentración de boro intersticial formada a partir de boro sustitucional por unidad de tiempo = $\nu_c \nu_{mI} C_I C_{B_s}$
- Concentración de boro intersticial que se rompe por unidad de tiempo = $\nu_{bk,B_i,0} C_{B_i} \exp\left(-\frac{E_{bk,B_i}}{kT}\right)$

En situación de casi equilibrio o equilibrio local, la concentración de intersticiales no coincide con C_I^* , pero los procesos descritos por (2.22) se compensan, por lo que podemos igualar las ecuaciones anteriores:

$$v_c \nu_{mI,0} \exp\left(-\frac{E_{mI}}{kT}\right) C_I C_{B_s} = \nu_{bk,B_i,0} C_{B_i} \exp\left(-\frac{E_{mI} + E_{b,B_i}}{kT}\right)$$

$$C_{B_i} = v_c \frac{\nu_{mI,0}}{\nu_{bk,B_i,0}} C_I C_{B_s} \exp\left(\frac{E_{b,B_i}}{kT}\right) \quad (2.23)$$

El resultado que obtenemos es coherente, puesto que la concentración de boro intersticial es proporcional a la de aquellas partículas necesarias para su formación, esto es, intersticiales y boro, y además depende de manera exponencial directa de la energía de *binding*, $\exp\left(\frac{E_{b,B_i}}{kT}\right)$.

Ya comentamos con anterioridad que v_c era el volumen eficaz de captura. Puede ocurrir que exista una energía de barrera, E_{barr} , representada en la figura 2.11, que frene la frecuencia de los procesos descritos en (2.22). Matemáticamente, este proceso se puede describir por medio de una probabilidad que multiplique al volumen:

$$v_c^{ef} = v_c P = v_c \exp\left(-\frac{E_{barr}}{kT}\right) \quad (2.24)$$

Efectivamente, dado que la probabilidad es siempre menor o igual que uno, el volumen efectivo de captura es menor que el caso teórico. Las capturas se reducen dado que es menos probable encontrar partículas para interactuar en un volumen menor. Sin embargo, la concentración, expresada en (2.23) no se verá afectada ya que emisiones y capturas disminuirán en la misma proporción.

Situación de equilibrio

Si retomamos (2.23) y aplicamos las condiciones de equilibrio, recordando (2.9) podemos llegar fácilmente a la expresión que sigue:

$$\frac{C_{B_i}^*}{C_{B_s}} = v_c \frac{\nu_{mI,0}}{\nu_{bk,B_i,0}} C_{I,0}^* \exp\left(-\frac{E_{fI} - E_{b,B_i}}{kT}\right) \quad (2.25)$$

Es decir, la energía de formación del boro intersticial se puede ver como la energía de formación del intersticial menos la energía de *binding* del boro intersticial: $E_{f,B_i} = E_{fI} - E_{b,B_i}$. En la figura 2.11 se representan los estados energéticos descritos. Nótese que la parte de más a la izquierda se corresponde con la existencia de boro sustitucional. A medida que nos desplazamos a la región central, aparece un intersticial, para lo cual hemos precisado de una energía de formación, E_{fI} . La tercera zona (la de la derecha) se corresponde con el boro intersticial. Como es lógico, para pasar de ésta a la central, es necesario que el boro ocupe una posición en la red de silicio, desalojando a un átomo que pasa a ocupar una posición intersticial. La energía necesaria para este proceso es, por definición, la de *binding*, E_{b,B_i} .

Retomemos la expresión (2.25). No es complicado deducir que el cociente entre la concentración de boro intersticial en equilibrio y de boro sustitucional es aproximadamente igual a la exponencial mostrada a continuación:

$$\frac{C_{B_i}^*}{C_{B_s}} \approx \exp\left(-\frac{E_{f,B_i}}{kT}\right) \quad (2.26)$$

Y, además, la exponencial es mucho menor que uno, puesto que la energía de formación del boro intersticial es relativamente elevada. En definitiva, la concentración de boro intersticial en equilibrio es muy inferior a la de boro sustitucional que, por deducción inmediata, tiene que ser similar a la de boro total: $C_{B_i}^* \ll C_{B_s} \simeq C_B$.

Situación de casi equilibrio

La expresión (2.23) presenta validez general. Si multiplicamos y dividimos por C_I^* resulta lo que sigue:

$$C_{B_i} = v_c \frac{\nu_{mI,0}}{\nu_{bk,B_i,0}} \frac{C_I}{C_I^*} C_I^* C_{B_s} \exp\left(\frac{E_{b,B_i}}{kT}\right)$$

Que, identificando términos mediante (2.25) podemos llegar fácilmente a:

$$\frac{C_{B_i}}{C_{B_s}} = \frac{C_I}{C_I^*} \frac{C_{B_i}^*}{C_{B_s}} \quad (2.27)$$

Como no podía ser de otra forma, la concentración de boro intersticial depende, por supuesto, de la concentración de equilibrio, pero también de la supersaturación de intersticiales. De hecho, la difusividad del boro se utiliza frecuentemente para medir la supersaturación de los intersticiales.

Difusividad del boro

El boro es un material que se difunde en forma intersticial. Matemáticamente, el número de saltos del B_i por unidad de volumen y tiempo se puede expresar como el producto de la frecuencia de migración del boro intersticial por la concentración del mismo, esto es: $\nu_{m,B_i} C_{B_i}$. Recordando (2.27), podemos establecer la siguiente relación:

$$\frac{\text{Nº de saltos del B } (\sim B_i) \text{ por ud. volumen y tiempo}}{\text{Concentración de B } (\sim B_s)} = \nu_{m,B_i} \frac{C_I}{C_I^*} \frac{C_{B_i}^*}{C_B} \quad (2.28)$$

La expresión (2.28) indica la frecuencia de salto aparente del boro. Ya vimos con anterioridad que frecuencia y difusividad eran términos cuya relación era puramente lineal (2.3), por lo que podemos establecer lo que sigue:

$$D_B = D_B^* \frac{C_{B_i}^*}{C_B} = D_{B_i} \frac{C_I}{C_I^*} \frac{C_{B_i}^*}{C_B} \quad (2.29)$$

Donde D_B^* es la difusividad aparente del boro en equilibrio. La energía de migración aparente de boro en equilibrio (o energía de activación para la difusión del boro) es la suma de la energía de migración del B_i (dada por el término difusividad) más la de formación (dada por el último término, véase (2.25)).

$$E_{dif,B} = E_{m,B_i} + E_{f,B_i} = E_{m,B_i} - E_{b,B_i} + E_{f,I} \quad (2.30)$$

El valor de esta energía de difusión está en torno a 3,6 eV.

Saltos largos del boro

Retomando la figura 2.11, vemos que, tras formarse el par boro-intersticial, éste migra por el material una distancia promedio Λ , denominada distancia de salto largo (*long-hop distance*), hasta que se rompe (*break-up*) y se retorna al estado inicial. Dicha distancia promedio se puede modelar matemáticamente como sigue:

$$\Lambda = \sqrt{\frac{\lambda^2 \nu_{m,B_i}}{6 \nu_{bk,B_i}}} \quad (2.31)$$

Como es evidente, Λ es proporcional a la distancia de salto, λ , y también a la raíz cuadrada del número de saltos antes de romperse. Esto último se debe a que los saltos tienen naturaleza aleatoria.

La energía asociada al proceso viene dada por la migración y *binding* del boro intersticial, y también por la migración del intersticial de silicio; en concreto:

$$E_\Lambda = -\frac{E_{m,B_i} - E_{b,B_i} - E_{mI}}{2} \approx -0,6 \text{ eV} \quad (2.32)$$

En caso de existir una barrera de interacción, E_{barr} (figura 2.11), la expresión (2.32) tendría una contribución adicional de $-\frac{E_{barr}}{2}$.

Un último comentario de interés es el referido al perfil de boro resultante tras la difusión del mismo en el silicio. Cowern *et al.* [6] demostraron que, cuando Λ es pequeña, el perfil es gaussiano, mientras que cuando es grande, el perfil adquiere una forma exponencial.

2.3.2 Estudio del antimonio (Sb)

En el apartado anterior hemos estudiado el boro, y su difusión mediante intersticiales. El antimonio es un material que se difunde mediante vacantes, lo cual es típico en iones de masa atómica elevada, como ya dijimos. La relación que se establece en este caso es la siguiente:



Este proceso puede resultar más complejo a nivel microscópico que la difusión mediante intersticiales. En la figura 2.12 se muestra el proceso de difusión. Como vemos, tras realizarse un intercambio antimonio-vacante, se produce la migración de esta última, finalizando el mecanismo con un nuevo intercambio antimonio-vacante. La ruptura del par tendrá lugar cuando la vacante escape de las inmediaciones del antimonio, al cual está ligado con una energía, $E_{b,SbV}$.

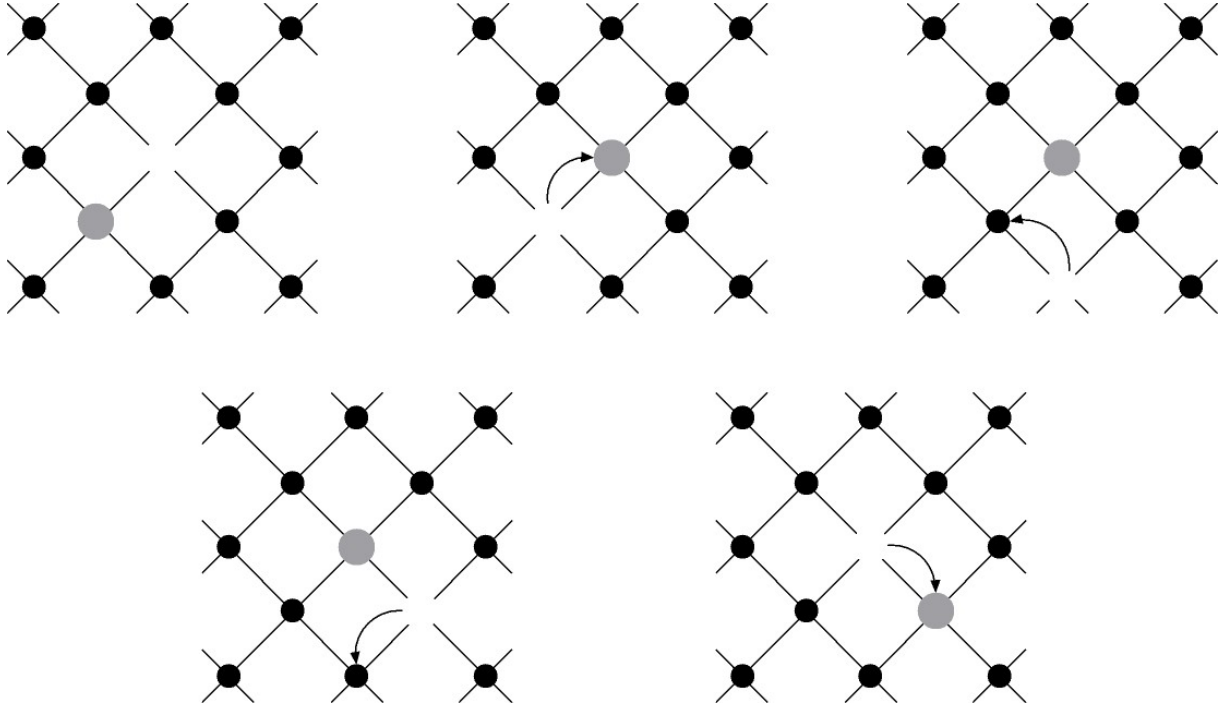


Figura 2.12: Difusión del antimonio asistida por vacantes

Resumimos a continuación las expresiones características de estos procesos, que pueden calcularse de manera totalmente análoga a la realizada en el apartado anterior:

$$\begin{aligned}
 C_{SbV}^* &= v_c \frac{\nu_{mV,0}}{\nu_{bk,SbV,0}} C_V^* C_{Sb} \exp\left(\frac{E_{b,SbV}}{kT}\right) \\
 C_{SbV} &= \frac{C_V}{C_V^*} C_{SbV}^* \\
 D_{Sb} &= D_{SbV}^* \frac{C_{SbV}^*}{C_{Sb}} = D_{SbV} \frac{C_V}{C_V^*} \frac{C_{SbV}^*}{C_{Sb}}
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

De forma simplificada, los estados energéticos del antimonio son similares a los del boro, y se muestran en la figura 2.13

2.3.3 Trampas de intersticiales y vacantes

Las trampas son impurezas, como el carbono o el oxígeno que capturan intersticiales y/o vacantes en el silicio. En concreto, el carbono actúa como trampa de intersticiales, formando C_i [7], mientras que el oxígeno captura vacantes, formando OV. La idea cualitativa de las trampas

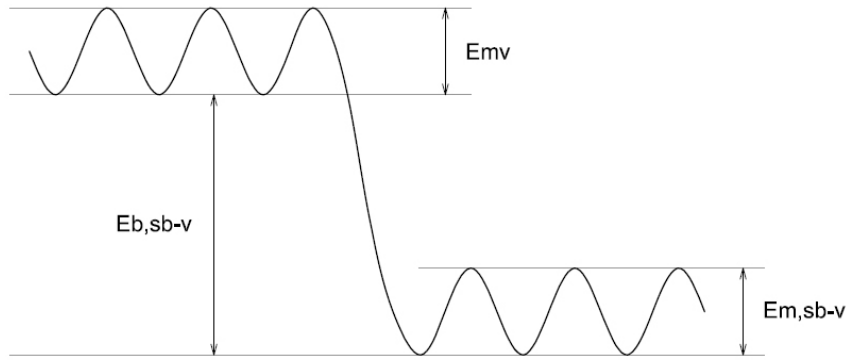


Figura 2.13: Diagrama energético del antimonio

es que, al capturar estos defectos, reducen la difusión que causan los mismos. Para el caso de los intersticiales en presencia de trampas, la difusividad aparente se verá modificada de la forma:

$$D'_I \propto \exp\left(-\frac{E_{bI}}{kT}\right) \quad (2.35)$$

siendo E_{bI} la energía de ligadura de las trampas.

Como contrapartida, aumenta la concentración de dichos defectos, pues se acumulan en las trampas. En el caso de la existencia de trampas de intersticiales, la concentración de intersticiales en el equilibrio será:

$$C_I^{*'} \propto \exp\left(\frac{E_{bI}}{kT}\right) \quad (2.36)$$

Como se puede ver en la figura 2.14, la energía de activación del producto DC^* ($E_f + E_m$) no depende de estas trampas ya que las variaciones de la difusividad y de la concentración en equilibrio y de sus energías asociadas se compensan.

La consecuencia de lo dicho y, dada la inevitable presencia de las trampas, es que las medidas fiables para la difusión de intersticiales y vacantes son las del producto $D_I C_I^*$ ó $D_V C_V^*$, y no las de los términos por separado (D_I , C_I^* , D_V , C_V^*).

Las difusividades efectivas o aparentes de los dopantes en equilibrio (D_B^* , D_{sb}^* , ...) no se verán modificadas por las trampas, ya que dependen de los productos $D_I C_I^*$ y/o $D_V C_V^*$. Por el contrario, las trampas sí afectarán a los transitorios, durante los cuales dichas trampas se llenan o vacían de intersticiales o vacantes, reduciendo las concentraciones libres de los defectos que capturan y, en consecuencia, disminuyendo las difusividades efectivas de los dopantes correspondientes.

Por sencillez, hemos supuesto que las trampas son inmóviles, lo cual no es, en general, cierto, pero sirve para dar una primera idea. De hecho, los mismos pares móviles dopante-defecto que intervienen en la difusión de los dopantes modificarán la concentración de intersticiales y vacantes libres y ligados, de forma análoga a como lo hacen el C_i o el OV .

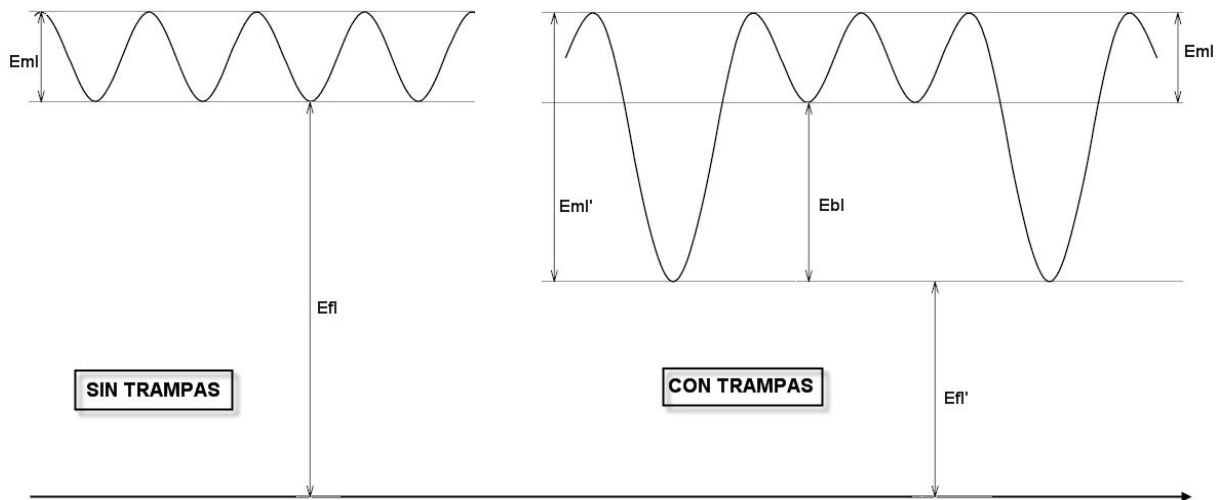


Figura 2.14: Comparativa entre diagramas energéticos sin y con trampas

2.4 Defectos extendidos

Como ya vimos, los defectos extendidos son agregados de partículas del mismo tipo o de tipos distintos.

2.4.1 Clasificación

Podemos hacer la siguiente clasificación:

Amorphous pockets. Son agregados de intersticiales y/o vacantes, con forma irregular. Su configuración más estable dependerá de su tamaño. Si únicamente están formados por intersticiales o por vacantes los denominaremos clusters.

Defectos extendidos de intersticiales con forma definida. Se clasifican según su estructura y según el número de intersticiales presentes en los mismos:

- Defectos 311: Están formados, típicamente, por entre 30 y 3000 intersticiales. Se trata de defectos planares orientados en direcciones $\{311\}$ del cristal.
- *Dislocation loops*: Son defectos planares con forma de discos orientados en las orientaciones $\{111\}$ del espacio y que suelen tener tamaños grandes (miles de intersticiales). Pueden ser de dos tipos:
 - *Perfect dislocation loops*.
 - *Faulted dislocation loops*.

Defectos extendidos de vacantes con forma definida. La clasificación aquí es similar a la anterior:

- *Voids*: Tienen forma esférica y se asemejan a cavidades huecas en el material.

Complejos binarios. Están formados por dopantes e intersticiales o vacantes, por ejemplo B_nI_m , C_nI_m , As_nV_m , etc. Los subíndices indican el número de partículas que integran cada parte. Este tipo de estructuras serán ampliamente comentadas en la sección 2.8.

En la figura 2.15 se muestran los defectos extendidos tras un proceso de implantación iónica en silicio. Apréciense algunos de estos defectos, tales como los 311's y los *voids*.

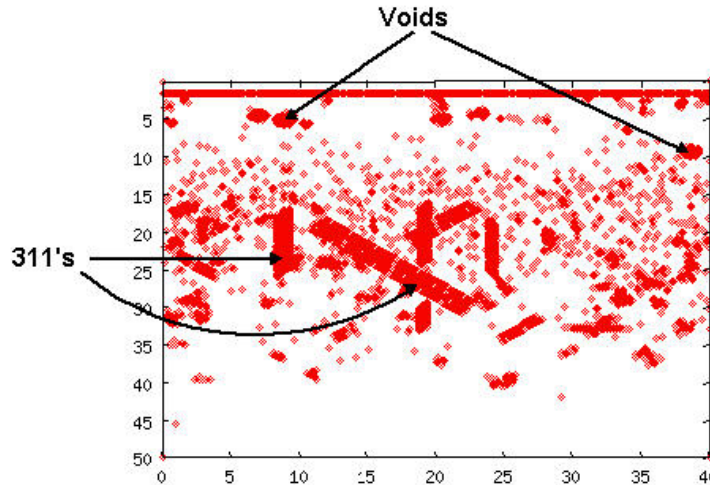


Figura 2.15: Defectos extendidos tras una implantación iónica en silicio

Una idea fundamental en el estudio de este tipo de estructuras es que no migran y los dopantes que están en ellas son eléctricamente inactivos.

Los modelos establecidos en la actualidad para pasar de un tipo de defecto a otro no son tan sencillos como el hecho de suponer un simple umbral en tamaño, sino que, en general, existe dependencia con la temperatura.

Dos aspectos importantes que nos gustaría comentar son los siguientes:

- Podemos hablar de unas frecuencias de emisión, asociadas a energías. Dichas frecuencias dan el número de partículas emitidas por un defecto en cada unidad de tiempo. La expresión que se da es el típico plot de Arrhenius:

$$\nu_{em} = \nu_{em,0} \exp\left(-\frac{E_{em}}{kT}\right) \quad (2.37)$$

- Aparte de emisiones, también podemos hablar de capturas por parte de los defectos de partículas móviles susceptibles de ser capturadas. La frecuencia de captura queda definida, fundamentalmente por la geometría del defecto; en concreto, cuanto mayor sea la superficie de captura, mayor va a ser el número de capturas. Por ejemplo, un defecto planar captura más que un defecto esférico del mismo número de átomos.

2.4.2 Análisis energético en los clusters

Consideremos la reacción consistente en la liberación de un intersticial por un cluster:

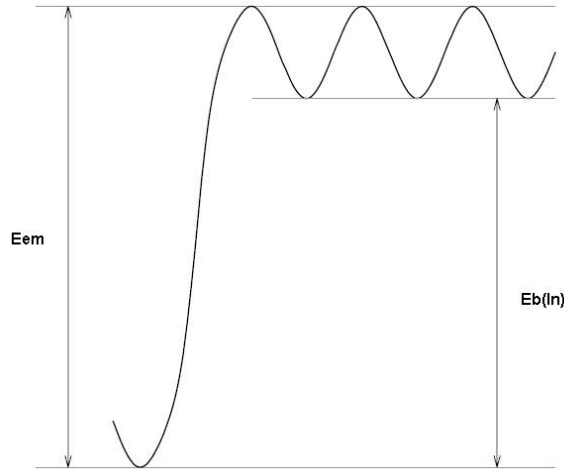
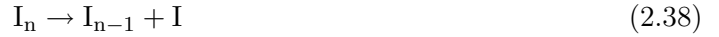


Figura 2.16: Diagrama energético asociado a la liberación de un intersticial por un cluster

En la figura 2.16 se muestra el diagrama energético asociado a (2.38). Supondremos que no hay barreras adicionales de salto energético. Como vemos, la energía necesaria para liberar un intersticial es:

$$E_{em}(I_n) = E_{bI}(I_n) + E_{mI} \quad (2.39)$$

Podemos suponer que, cuando los intersticiales del defecto presentan un comportamiento independiente, su frecuencia de emisión puede calcularse como la suma de las frecuencias de emisión de un único intersticial [8].

$$\nu_{em,I}(I_n) = \nu_{em,0}(I_n) \exp\left(-\frac{E_{em,I}(I_n)}{kT}\right) = n\nu_{em,0} \exp\left(-\frac{E_b(I_n) + E_{mI}}{kT}\right) \quad (2.40)$$

Observando la figura 2.17, definiremos $E_{fI}(I_n)$ como la energía necesaria para formar un intersticial ligado a un defecto de tamaño n . Se define también E_{fI} como la energía necesaria para formar un intersticial libre. Es trivial ver que se cumple 2.41.

$$E_{fI}(I_n) = E_{fI} - E_{bI}(I_n) \quad (2.41)$$

Es bastante sencillo crear un procedimiento iterativo para calcular las energías de formación totales de defectos de intersticiales en función de estas energías sencillas. Veámoslo:

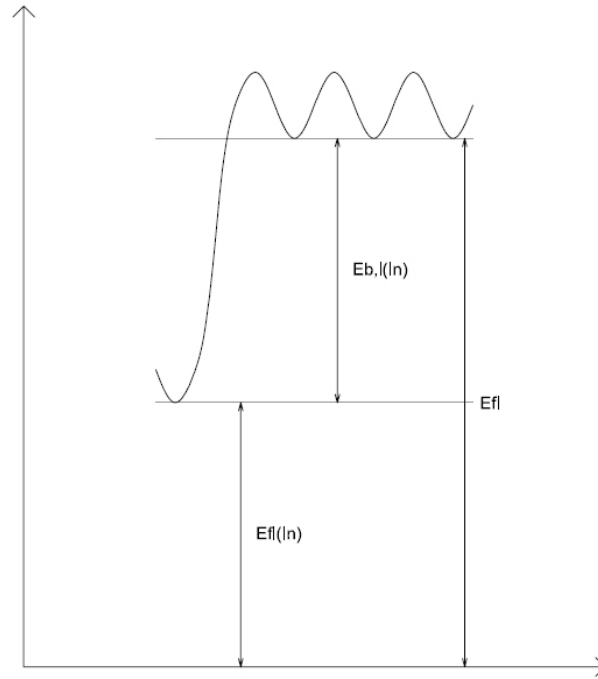


Figura 2.17: Diagrama energético de la formación de un intersticial libre y en un cluster

$$\begin{aligned}
 E(I_1) &= E_{fI} \\
 E(I_2) &= E_{fI} + [E_{fI} - E_{bI}(I_2)] = 2E_{fI} - E_{bI}(I_2) \\
 E(I_3) &= 2E_{fI} - E_{bI}(I_2) + [E_{fI} - E_{bI}(I_3)] = 3E_{fI} - [E_{bI}(I_2) + E_{bI}(I_3)] \\
 &\vdots \\
 E(I_n) &= nE_{fI} - \sum_{k=2}^n E_{bI}(I_k)
 \end{aligned}$$

Y esta última expresión es la llamada energía de formación **total** de un cluster de tamaño n .

2.4.3 Estabilidad de los clusters

Según estudios recientes, tanto experimentales como teóricos, la energía de ligadura de los clusters pequeños de intersticiales y vacantes no tienen una tendencia monótona con el número de partículas del cluster (n), sino que existen determinados tamaños (“números mágicos”) para los que los clusters son mucho más estables [9], [10], [11], [12].

Como podemos ver en la figura 2.18, el cluster más estable es el formado por 8 intersticiales puesto que es el que precisa una energía menor para su formación³.

³En la gráfica se representa la energía de disociación, que es la de formación más la de migración

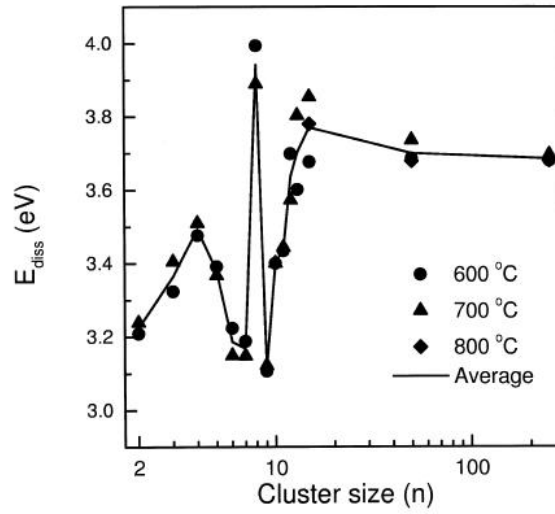


Figura 2.18: Energías de disociación (formación más migración) de los clusters de intersticiales en función del tamaño [10]

2.4.4 Acumulación de daño. Amorphous pockets

El proceso de recombinación de un par IV no es automático, sino que existe una cierta energía de barrera, E_{barr} , de aproximadamente 0,7 eV, [13], [14], [15] (ver figura 2.19).

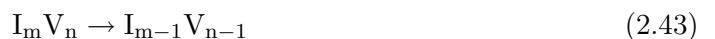
A alta temperatura, la recombinación es sencilla y frecuente, no siendo así a baja temperatura. Por ello, podemos hablar de una **acumulación del daño** de intersticiales y vacantes. Es decir, estas partículas se agrupan entre sí creando los complejos irregulares y desordenados llamados **amorphous pockets**. Por simplicidad, asumiremos que una de estas estructuras posee m intersticiales y n vacantes, representable mediante la notación $I_m V_n$.

Los amorphous pockets pueden experimentar varios procesos:

- **Emisión.** Se trata de un proceso similar al que ocurre con los clusters.
- **Captura.** El proceso también es similar al de los clusters, pero en este caso siempre hay crecimiento:



- **Recombinación.** La reacción producida es la siguiente:



Si denominamos E_{rec} a la energía de recombinación, que es dependiente del tamaño del amorphous pocket, podemos postular que la frecuencia de recombinación es:

$$\nu_{rec} \propto \exp\left(-\frac{E_{rec}}{kT}\right) \quad (2.44)$$

Algunas propiedades de interés son las siguientes:

- Los amorphous pockets más estables son los más grandes.
- En el límite de tamaños grandes, se comportarían como un amorfo, con una tendencia asintótica en la energía de recombinación hacia 2,7 eV, que es el valor de la energía de recristalización que veremos más adelante. En el caso opuesto (tamaños pequeños), el límite correspondería a un par IV.

Es preciso aclarar que, para tamaños incluso no muy grandes, un amorphous pocket es una región desordenada del material que, en rigor, no puede ser vista como una simple acumulación de intersticiales y vacantes. Sin embargo, la designación de estas regiones como $I_m V_n$ sigue siendo válida ya que da una idea del número de intersticiales y vacantes, de su tamaño y del exceso o defecto neto de átomos.

2.5 Amorfización por implantación iónica

Cuando la concentración de dañado es muy elevada, se puede dar una situación en la que el semiconductor cristalino altamente descolocado se transforme en amorfo.

La amorfización ocurrirá si los intersticiales y vacantes generados en el proceso de dañado (por ejemplo, durante la implantación iónica) no se recombinan. Es entonces inmediato ver, a la luz de la expresión (2.44), que cuanto mayor sea la temperatura de implantación, menor número de defectos van a permanecer sin recombinarse, por lo que menor también será la amorfización.

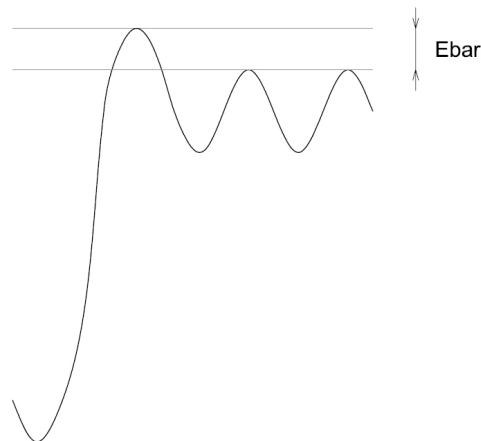


Figura 2.19: Energía de barrera para la recombinación de pares IV

El estudio de la amorfización se ha realizado tradicionalmente admitiendo la existencia de un umbral, es decir, un valor de concentración de defectos a partir del cual podemos considerar que el semiconductor se amorfiza [16].

En la figura 2.20 podemos ver una representación del resultado genérico obtenido tras una implantación iónica con parámetros adecuados. Como vemos, tras la implantación resulta una zona amorfizada. La forma indicada por la gráfica es lógica ya que la zona de dañado máximo no

está en la intercara del material. Recordemos además que la superficie es un sumidero de defectos (figura 2.29). Por otro lado, las partes más profundas tienen menos defectos por ser las menos probables de ser alcanzadas por iones. Obsérvese que la región amorfizada (la que supera el umbral mencionado anteriormente) forma una capa continua en el material. De hecho, normalmente, ésta es la condición que se suele imponer para admitir que una estructura semiconductor ha amorfizado.

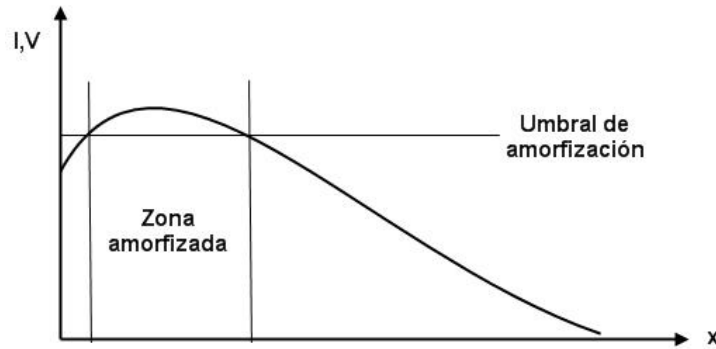


Figura 2.20: Perfil de intersticiales y vacantes tras implantar

La amorfización es importante a la hora de implantar ya que se comportan de manera muy distinta la zona amorfa y la zona cristalina de alto daño. En concreto, las zonas no amorfizadas pero con alto daño contribuyen a la difusión de dopantes, como se verá con posterioridad.

2.5.1 La solución al daño: el recocido. Recristalización

El daño y la amorfización son fenómenos no deseables desde el punto de vista de los dispositivos finales, aunque no necesariamente desde el punto de vista de la fabricación. Tras implantar, es evidente que precisamos de alguna técnica de recristalización del semiconductor. Esta técnica existe y se llama recocido o, en inglés, *annealing*.

La idea es sencilla. Simplemente se trata de aumentar la temperatura durante un tiempo suficiente. Se ha demostrado que calentar a temperaturas por encima de los 500 °C induce una transición desde la fase metaestable amorfa hacia una fase cristalina que es termodinámicamente estable.

Cuando calentamos, la recristalización de la zona amorfa se produce desde los bordes, formando un cristal perfecto. Se habla de un “frente de recristalización”, que es la interfaz entre el silicio amorfo y el cristalino y puede considerarse como la superficie que va cristalizando el material. Podemos hablar aquí de una velocidad de recristalización, que varía con la temperatura siguiendo un plot de Arrhenius:

$$v_{\text{recris}} = v_{\text{recris},0} \exp\left(-\frac{E_{\text{recris}}}{kT}\right) \quad (2.45)$$

El valor aceptado para E_{recris} es de 2,7 eV.

La idea anterior es clara partiendo de la base que existe una interfaz definida entre el silicio

cristalino y el amorfo. De no ser así, se ha demostrado que se da el fenómeno conocido como **nucleación**; es decir, las regiones de dañado se agrupan hasta alcanzar un tamaño umbral, a partir del cual crecen y capturan regiones vecinas para formar una capa continua.

El número de intersticiales y vacantes existentes en la región que amorfiza no tiene por qué ser el mismo; es decir, que podemos tener un exceso neto de alguno de estos defectos. En la figura 2.21 vemos un ejemplo gráfico de la explicación.

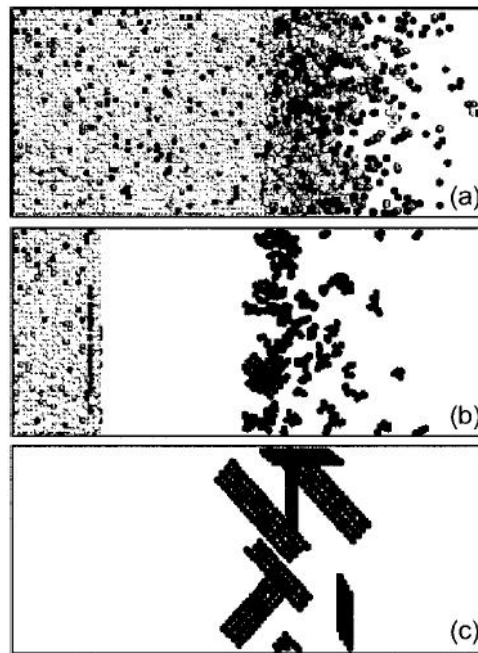


Figura 2.21: Evolución de una implantación de silicio a 5 keV [16]. Los puntos negros representan intersticiales, los grises oscuros vacantes y los grises claros, pares IV. (a) Dañado tras implantar a temperatura ambiente. (b) Dañado tras recocido a 550°C. (c) Dañado tras recocido a 800°C.

Existen ciertos parámetros que afectan a la recristalización [16]. Citamos los siguientes:

- Orientación del sustrato.
- Presencia de dopantes (fósforo, boro, arsénico, ...).
- Presencia de otras impurezas (carbono, oxígeno, gases nobles, ...).

2.5.2 El recocido dinámico

Cuanto mayor sea la temperatura de implantación, menor es el grado de amorfización puesto que hay más recombinaciones de pares IV. Por tanto, podemos ver que en todo proceso de implantación existen dos tendencias:

- La creación de defectos por el choque de iones.
- La recombinación de pares IV.

Este último proceso retarda la amorfización y se conoce con el nombre de recocido dinámico (*dynamic annealing*, en inglés). La idea fundamental es que este proceso cobra mayor importancia cuanto más alta es la temperatura. De hecho, a temperaturas muy elevadas, ocurre que el recocido dinámico es superior al dañado, por lo que el material nunca amorfiza. Podemos hablar, por tanto, de una temperatura de transición que delimita la amorfización o no del semiconductor.

2.5.3 Dependencia de la amorfización con la masa iónica

La masa atómica de los iones implantados es fundamental en la amorfización. Si mantenemos constante la energía, es evidente que iones ligeros podrán penetrar más en el material que los pesados, por lo que la densidad de defectos generados para la misma energía de implantación será menor. Un primer motivo es que su choque con átomos de la red es mucho menos probable. Sin embargo, la causa fundamental está en que, para la misma energía, los iones más ligeros adquirirán mayor velocidad, por lo que su penetración será muy superior a la de los pesados. Además, se ha visto que los iones ligeros producen dañado en forma de agregados pequeños, mientras que los iones pesados producen bloques de dañado más grande [17] (véase figura 2.22).

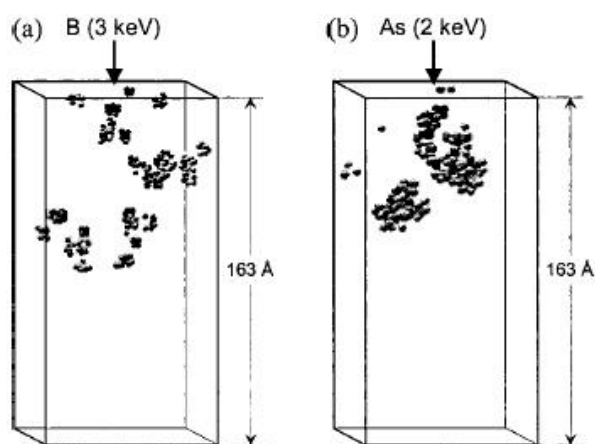


Figura 2.22: Morfología del dañado producido por sendas implantaciones de boro y arsénico [17]

2.5.4 Dependencia de la amorfización con la dosis

Cuanto mayor sea la dosis implantada, el dañado aumentará, pero esta relación no es lineal. Veámoslo en la figura 2.23.

Como puede apreciarse, el dañado crece con la dosis, como era de esperar. Sin embargo, se distinguen tres regiones claras.

Región I. La dependencia es sublineal. Como se están implantando pocos iones, se dan muchas recombinaciones de pares IV a temperatura ambiente.

Región II. Se trata de una dependencia superlineal. La idea aquí es que se están creando estructuras que acumulan el dañado, por eso éste crece muy deprisa. Lo que Holland [19] pensaba que eran divacantes (V_2) al final parece que son amorphous pockets [15]. Nótese

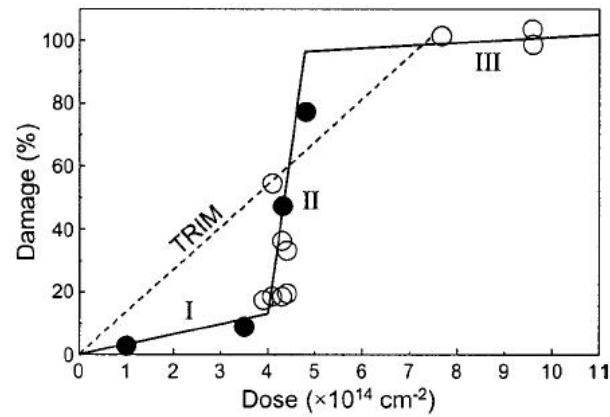


Figura 2.23: Dependencia del dañado con la dosis de implantación a temperatura ambiente [18]

que esta región es muy estrecha en cuanto a rango de dosis, por lo que se puede hablar de una dosis umbral que marca la amorfización del semiconductor.

Región III. El material está amorfizado, por lo que presenta una variación prácticamente plana con la dosis.

Dependencia de la dosis crítica con la masa atómica

Como ya dijimos con anterioridad, los iones de masa atómica más elevada producen un daño más intenso que los ligeros, para una misma energía de implantación. Esto implica necesariamente que la dosis necesaria para amorfizar debe ser mayor cuanto menor sea la masa atómica del ion. La figura 2.24 clarifica este razonamiento. Por la misma razón, también se ha demostrado que los iones poliatómicos producen un daño superior a los monoatómicos con el mismo número total de átomos. La causa es la misma.

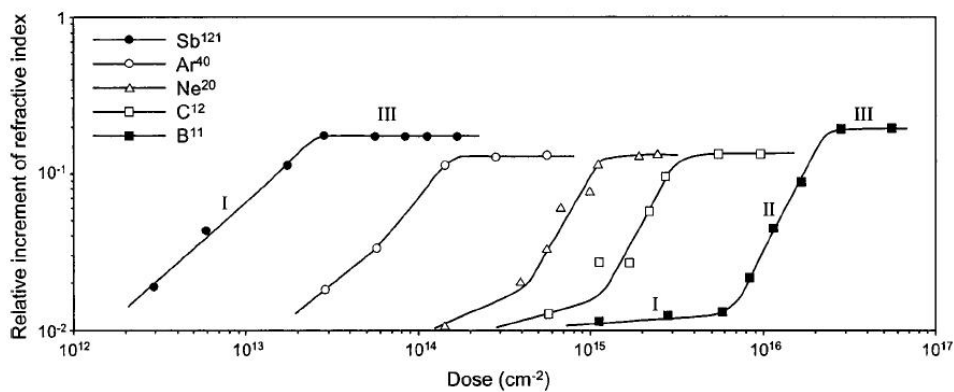


Figura 2.24: Dependencia del dañado con la dosis de implantación a temperatura ambiente para distintos iones [20]

Dependencia de la dosis crítica con la energía de implantación

Se ha demostrado que la dosis crítica apenas depende de la energía de implantación. La causa de esto está en que la amorfización es función, fundamentalmente, de la densidad del dañado. Por tanto, implantaciones poco energéticas producen poco dañado en un volumen pequeño (escasa penetración), mientras que implantaciones de mucha energía penetran mucho en el material. El resultado es una concentración de defectos prácticamente constante en todos los casos.

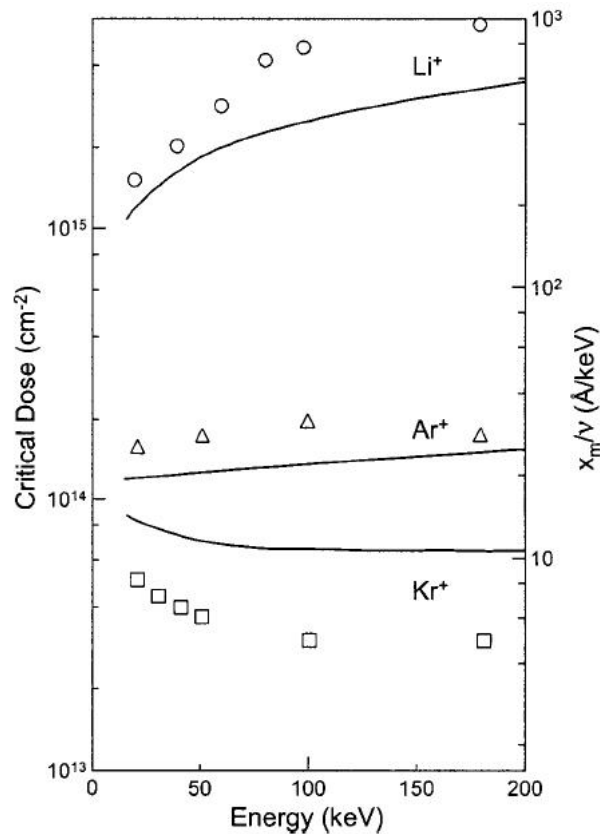


Figura 2.25: Dependencia de la dosis crítica con la energía de implantación [21]

En la figura 2.25 se puede ver un ejemplo del razonamiento expuesto. Como se ve, las curvas son constantes, aunque para el caso de iones ligeros como el litio, existe una pequeña curvatura. La causa de este fenómeno está en los distintos tipos de pérdidas que sufren los iones. No profundizaremos más en este aspecto; el lector interesado puede encontrar información adicional en [16].

Dependencia de la dosis crítica con la temperatura

Como ya vimos, existen dos procesos que compiten en toda implantación: la amorfización y el recocido dinámico. La temperatura es un factor crítico, puesto que favorece las recombinaciones IV.

En la figura 2.26 se puede ver que, a medida que aumentamos la temperatura de implantación, aumenta la dosis crítica (obsérvese el caso del neón, que es el material presente en las tres

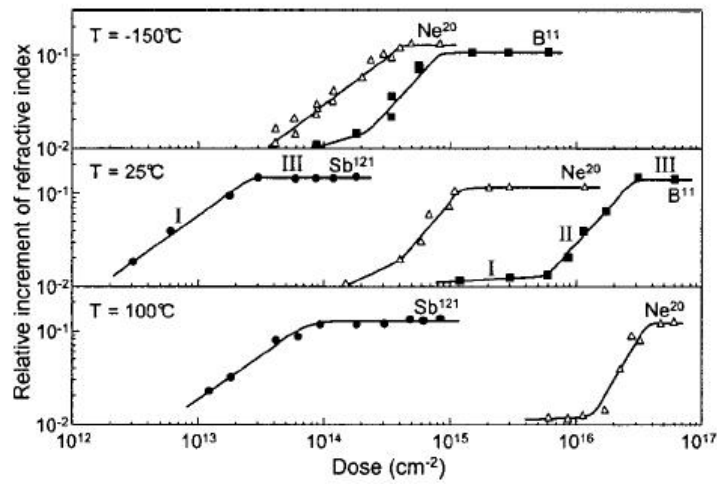


Figura 2.26: Dependencia de la dosis crítica con la temperatura (I) [20]

gráficas). Esto es lógico puesto que, al aumentar la temperatura, se favorece el recocido.

Además, a temperaturas muy bajas, se ha visto que la dosis crítica es prácticamente constante. Este parámetro, pues, presenta una tendencia asintótica. El recocido dinámico en este caso es casi inexistente. Véase figura 2.27, donde además se puede apreciar la dependencia de la dosis crítica con la masa atómica, aspecto que ya se comentó anteriormente.

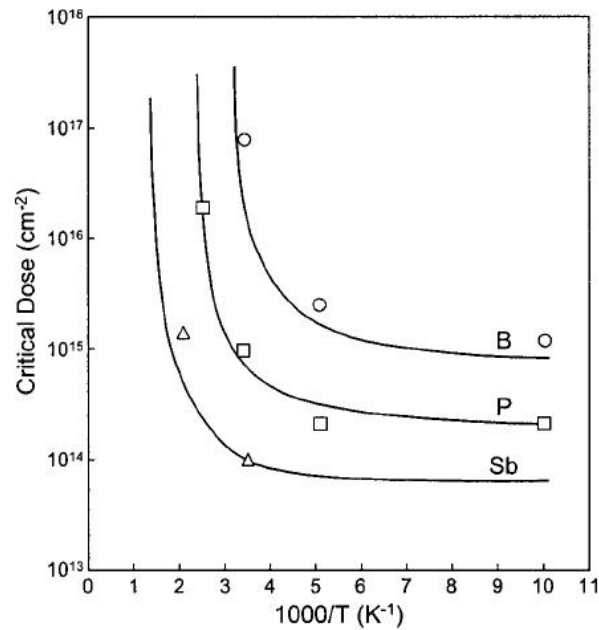


Figura 2.27: Dependencia de la dosis crítica con la temperatura (II) [22]

2.5.5 Dependencia de la amorfización con la tasa de implantación

En la figura 2.28 se muestra esta temperatura para diversos materiales implantados en silicio a 80 KeV con una dosis de $1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. Apréciase que la temperatura de transición aumenta con la tasa de implantación ya que, a mayor tasa, el daño es superior, por lo que se precisa de más recocido dinámico para contrarrestar el efecto de la amorfización. También es importante decir que cuanto mayor es la tasa de implantación, mayor acumulación de daño se producirá por el solapamiento de cascadas.

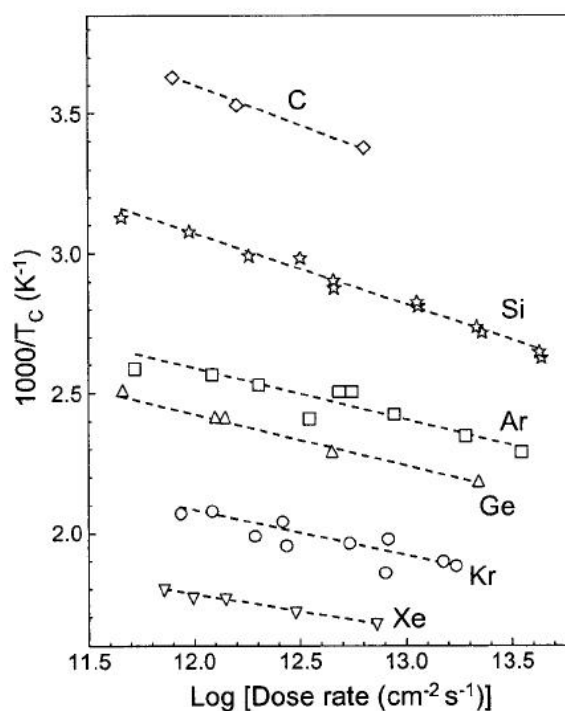


Figura 2.28: Temperaturas de transición en función de la tasa de implantación [23]

2.6 Procesos atomísticos derivados de la implantación

Partiremos de la situación en la que hemos implantado un dopante genérico A en silicio cristalino y hemos hecho un breve recocido para eliminar prácticamente todas las vacantes. La configuración atómica aparece representada en la figura 2.21(c).

Como vemos, en la región próxima a la superficie tenemos cierta concentración de intersticiales móviles, debida al hecho de que la intercara es un sumidero de los mismos. Muy alejada de la superficie aparece una nueva zona donde todos los defectos (no extensos) son inmóviles, y la llamaremos *bulk*. En una situación intermedia, tenemos una región donde hay 311's y clusters de intersticiales. Estudiemos cada región por separado.

2.6.1 Regiones del material

Región con 311's

En general, ya hemos visto que, si el dopante se difundía asistido por intersticiales, su difusividad en condiciones de no equilibrio era proporcional a la difusividad del mismo en equilibrio y el factor de proporcionalidad era justamente la supersaturación de intersticiales:

$$\frac{D_A}{D_A^*} = \frac{C_I}{C_I^*} \quad (2.46)$$

La concentración de intersticiales libres, C_I en las proximidades de los 311's va a estar controlada por su energía de ligadura $E_{b,\{311\}}$. De este modo:

$$C_I = C_{I,0}^{\{311\}} \exp\left(-\frac{E_{b,\{311\}}}{kT}\right) \quad (2.47)$$

donde $C_{I,0}^{\{311\}}$ dependerá del prefactor de la frecuencia de emisión de los 311's o de su volumen de captura. Por tanto, la supersaturación asociada a los 311's será:

$$\frac{C_I}{C_I^*} = \frac{C_{I,0}^{\{311\}}}{C_{I,0}^*} \exp\left(\frac{E_{fI} - E_{b,\{311\}}}{kT}\right) \quad (2.48)$$

La energía de formación de los intersticiales es muy superior a la energía de ligadura, mientras que $C_{I,0}^{\{311\}}$ va a ser, a lo sumo, un par de órdenes de magnitud inferior a $C_{I,0}^*$. Por tanto, la concentración de intersticiales es mucho mayor que la de equilibrio, generando pues un alto valor para la supersaturación. Aunque ya vimos que la energía de ligadura depende del tamaño del defecto extendido, para defectos 311 grandes, $E_{b,\{311\}}$ es aproximadamente constante (del orden de 2,6 a 2,8 eV). En consecuencia, la energía de activación de la supersaturación va a ser $-(E_{fI} - E_{b,\{311\}}) \approx -1,2 \text{ eV}$.

En el caso de que la población de clusters y defectos 311 presenten una distribución poco homogénea de tamaños (con clusters pequeños y defectos 311), la supersaturación vendrá controlada en primera aproximación por los clusters de menor energía de ligadura (es decir, los de mayor frecuencia de emisión) existentes en cada instante del proceso de recocido.

Bulk

En el *bulk*, la concentración de intersticiales apenas varía con la profundidad, dado que el flujo de los mismos es despreciable. Esto se debe a que la superficie posterior está demasiado alejada y a que hay muy pocas recombinaciones IV en el volumen.

Cerca de la superficie

De momento, supondremos por sencillez que el punto $x = 0$ (donde se sitúa la superficie) corresponde con un sumidero perfecto, es decir, $C_I(x = 0) = C_I^*$. Denotando por J_I al flujo de intersticiales, en zonas próximas a la superficie, podemos hacer una aproximación lineal como sigue:

$$J_I = -D_I \nabla C_I = -D_I \frac{C_I - C_I^*}{r_p} \quad (2.49)$$

Donde r_p es el rango proyectado de la implantación, que coincidirá aproximadamente con la profundidad de los defectos 311 (véase figura 2.29).

2.6.2 El modelo “+1”

El modelo “+1” es una teoría sencilla que exponemos a continuación. Cuando implantamos un átomo, se producen dos fenómenos. En primer lugar, se generan pares IV en la cascada. Por otro lado, se genera un intersticial extra (“+1”), resultado de que el dopante desaloja a un átomo de silicio.

Se pueden hacer algunos comentarios al respecto acordes con este modelo. En primer lugar, al principio, la recombinación de pares IV tiene lugar en el volumen. Por otro lado, el exceso de intersticiales (inmóviles y procedentes de clusters y 311's) se recombinan en la superficie. Ya por último, es muy importante notar que la difusión de especies que se difunden por intersticiales se debe al intersticial en exceso.

2.6.3 Ostwald ripening

Ostwald ripening es un mecanismo por el cual, al cabo de cierto tiempo, pasamos de tener muchos clusters pequeños a pocos grandes, dado que se van fusionando unos con otros. La causa física de este fenómeno reside en dos conceptos:

- Los clusters grandes tienen energías de *binding* algo mayores, por lo que son más estables.
- Los clusters pequeños pueden desaparecer por disolución, y este proceso es irreversible.

2.6.4 Evolución en el número de intersticiales en 311's

En la práctica, las concentraciones de intersticiales en equilibrio, intersticiales móviles e inmóviles se diferenciarían en varios órdenes de magnitud pero, por claridad, han sido representadas con valores parecidos.

La concentración total de intersticiales por unidad de área, $C_{I,total}^a$ será prácticamente igual a la concentración de intersticiales inmóviles, en defectos 311's y clusters menores.

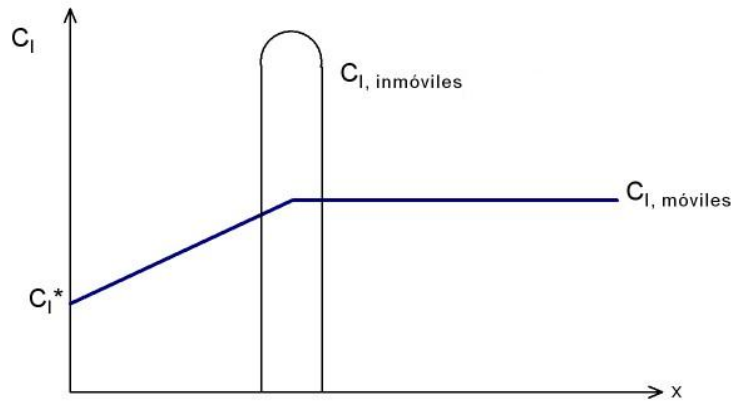


Figura 2.29: Concentración de intersticiales en función de la profundidad tras la implantación. Se admite una superficie ($x = 0$) de comportamiento ideal

Supondremos que se cumple (2.49) y que la concentración de intersticiales libres es muy superior a la de equilibrio. Entonces:

$$\frac{\partial C_{I,\text{total}}^a}{\partial t} \simeq -J_I = -D_I \frac{C_I - C_I^*}{r_p} \simeq -D_I \frac{C_I}{r_p} \quad (2.50)$$

Recordando (2.47), podemos llegar a lo que sigue:

$$C_I^a(0) - C_I^a(t) = \frac{D_{I,0} C_{I,0}}{r_p} \exp\left(-\frac{E_{mI} + E_{b\{311\}}}{kT}\right) t \quad (2.51)$$

El término de la izquierda representa la concentración de intersticiales en la región de los clusters que se han ido, por unidad de área, al cabo de un tiempo t . Nos preguntamos cuánto tiempo tiene que pasar para que desaparezcan todos (disolución de los clusters), matemáticamente, $C_I^a(t_f) = 0$. A partir de (2.51) es inmediato:

$$t_f = \frac{C_I^a(0) r_p}{D_{I,0} C_{I,0}} \exp\left(\frac{E_{mI} + E_{b\{311\}}}{kT}\right) \quad (2.52)$$

Y si aplicamos el modelo “+1”, el número de intersticiales por unidad de área justo después de la implantación, $C_I^a(0)$, debe coincidir con la dosis implantada. En conclusión, el tiempo que tardan en disolverse los clusters depende de:

- Dosis. A mayor dosis, mayor tiempo.
- r_p . Este parámetro depende de la energía de implantación de manera creciente. A mayor energía, mayor r_p y, en consecuencia, mayor tiempo.
- $\exp\left(\frac{E_{mI} + E_{b\{311\}}}{kT}\right)$. A mayor temperatura, menor tiempo.

Si representamos la concentración de intersticiales en la región A en función del tiempo, parametrizando para distintas temperaturas se puede ver que llegamos a unas gráficas como las mostradas en la figura 2.30, donde $T_{i+1} > T_i$. Nótese que el tiempo final es el corte con el eje de abscisas (concentración nula) y se cumple que es decreciente con la temperatura.

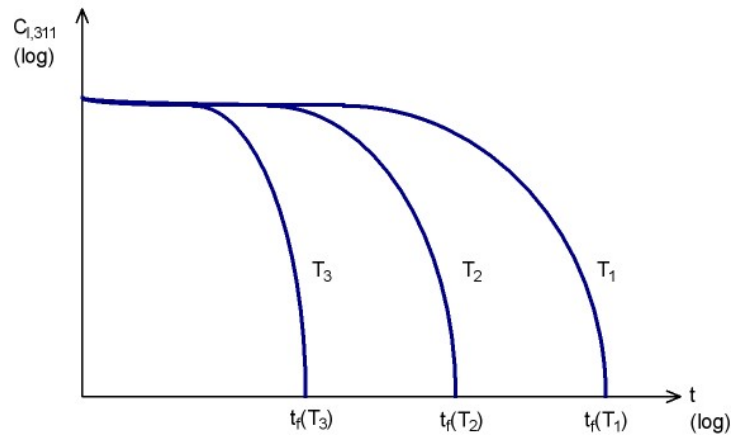


Figura 2.30: Concentración de intersticiales en función del tiempo

De acuerdo con (2.52), la energía de activación para la disolución de los 311's es ($E_{\text{act}\{311\}} = E_{mI} + E_{b\{311\}} \simeq 3,6 \text{ eV}$). Si $E_{b\{11\}}$ dependiese del tamaño de los clusters, los resultados se modificarían ligeramente, dando lugar a decaimientos no lineales con el tiempo, pero cualitativamente el mecanismo sería idéntico.

2.6.5 Evolución temporal de la supersaturación

La supersaturación de intersticiales está dada por la gráfica de la figura 2.31. Nótese que al comienzo, tras la implantación, la mayoría de los intersticiales son móviles. Estas partículas van formando pequeños clusters, metaestables (con alta supersaturación puesto que su energía de ligadura es baja), que evolucionan hacia defectos en planos 311 (baja la supersaturación por tener estas estructuras energías de ligadura superiores). Más adelante, en el recocido, se produce la disolución de estas estructuras, desplazándonos hacia valores muy bajos de supersaturación.

En cuanto a la supersaturación de vacantes, se cumple que estas partículas migran más rápidamente puesto que su energía de migración es menor, y lo hacen hacia la superficie (sumidero). Por esta razón, no se forman clusters de vacantes. La situación se ve gráficamente en la figura 2.32.

2.6.6 Efecto de la no idealidad de la superficie

A lo largo de esta sección se han hecho diversas aproximaciones para calcular el flujo de intersticiales hacia la superficie. En primer lugar, se ha supuesto que la superficie es un sumidero perfecto; es decir, que elimina todos los intersticiales y vacantes que le llegan. Por otro lado, no hemos tenido en cuenta la posible existencia de clusters de vacantes remanentes en la zona más superficial. Veremos a continuación la posible influencia de estos dos efectos.

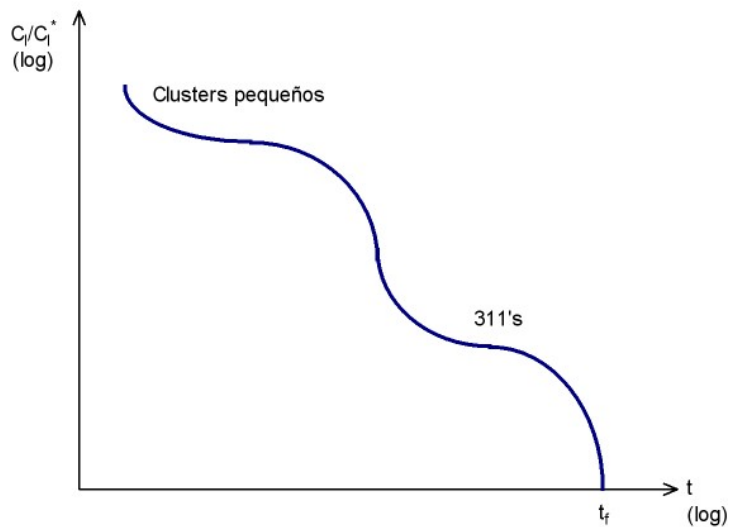


Figura 2.31: Supersaturación de intersticiales en función del tiempo

La superficie como sumidero no perfecto

En primer lugar, si la superficie no es un sumidero perfecto, en realidad la concentración de intersticiales en la misma ($x = 0$) no es la de equilibrio (C_I^*), sino algo superior. Para modelar este fenómeno se suele definir la **longitud de recombinación** como aquella longitud a la que tendría que encontrarse la superficie para que la concentración de intersticiales fuese la de equilibrio, admitiendo que la concentración de intersticiales varía de manera lineal con la profundidad. La figura 2.33 clarifica la explicación.

En expresiones anteriores se ha deducido que:

$$\text{flujo} \propto D_I \frac{C_I - C_I^*}{r_p + L_r} \quad (2.53)$$

El flujo es menor pero si se cumple que $r_p \gg L_r$, la variación respecto al caso ideal no es demasiado significativa.

Presencia de clusters de vacantes y voids cercanos a la superficie

La situación en presencia de clusters de vacantes y voids (ver sección 2.2.2) es parecida al caso anterior pero al revés, pudiéndose definir una “distancia de voids” tal y como muestra la figura 2.34.

En este caso, el flujo es mayor pero no demasiado distinto si $r_p \gg d_{\text{voids}}$. De hecho, los voids, en caso de existir, se encuentran muy cerca de la superficie.

$$\text{flujo} \propto D_I \frac{C_I - C_I^*}{r_p - d_{\text{voids}}} \quad (2.54)$$

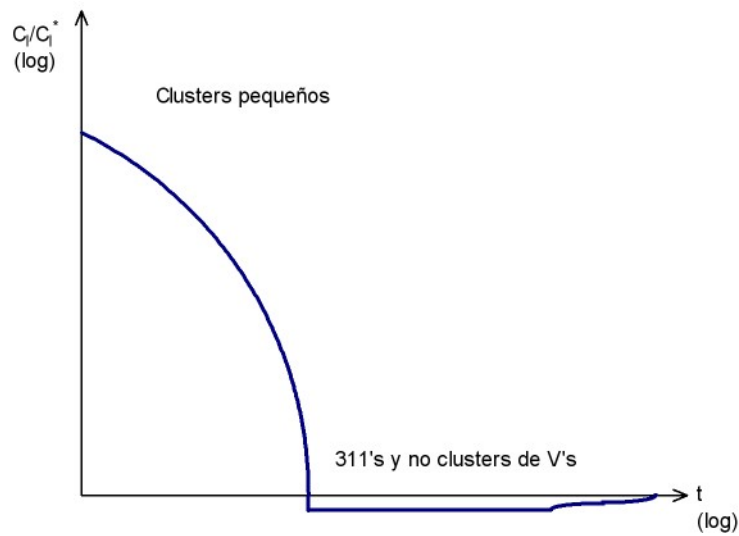


Figura 2.32: Supersaturación de vacantes en función del tiempo

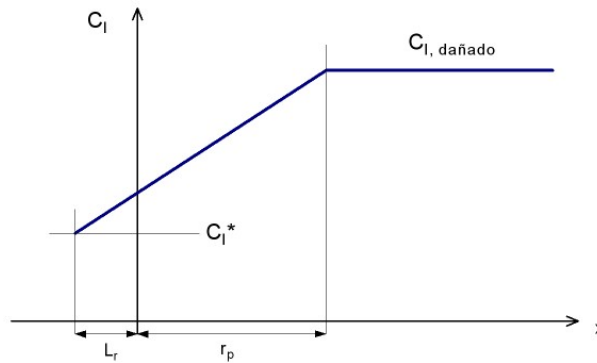


Figura 2.33: Longitud de recombinación

2.7 TED (Transient Enhanced Diffusion)

La difusión anómala transitoria (TED, *Transient Enhanced Diffusion*) se define como el aumento de la difusividad de los dopantes vía intersticiales en el recocido posterior a un proceso de implantación. Se debe a la alta supersaturación de intersticiales.

Una vez que la TED ha terminado, la difusividad total del dopante depende sobre todo del exceso de intersticiales. De manera sencilla se aplica el modelo “+1”, que ya comentamos. Sin embargo, podemos refinar introduciendo un modelo más genérico que es el “+n”.

2.7.1 El modelo +n

El modelo “+1” explica de manera muy sencilla los mecanismos que tienen lugar en la implantación de un dopante en silicio. Sin embargo, presenta un problema, que es el asociado al estudio de la TED para iones de distinta masa atómica. Según el modelo “+1”, la masa iónica no es un parámetro influyente en la TED ya que lo que verdaderamente importa es el hecho de que

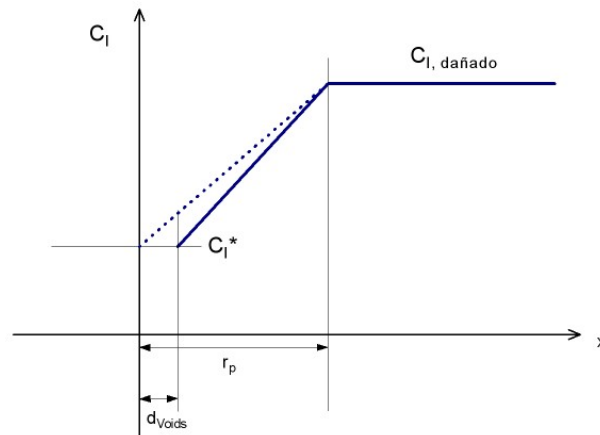


Figura 2.34: Distancia de *voids*

por cada ion implantado se crea un intersticial extra.

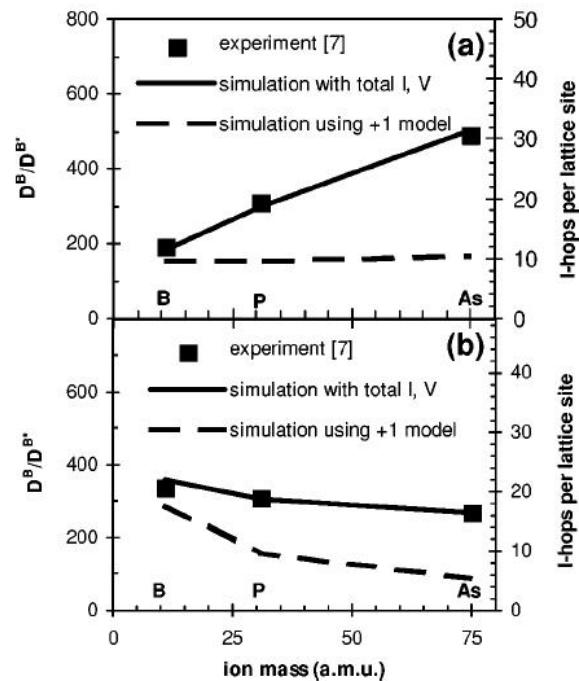


Figura 2.35: Difusividad relativa en función de la masa del ión implantado [24]

En la figura 2.35 podemos ver los resultados teóricos y prácticos. En línea discontinua se muestran los resultados teóricos con el modelo “+1”, es decir, ninguna dependencia con la masa iónica. Sin embargo, los experimentos demuestran que la TED presenta una tendencia creciente con la masa.

La explicación a esto es sencilla. El modelo “+1” no tiene en cuenta que durante la implantación, además de intersticiales en exceso, se crean pares de Frenkel, que también contribuirán en cierta medida (debido al intersticial del par) a la difusión del boro. Cuando mayor sea el tamaño del ion, más intersticiales y vacantes se crearán en la implantación (para una misma energía), generando pues, un aumento de la TED.

El modelo “+1” funcionaba bien con dopantes ligeros, como el boro, para los cuales el dañado extra que podía contribuir a la TED era despreciable. El concepto del modelo “+n” [24], define éste como el cociente entre el número medio de saltos de intersticiales con el modelo de dañado total y el número medio de saltos de intersticiales con el modelo “+1”. En la tabla 2.2 se muestran los valores del parámetro “+n” para distintos dopantes. Apréciese cómo el valor “+n” aumenta con la masa del ion implantado.

Tabla 2.2: Valores del parámetro “+n” para distintos iones [24]

| Dopante | +n |
|---------|------|
| B | +1,2 |
| P | +1,8 |
| As | +2,7 |

2.7.2 Dependencia de la TED con la dosis

En la gráfica 2.36 se muestra el factor “+n” para distintas dosis. Observamos que, para dosis muy bajas, la TED es elevada mientras que es baja para dosis altas. La causa está en que, para las dosis habituales, el número de cascadas producidas por la implantación iónica es elevado, por lo que se solapan, favoreciendo la recombinación de pares IV. Por tanto, la difusión de dopantes se ajusta bastante bien al modelo “+1”. Sin embargo, para dosis muy bajas, las cascadas son prácticamente independientes, lo cual favorece que intersticiales y vacantes puedan escapar de las mismas hacia zonas cristalinas, difundiendo dopantes ($+n \gg +1$, ver figura 2.36) [25].

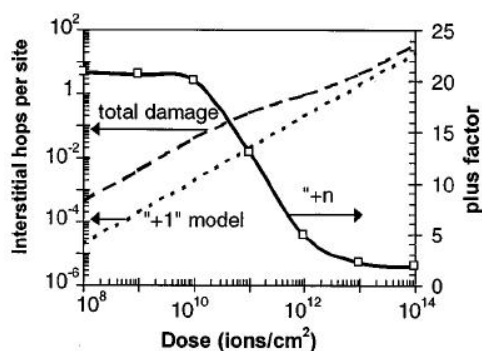


Figura 2.36: Saltos de intersticiales por sitio de red en función de la masa del ión implantado [25]

2.7.3 Dependencia de la TED con la temperatura

Cuando se realiza implantación a baja temperatura, existe un alto dañado que impide a los intersticiales y vacantes escapar de él, por lo que la TED será baja. Sin embargo, cuando la temperatura es elevada, los intersticiales y vacantes se difunden más rápidamente, por lo que hay una mayor TED [25]. Este razonamiento es importante puesto que podríamos pensar en la implantación a alta temperatura para evitar la amorfización, pero el problema de la difusión de dopantes dificulta el proceso.

En la figura 2.37 se muestra la variación de la TED en función de la temperatura. Nótese

que la TED, expresada en número de saltos de intersticiales por sitio de red, es prácticamente constante para un rango amplio de temperaturas de implantación y, en particular, para $T < 500$ °C.

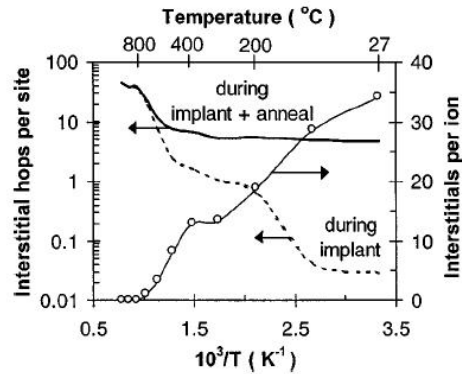


Figura 2.37: Saltos de intersticiales por sitio de red en función de la temperatura [25]

2.7.4 Dependencia de la TED con la tasa de implantación

En la figura 2.38 se muestra la variación de la TED con la tasa de implantación para distintas temperaturas. La situación aquí es similar a la que se da para la dosis. Cuando la tasa es baja, las cascadas pueden suponerse estadísticamente independientes [8], lo cual se asemeja a la situación de dosis baja (TED alta). Cuando la tasa de implantación es alta, las cascadas se solapan porque se generan de manera muy frecuente; la situación provoca una disminución de la TED [25].

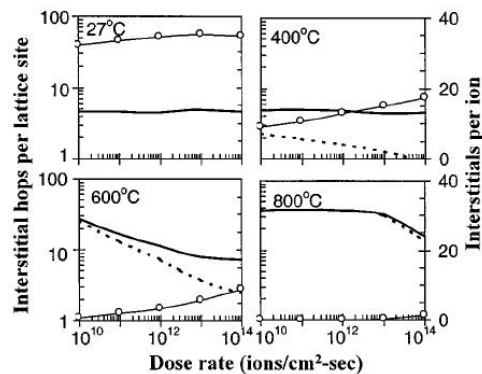


Figura 2.38: Saltos de intersticiales por sitio de red en función de la tasa de implantación [25]

2.8 Complejos binarios

Los complejos binarios son agregados formados por uno o más intersticiales o vacantes y uno o más iones de dopantes. Los dopantes sustitucionales son eléctricamente activos (actúan como donores o aceptores de electrones), mientras que los complejos binarios son inmóviles e inactivos.

En esta sección estudiaremos los complejos binarios de boro y arsénico, por ser ejemplos clásicos.

2.8.1 Clusters y desactivación eléctrica del boro

Clustering del boro

Como ya hemos visto, durante el transitorio inicial, la concentración de intersticiales libres es muy superior que la de 311's. Por ello, en este breve espacio de tiempo será mucho más probable que varios intersticiales interaccionen con un átomo de dopante. Es decir, supongamos que un boro sustitucional se une a un intersticial para formar un boro intersticial ($I + B_s \rightarrow B_i$). Antes de que rompa el B_i , puede unirse a un intersticial para formar un nuevo complejo ($I + B_i \rightarrow BI_2$). A su vez, este nuevo complejo, antes de romperse, puede unirse a un recién formado boro intersticial para formar otro agregado, ($BI_2 + B_i \rightarrow B_2I_3$). Es decir, se está produciendo un fenómeno conocido como *clustering*. Para que ello ocurra son necesarias dos condiciones:

- Debe haber una alta concentración de intersticiales libres, es decir, durante el transitorio inicial después de la implantación y hasta el comienzo del recocido.
- Debe haber una alta concentración de boro, dado que se ha visto que los clusters con poca proporción de boro son demasiado poco estables y no prosperan. En general se suele imponer la condición cuantitativa de que la concentración de boro debe ser superior a 10^{19} cm^{-2} .

En estas condiciones, el boro apenas se difunde, a pesar de que la concentración de intersticiales es muy elevada. La causa está en que se queda atrapado por clusters, que son inmóviles.

Experimentos con *spikes* de boro

Supongamos un perfil de boro como el mostrado en la figura 2.39 en color azul⁴. A esta estructura se la conoce típicamente con el nombre de *spike*. Admitiremos que la concentración de boro es suficientemente elevada. Si hacemos un recocido, pero no implantación, la *spike* se difunde ligeramente por la presencia de intersticiales, pero muy poco (gráfica en color rojo).

Introduzcamos dañado, por ejemplo, mediante una implantación de silicio⁵. La figura 2.40 muestra el resultado tras el recocido. Como vemos, la difusión aquí es mucho mayor dado que existe una supersaturación de intersticiales muy superior.

La figura 2.41 muestra un conjunto de *spikes* de boro bombardeadas con silicio. Como se aprecia en la gráfica inferior, las cascadas de silicio llegan hasta unos 4500 nm. En esa zona, se produce el *clustering* del boro puesto que es una región rica en intersticiales (y en boro). Sin embargo, en las zonas más profundas, donde no llegan los intersticiales, el foro queda sustitucional y eléctricamente activo. Por lo tanto, vemos que lo que realmente clusteriza son las cascadas.

⁴Este perfil puede ser creado, por ejemplo, por MBE (*Molecular Beam Epitaxy*).

⁵Lo hacemos así para ver que no cambiamos la base de trabajo. Simplemente se introduce dañado de esta forma.

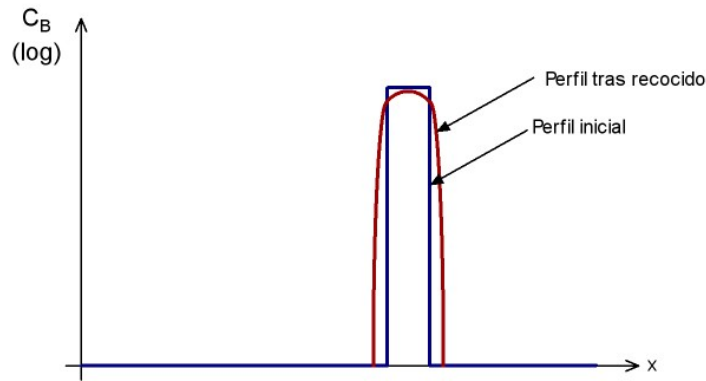


Figura 2.39: *Spike* de boro sin implantación

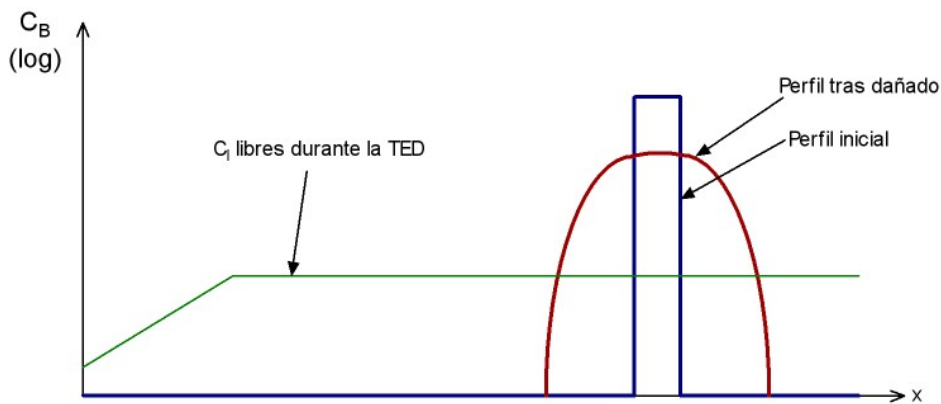


Figura 2.40: *Spike* de boro con implantación

El boro inactivo que permanece en la región de la *spike* puede presentarse en dos configuraciones: en clusters o como boro intersticial⁶. Dado que se trata, además, de partículas inmóviles, es evidente que el boro se almacena en forma de clusters del tipo B_nI_m .

El proceso de *clustering* no es trivial y ha sido objeto de intenso estudio. Se ha propuesto que, al comienzo de la implantación, se forman complejos de tipo BI_2 , formados a partir de un intersticial y un boro intersticial [27]. Sin embargo, el complejo BI_2 es simplemente un precursor[26]. No es una estructura estable a lo largo del proceso de recocido. En concreto, durante el recocido, los precursores van capturando boros intersticiales manteniendo una proporción similar de los mismos (BI_2 , B_2I_3 , B_2I_2 , B_3I_3 , B_4I_4 , etc.). También se ha observado que clusters con tamaño más grande que estos últimos no se forman, bien porque sean poco estables o bien porque haya algún tipo de barrera energética [27]. En la figura 2.42 se muestra el proceso seguido.

Una vez que hemos llegado a las estructuras más grandes, comienza la disolución de los clusters. En concreto, se van liberando intersticiales, permaneciendo complejos ricos en boro. Estas últimas estructuras se disolverán finalmente tras tiempos de recocido largos. La disolución estará asistida por intersticiales y será lenta ya que cuando se forman los clusters tipo B_mI_n (con $n = 0$ ó 1), la concentración de intersticiales ya es muy baja.

⁶Pelaz *et al.* demostraron que el boro no puede estar en grandes clusters de intersticiales o vacantes [27]

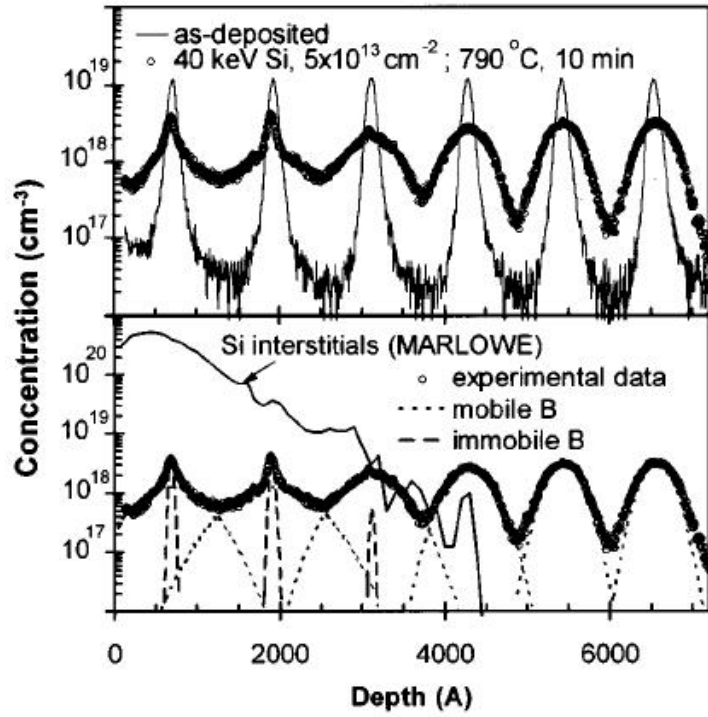


Figura 2.41: *Spikes* de boro con implantación tras recocido [26]

Frecuencias de emisión

Las frecuencias de emisión de partículas de los clusters de boro, $B_n I_m$, vienen dadas por los ya clásicos plots de Arrhenius, con las siguientes energías de activación:

Emisión de un intersticial. $B_n I_m \rightarrow B_n I_{m-1} + I$, se cumple:

$$E_{act} = E_{b,I}(n, m) + E_{mI} \quad (2.55)$$

Emisión de un B_i . $B_n I_m \rightarrow B_{n-1} I_{m-1} + B_i$, se cumple:

$$E_{act} = E_{b,B_i}(n, m) + E_{mB_i} \quad (2.56)$$

Donde, finalmente, las energías de ligadura de los complejos vienen dadas por:

$$\begin{aligned} E_{b,I}(n, m) &= E_f(B_n I_{m-1} + I) - E_f(B_n I_m) \\ &= E_f(B_n I_{m-1}) + E_{fI} - E_f(B_n I_m) \end{aligned} \quad (2.57)$$

$$E_{b,B_i}(n, m) = E_f(B_{n-1} I_{m-1}) + E_f(B_i) - E_f(B_n I_m) \quad (2.58)$$

Por lo que, si conocemos las energías de formación de los complejos, y las de ligadura del intersticial y del boro intersticial simples, podremos conocer las energías de ligadura de intersticial y boro intersticial en complejos.

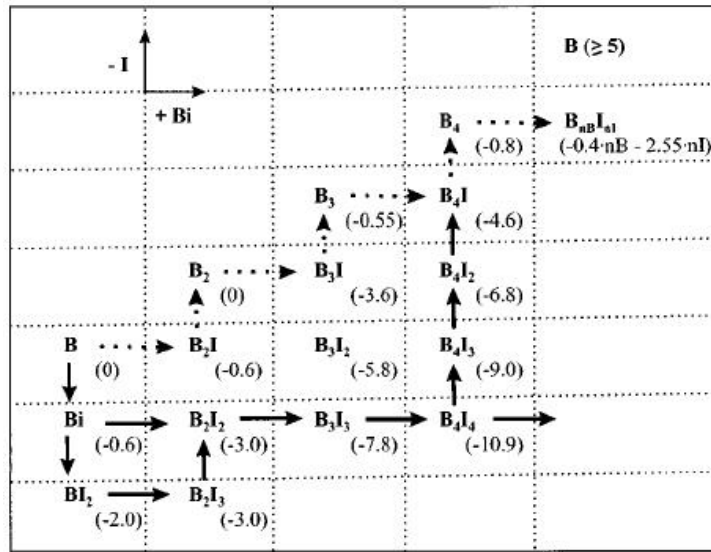


Figura 2.42: Clustering del boro (línea continua) [27]

2.8.2 Clusters y desactivación eléctrica del arsénico

El arsénico es un ion de masa elevada por lo que fundamentalmente se difundirá por vacantes. El proceso de difusión de este material está detalladamente descrito en [28].

Supongamos una situación análoga a la del boro anterior: Arsénico crecido sobre silicio al que se bombardea con átomos de silicio. Al principio, todos los átomos de arsénico son sustitucionales y, por tanto, eléctricamente activos. Se ha demostrado que la energía potencial de los clusters pequeños de arsénico, As_2 , As_3 y As_4 es idéntica [28], por lo que se crearán estas estructuras. Una vez creados, comienzan a crearse intersticiales puesto que (2.59) es energéticamente favorable, especialmente para el caso del As_3V y el As_4V .



Una vez generados los intersticiales, se difunden interactuando con átomos de arsénico sustitucional, creando pares arsénico intersticial, que son móviles. Estos pares interactúan con los clusters de arsénico vacante según (2.60), haciéndolos crecer. De hecho, la reacción propuesta es energéticamente muy favorable.



Recuérdese que los átomos de arsénico que permanecen en clusters son eléctricamente inactivos. Se ha visto que este proceso de desactivación mostrado es asistido por la creación de las estructuras As_3V y As_4V y es, además, lento. Véase figura 2.43.

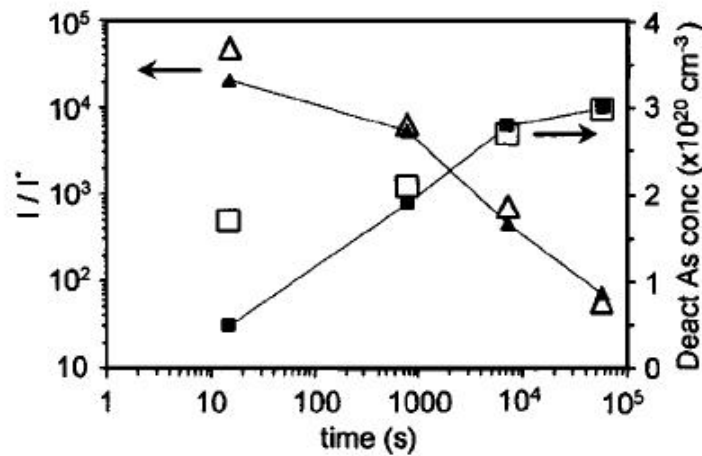


Figura 2.43: Desactivación eléctrica del arsénico [28]

2.8.3 Difusión y *clustering* del carbono. Mecanismo de Frank-Turnbull

El carbono es un material de reciente interés en la industria microelectrónica, ya que se ha demostrado que actúa como trampa de intersticiales, evitando la TED de algunos dopantes. En este modelo veremos cómo se difunde por el silicio y las estructuras que forma. Información adicional puede encontrarse en [7].

Para explicar los mecanismos asociados al carbono, se introducen dos reacciones de interés. La primera de ellas, (2.61), es el ya conocido *kick-out*, consistente en la creación de un carbono intersticial a partir de uno sustitucional. El segundo, (2.62), consiste en la formación de un par IV, del cual el intersticial se une al carbono por *kick-out* y la vacante queda libre. Este mecanismo se denomina de Frank-Turnbull. Como es lógico, el primer proceso es dominante sobre el segundo a temperaturas de recocido puesto que el mecanismo de Frank-Turnbull requiere una alta energía de activación, en concreto, $E_{FT} = E_{fV} + E_{fI} - E_{b,C_i} + E_{mV} = 6,64$ eV.



El proceso de *clustering* del carbono se produce como se expone a continuación. En su migración, el carbono intersticial actúa con carbono sustitucional para formar el complejo C_2I . Éste, a su vez, puede romperse emitiendo un carbono intersticial ($C_2I \rightarrow C_i + C_s$) o un intersticial ($C_2I \rightarrow C_2 + I$). Estos pequeños clusters pueden crecer capturando intersticiales (2.63) o carbonos intersticiales (2.64).





Pero hay un tercer mecanismo, que es la extensión de Frank-Turnbull a complejos de carbono-intersticial:



En este caso, la reacción (2.65) se producirá cuando la energía de *binding* (diferencia entre energías potenciales del complejo origen al complejo formado) sea positiva y suficientemente elevada para compensar la energía necesaria para crear el par IV.

En cuanto a los clusters formados, se ha comprobado que aquellos con igual cantidad de carbono que de silicio ($C_n I_n$) son los más estables en términos energéticos. Sin embargo, en términos estructurales, dado que el carbono es un átomo más pequeño que el silicio, la conclusión final es que los clusters más estables son aquellos que tienen un contenido bajo en intersticiales, como por ejemplo, $C_3 I_2$ ó $C_4 I_2$. La figura 2.44 muestra el *clustering* del carbono, con los complejos creados durante el proceso.

| | | | | | |
|-------------------------|--------------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| C_5 | C_2 | C_3 | C_4 | C_5 | C_6 |
| $Cl \equiv C_i$ -1.5 | $C_5 C_i \equiv C_2 I$ -2.3 | $C_3 I$ | $C_4 I$ | $C_5 I$ | $C_6 I$ |
| Cl_2 | $C_2 I_2$ | $C_3 I_2$ | $C_4 I_2$ | $C_5 I_2$ | $C_6 I_2$ |
| Cl_3 | $C_2 I_3$ | $C_3 I_3$ | $C_4 I_3$ | $C_5 I_3$ | $C_6 I_3$ |
| Cl_4 | $C_2 I_4$ | $C_3 I_4$ | $C_4 I_4$ | $C_5 I_4$ | $C_6 I_4$ |
| Cl_5 | $C_2 I_5$ | $C_3 I_5$ | $C_4 I_5$ | $C_5 I_5$ | $C_6 I_5$ |
| Cl_6 | $C_2 I_6$ | $C_3 I_6$ | $C_4 I_6$ | $C_5 I_6$ | $C_6 I_6$ |

Energy values (eV) for various clusters are indicated in the diagram:

- C_5 : 0
- C_2 : -1.2
- C_3 : -1.7
- C_4 : -2.5
- C_5 : -13
- C_6 : -25.4
- $C_2 I_2$: -7
- $C_3 I_2$: -9.7
- $C_4 I_2$: -12.5
- $C_5 I_2$: -13
- $C_6 I_2$: -13
- $C_3 I_3$: -11.5
- $C_4 I_3$: -13.7
- $C_5 I_3$: -13
- $C_6 I_3$: -13
- $C_4 I_4$: -16.5
- $C_5 I_4$: -20.5
- $C_6 I_4$: -25.4
- $C_5 I_5$: -25
- $C_6 I_5$: -26.9
- $C_6 I_6$: -30.9

Figura 2.44: *Clustering* del carbono [7]

2.9 Conclusiones

A lo largo de este capítulo se ha expuesto una visión atomística de los defectos en silicio. Se trata de una colección de conceptos básicos que ayudan a comprender la implementación de modelos en el simulador DADOS. La bibliografía que existe en la actualidad sobre estos temas es muy extensa, si bien hemos considerado que era necesario formalizar los conceptos fundamentales para una mejor comprensión de esta fenomenología de cara a posteriores desarrollos e investigaciones.

Diseño e implementación de una ayuda para UVAS-DADOS

3.1 Introducción

UVAS es un entorno de simulación de procesos tecnológicos. Para su funcionamiento, se apoya en DADOS, el verdadero simulador basado en técnicas atomísticas kMC (*kinetic Monte Carlo*) [3]. Se trata de una herramienta muy potente y eficiente en términos de uso de recursos computacionales. El código fuente está desarrollado en el lenguaje C++ y, para la interfaz gráfica se ha empleado MFC (*Microsoft Foundation Class*) [29].

Sin embargo, a pesar de las ventajas evidentes que se han comentado, UVAS y DADOS carecen de un sistema de información adecuado que ayude al usuario a realizar simulaciones. En primer lugar, detectamos que el acceso a la estructura de datos para la visualización y análisis de resultados no era en absoluto trivial ni intuitivo. Por otro lado, de cara a usuarios avanzados, era importante adjuntar algún tipo de documento que explicase los parámetros físicos, magnitudes y mecanismos utilizados por DADOS para simular procesos tecnológicos. Por todas estas razones, se ha desarrollado un sistema informático de ayuda para el simulador.

El resto del capítulo se organiza como sigue. En la sección siguiente se analizarán las herramientas disponibles para la creación de sistemas de ayuda. Posteriormente, se organiza un esquema de trabajo acompañado de una correcta metodología que permita integrar el máximo de información con el mínimo de esfuerzo, obteniendo, de esta forma, una alta productividad en el trabajo.

3.2 Herramientas utilizadas

Los programas que operan en entornos Windows suelen venir acompañados de sistemas de ayuda característicos con formato estándar. Constan de un marco principal donde se muestra la información de interés. A la izquierda, se dispone una sección con la tabla de contenidos, y herramientas de índice y búsqueda. Véase figura 3.1 para más detalles.

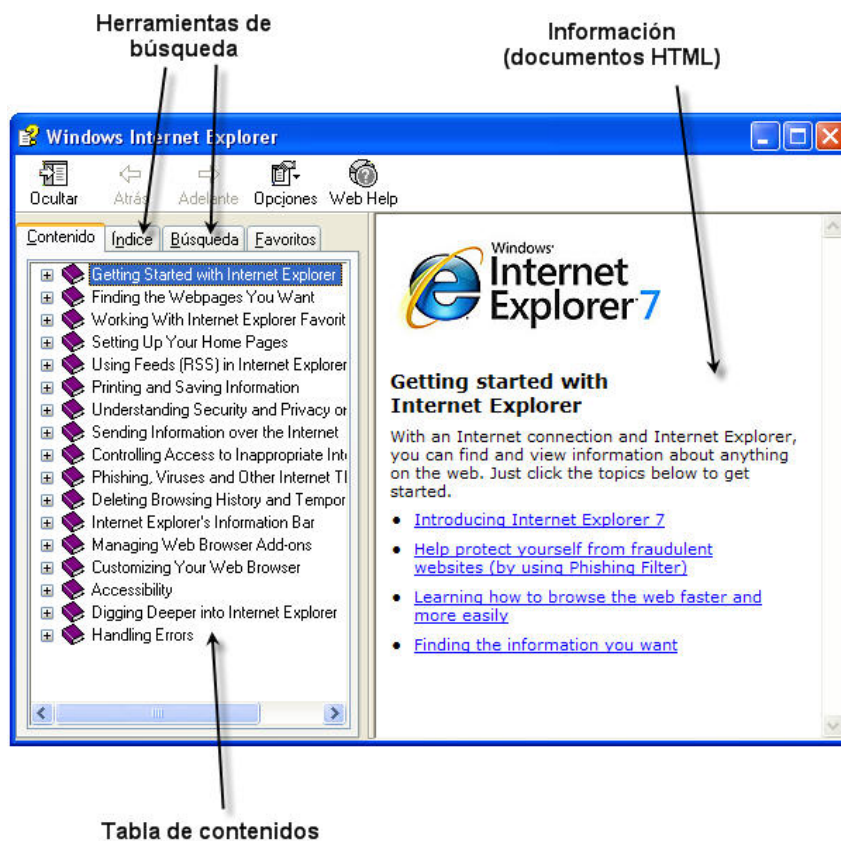


Figura 3.1: Estructura general de una ayuda CHM (ejemplo de Internet Explorer 7)

Desde el punto de vista puramente informático, se trata de un fichero CHM que es ejecutado por el programa `hh.exe`, situado éste en el directorio `WINDOWS`. A su vez, las páginas de información son documentos HTML, accesibles a través de los menús de la izquierda.

Las herramientas fundamentales¹ que hemos empleado para la creación de la ayuda se listan a continuación:

- Microsoft HTML Help Workshop.
- Microsoft FrontPage.
- Microsoft Visual Studio 2005.

3.2.1 Microsoft HTML Help Workshop

Se trata de una herramienta que, a partir de documentos HTML y una tabla de contenidos, genera un fichero CHM como el mostrado en la figura 3.1. Permite otras funcionalidades como la introducción de índices y motores de búsqueda.

¹No se incluyen otras como pueden ser editores de imágenes o de hojas de estilo.

Es sencillo de usar dado que se basa en ir introduciendo una tabla de contenidos bien organizada con asociaciones de cada entrada a un fichero HTML. Hecho esto, genera el fichero CHM integrando toda la estructura de ayuda.

Se trata de un programa que puede descargarse gratuitamente desde la página web de Microsoft [30]. Asimismo, en la web citada se adjuntan amplios manuales de ayuda *on-line*.

3.2.2 Microsoft FrontPage

FrontPage es un editor HTML desarrollado por Microsoft y caracterizado, fundamentalmente, por su facilidad de uso². Debemos admitir que no es el programa más adecuado para la creación de sitios *web*, puesto que cuenta con serias desventajas como es la generación de gran cantidad de código HTML innecesario, así como la dificultad presentada para incluir funcionalidades de HTML dinámico (DHTML) de cierta complejidad.

Sin embargo, hemos elegido FrontPage porque los documentos creados son relativamente simples, dado que únicamente incluyen elementos sencillos como texto, gráficas, tablas, hipervínculos y hojas de estilo en cascada (CSS). Por ello, opinamos que no era necesario introducir un editor más potente y complejo como podría ser Macromedia Dreamweaver.

Se trata de un programa que incluye Microsoft en su paquete Office. En concreto, para nuestra ayuda utilizamos la versión XP por ser la más moderna en la actualidad.

3.2.3 Hoja de estilo en cascada

Para ayudarnos en la edición de los documentos HTML escribimos una hoja de estilo en cascada para así, definir sólo una vez los encabezados y el formato del documento. El proceso es muy simple, puesto que se trata únicamente de cargar la hoja de estilo al crear un nuevo documento. El fichero CSS se muestra a continuación:

```
body {
    background-attachment: fixed;
    background-repeat: repeat-y;
    font-family: "Microsoft Sans Serif";
    font-size: 10pt;
    text-align: justify;
}

h1 {
    background-color: #000080;
    color: #ffffff;
    font-family: "Microsoft Sans Serif";
    font-size: 24pt;
    font-style: normal;
    font-weight: bold;
}
```

²Se trata de un editor WYSIWYG (*What you see is what you get*).

```
}

h2 {
    background-color: #000080;
    color: #ffffff;
    font-family: "Microsoft Sans Serif";
    font-size: 18pt;
    font-weight: bold;
}

h3 {
    background-position: left center;
    color: #800040;
    font-family: "MS Sans Serif";
    font-size: 12pt;
    font-weight: bold;
    text-decoration: underline;
}

tr {
    font-family: "Microsoft Sans Serif";
    font-size: 10pt;
    text-align: center;
}

td {
    font-family: "Microsoft Sans Serif";
    font-size: 10pt;
    text-align: center;
}
```

3.2.4 Microsoft Visual Studio 2005

Microsoft Visual Studio 2005 es una plataforma de desarrollo en .NET muy potente y ampliamente utilizada por programadores en entornos Windows actualmente [31]. Con Visual Studio, se puede programar vía orientación a componentes en varios lenguajes. En concreto, el código fuente de UVAS-DADOS está escrito en C++, como ya hemos comentado, y se ha organizado en forma de varios proyectos.

Hemos utilizado esta herramienta fundamentalmente a modo de auditoría informática ya que, durante el proceso de explicación de mecanismos, se comprobaron las implementaciones de las mismas en DADOS. En algunos casos se encontraron ciertas incongruencias que se solucionaron de manera inmediata.

3.3 Organización de la ayuda

Las secciones principales que se han identificado para la ayuda son las siguientes:

Información general. Aquí se muestran las principales opciones de configuración de UVAS, así como la forma de instalar el programa para que funcione correctamente.

Crear y correr una simulación. En esta sección se expone de manera detallada cómo se crea y ejecuta un *script* para simular determinados procesos tecnológicos. Se da una visión detallada de los comandos de UVAS, con todas las funcionalidades y opciones de cada uno.

Partículas y defectos en DADOS. Éste es un apartado fundamental porque en él se introduce la notación de DADOS. Se exponen las partículas implementadas y los defectos a los que pueden pertenecer.

Resultados. Se trata de un apartado importante porque enseña al usuario cómo acceder a la compleja aunque muy potente estructura de datos de UVAS.

Parámetros físicos de entrada. Se explican aquí los parámetros de entrada al UVAS especificados a través del fichero DDP, clasificados en diferentes categorías.

Magnitudes físicas. Las magnitudes físicas más importantes relacionadas con los procesos tecnológicos se exponen en este apartado.

Mecanismos. Se trata de una sección para usuarios avanzados donde se explican en profundidad los métodos utilizados por DADOS para implementar los mecanismos asociados a los procesos.

Nótese que la lectura detallada de los cuatro primeros apartados son fundamentales para el manejo del programa, mientras que los tres siguientes son más indicados para usuarios avanzados.

3.4 Comentarios adicionales. Consideraciones de diseño

La ayuda, a la que hemos denominado UVAS Help, ha sido escrita íntegramente en inglés por ser éste el lenguaje utilizado por la mayoría de los usuarios del programa.

Hemos analizado ayudas de programas comerciales, especialmente los de otros simuladores de procesos tecnológicos, como TAURUS [32] o el actual SENTAUROS [33]. En ellos, hemos comprobado que existe una alta redundancia de información, lo cual es algo bastante plausible puesto que una ayuda no es un libro que se lee de comienzo a fin, sino un manual de consulta rápida. Sin embargo, tras consultar la documentación incluida en [30], nosotros hemos preferido seguir un criterio distinto. El problema que presenta el hecho de repetir las cosas varias veces en distintos sitios con el objetivo de no tener que buscar en exceso es que cualquier modificación de la ayuda implica tener que cambiar información en muchos sitios; en otras palabras, el sistema es muy poco mantenible. Por ello, lo que hemos hecho ha sido evitar la redundancia en la medida de lo posible. Sin embargo, para no perder la rapidez en la búsqueda de información, hemos utilizado dos métodos. El primero es la creación de una tabla de contenidos muy organizada y dividida,

de fácil acceso a la información de interés. El segundo es una extensa red de hipervínculos en el fichero CHM para acceder a aspectos relacionados con un simple *click*.

En cuanto al estilo de escritura, se ha hecho una clara distinción. Por un lado, para aquellas partes que se dedican a definir los parámetros y el manejo del programa a nivel de usuario se ha utilizado un estilo claro y conciso, de tal forma que permita una rápida búsqueda de la información. Por otro lado, las magnitudes físicas y los mecanismos se han desarrollado con un estilo más descriptivo puesto que están más enfocados a usuarios avanzados que, por tanto, desean entender conceptos de una forma clara y global.

3.5 Integración de la ayuda en UVAS

Para integrar la ayuda en UVAS existen dos opciones:

- Hacer que el propio compilador de C++ genere el fichero CHM y se integre directamente.
- Compilarlas aparte con el Microsoft HTML Help Workshop y después llamar al fichero C++ desde el programa.

Nosotros optamos por la segunda opción ya que, a nuestro juicio, es mucho más sencilla de implementar y de mantener para las modificaciones futuras. Para realizarlo, simplemente utilizamos las herramientas que proporciona Microsoft Visual Studio: Creamos una entrada en el menú llamada "Help" y, a ella, la asociamos una función que es llamada cuando se pinche en el menú. Todo esto se realiza automáticamente utilizando en manejador de eventos que proporciona Visual Studio. A continuación escribimos la función implementada:

```
CUVASDlgApp::OnBnClickedHelp()
{
    HWND hwnd;
    ShellExecute(hwnd, LPCWSTR("open"), LPCWSTR("hh.exe"), NULL,
        LPCWSTR("C:\\DADOS\\UVAS_Help.chm"), SW_SHOWDEFAULT);
}
```

Como vemos, la idea es implemente llamar al programa de Windows que abre los ficheros CHM, que es hh.exe, situado en el directorio WINDOWS, y pasarle la ruta al fichero.

3.6 Conclusiones

En los apéndices de esta memoria se encuentra la ayuda en formato no electrónico. Compréndase que, para su inclusión aquí, ha habido que realizar algunas pequeñas modificaciones que, por descontado, no varían la esencia de la ayuda.

Calibración de parámetros

4.1 Introducción

El calibrado de parámetros es un aspecto fundamental en DADOS. Tras estudiar los resultados experimentales y hacer los razonamientos teóricos adecuados, se procede a diseñar e implementar un modelo que explique la física asociada a los procesos tecnológicos. Pero en este modelo no hay que olvidar que deben calibrarse los parámetros correctamente para que la solución se asemeje a la realidad, no de manera cualitativa sino también cuantitativa. Ese será el propósito de este capítulo.

A continuación, veremos algunas pruebas de la Test Suite, que está formada por un conjunto de simulaciones clásicas de interés que permiten ser usadas como ejemplo de funcionamiento de DADOS, así como de *benchmark* para comprobar que la adición de nuevos modelos no modifica los resultados básicos del simulador. Tras ello, pasaremos a calibrar realmente un parámetro esencial en simulación atomística como es el umbral de amorfización de semiconductores. Propondremos una metodología de trabajo y analizaremos los interesantes resultados a los que llegamos.

4.2 Test Suite (I): Umbral de amorfización

4.2.1 Fundamentos teóricos

La sección 2.5 describe en detalle el proceso de amorfización del silicio por implantación iónica. DADOS implementa este mecanismo de manera muy sencilla; en concreto, a través de un umbral de concentración de defectos, cargado al comienzo de la amorfización: `AmorphizationThreshold`.

Consideraremos una implantación de silicio para no introducir complejidad adicional con los dopantes. Cuando comienza la implantación, se crean defectos puntuales en forma de intersticiales y vacantes. Estas partículas pueden asociarse creando regiones llamadas *amorphous pockets*. Si la concentración de intersticiales y vacantes en los *amorphous pockets* sobrepasa un cierto umbral, DADOS la transforma en amorfa.

Como DADOS es un simulador de Monte Carlo, se basa en métodos estadísticos. Es posible,

pues, que haya cajas que deberían amorfizar pero no lo hagan porque los números aleatorios generados no han hecho que alcancen una concentración de intersticiales y vacantes suficiente. Esto es algo incorrecto y muy grave desde el punto de vista físico ya que estas cajas sin amorfizar son una fuente de recristalización en el posterior recocido [16]. Por ello, es importante introducir algún tipo de metodología que arregle este mecanismo. Para ello, DADOS introduce el parámetro `LatticeCollapse_nm3` que, entre otras funciones, realiza lo siguiente: Cuando tenemos una región no amorfa de tamaño como mucho el indicado por el parámetro rodeada totalmente de material amorfo, se convertirá en amorfa.

El siguiente paso está en establecer un valor para `LatticeCollapse_nm3`. El asunto no es trivial pero en [34] encontramos cierta ayuda. En concreto, nos proporciona datos sobre los tamaños críticos de nucleación del cristal en la transición a fase amorfa. Tras suponer que la variación con la temperatura sigue una dependencia de Arrhenius, llegamos al radio en nanómetros (4.1).

$$r = 0,16 \cdot \exp\left(\frac{1191,77}{T}\right) \quad (4.1)$$

Y, admitiendo una región esférica, su volumen será $\frac{4}{3}\pi r^3$. Es evidente que el valor último de `LatticeCollapse_nm3` depende de la temperatura. Sin embargo, en DADOS, se ha implementado una primera aproximación como parámetro constante. Nótese, de hecho, que los datos de partida son a alta temperatura por lo que, en principio, no podemos garantizar que la expresión (4.1) sea totalmente cierta para temperaturas muy dispares.

A una temperatura de 300 K (ambiente), el volumen de nucleación deducido sería de 2729,36 nm³. Diversos ensayos han demostrado que un valor de 40 nm³ es suficiente para nuestras simulaciones, por lo que será éste el valor a utilizar en principio.

4.2.2 Descripción del script

Creamos una caja de simulación de tamaño $x = 100$ nm, $y = 20$ nm, $z = 20$ nm. Definimos una interfaz de óxido de silicio de 1,5 nm de espesor. Cargamos e implantamos durante un segundo dos perfiles planos de intersticiales y vacantes de $1,5 \cdot 10^{22}$ cm⁻³ hasta una profundidad de 80 nm. La gráfica se muestra en la figura 4.1.

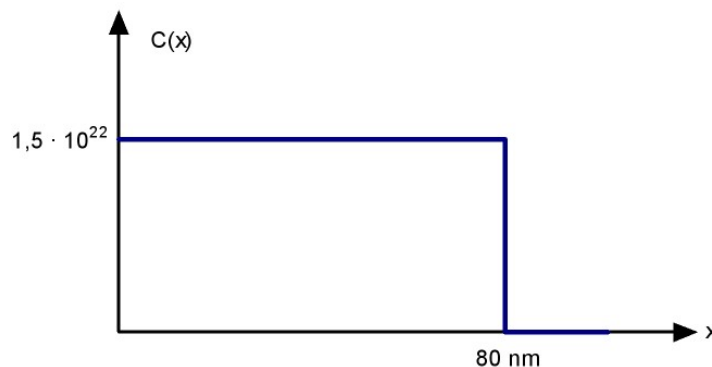


Figura 4.1: Perfil de intersticiales y vacantes implantado para el umbral de amorfización

El umbral de amorfización se ha establecido a $1,5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Como la concentración de defectos es superior al umbral, el semiconductor amorfizará. De hecho, se ha puesto una concentración igual al doble del umbral para garantizarlo.

El propósito de esta simulación es comprobar la dependencia de la amorfización con el valor de `LatticeCollapse_nm3`, así como la interdependencia de ambas magnitudes con la temperatura de implantación.

4.2.3 Resultados

En la figura 4.2 se muestra la implantación a $60 \text{ }^\circ\text{C}$ y con un valor de `LatticeCollapse_nm3` = 40. Como vemos, al comienzo, crece la concentración de intersticiales en amorphous pockets y defectos puntuales (sólo se representan los primeros). Cuando dicha concentración supera el umbral de amorfización, el material amorfiza, produciéndose una transferencia de concentración desde la zona cristalina de alto dañado hacia la amorfizada; es decir, que las partículas que antes estaban en amorphous pockets, ahora se incluyen en amorfo, por eso cae la concentración de una mientras aumenta la otra. Observemos en la gráfica que esa transición se produce ya casi al final de la implantación, lo cual es lógico puesto que la temperatura es demasiado alta, y el recocido dinámico es importante.

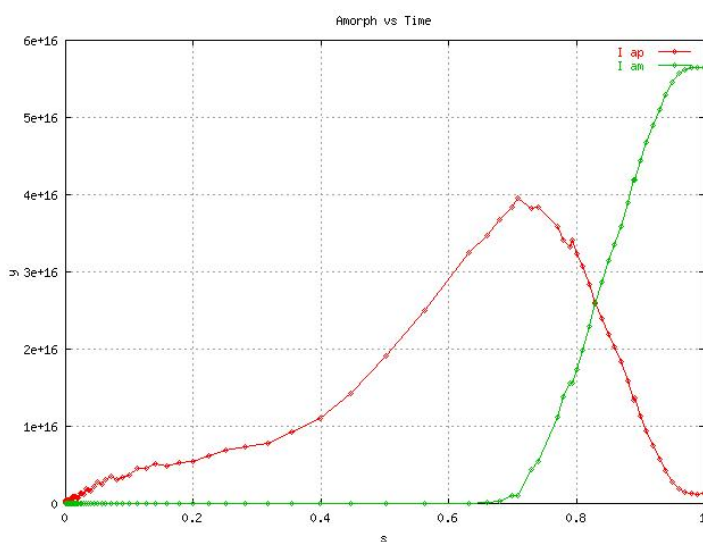


Figura 4.2: Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con `LatticeCollapse_nm3`=40 y temperatura $60 \text{ }^\circ\text{C}$

Probaremos ahora con una implantación a muy baja temperatura, $-170 \text{ }^\circ\text{C}$. El resultado, para el mismo valor de `LatticeCollapse_nm3` se muestra en la figura 4.3. Efectivamente, ahora el recocido dinámico es prácticamente inexistente, por lo que la amorfización se produce hacia la mitad de la simulación.

Por último, realizamos pruebas con `LatticeCollapse_nm3`. Si tomamos un valor muy bajo del mismo, observamos que la transición a región amorfa es más lenta. La causa está en que, cuanto menor es el parámetro, menos probable resulta encontrar regiones tan pequeñas rodeadas de material amorfo. En general, para valores superiores, sí podremos encontrar regiones de tamaño similar con las condiciones adecuadas. Véanse las figuras 4.4, 4.5 y 4.6.

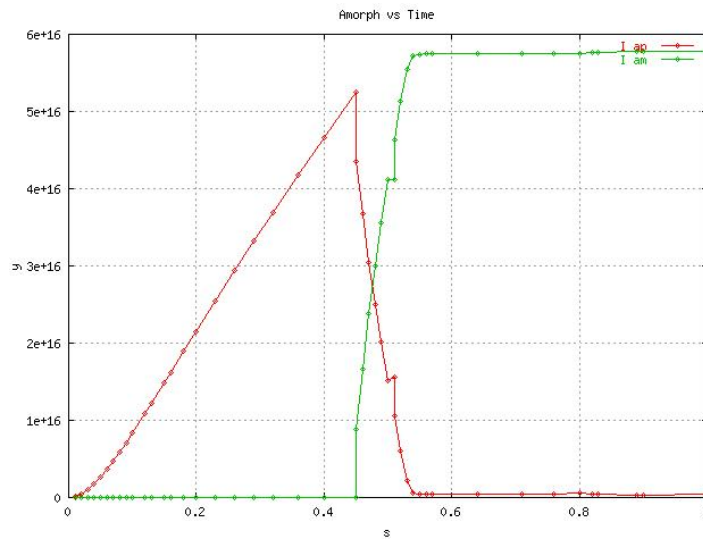


Figura 4.3: Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con `LatticeCollapse_nm3=40` y temperatura $-170\text{ }^{\circ}\text{C}$

Sin embargo, también hay que notar que valores demasiado grandes de `LatticeCollapse_nm3` pueden llevar a una amorfización excesiva, por lo que es necesario un compromiso. En general, aunque con pruebas *a posteriori* hemos comprobado que el parámetro puede ser efectivo con valores más bajos (incluso hasta 10), utilizaremos un valor de 40 para tomar un cierto margen.

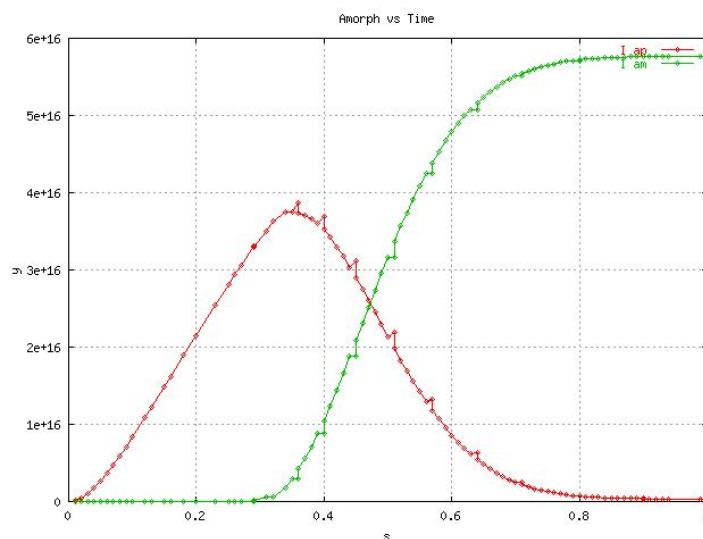


Figura 4.4: Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con `LatticeCollapse_nm3=2` y temperatura $-170\text{ }^{\circ}\text{C}$

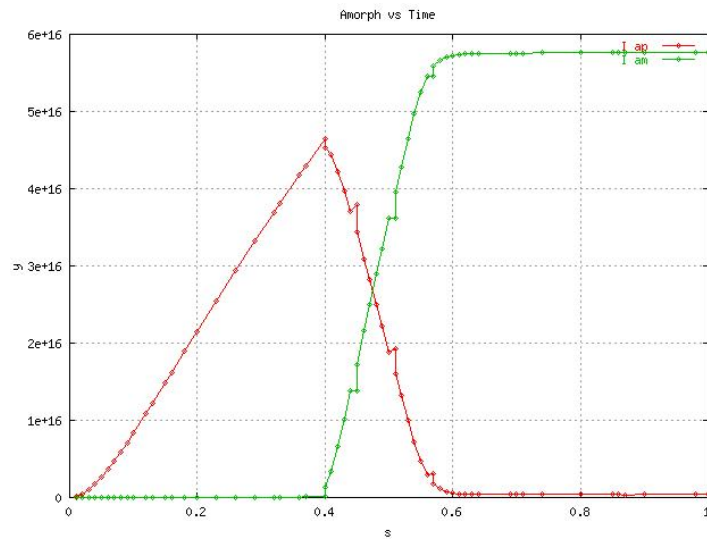


Figura 4.5: Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con $LatticeCollapse_nm3=10$ y temperatura $-170\text{ }^{\circ}\text{C}$

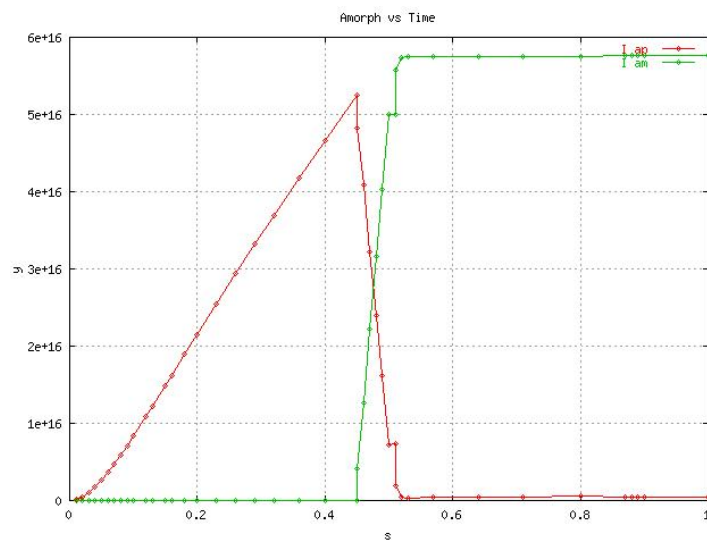


Figura 4.6: Implantación del perfil de intersticiales y vacantes con $LatticeCollapse_nm3=60$ y temperatura $-170\text{ }^{\circ}\text{C}$

4.3 Test Suite (II): Implantación de arsénico

4.3.1 Descripción del script

Tras crear una caja de simulación de tamaño $x = 50\text{ nm}$, $y = 10\text{ nm}$, $z = 10\text{ nm}$, definimos una interfaz de óxido de silicio de $1,5\text{ nm}$ de espesor. Realizamos una implantación sin máscara de 10^{15} cm^{-3} de silicio a una tasa de $10^{12}\text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ y a una energía de 1 KeV . La temperatura de implantación es la ambiente ($26,85\text{ }^{\circ}\text{C}$). Posteriormente, durante 3 segundos, subimos la temperatura linealmente hasta $740\text{ }^{\circ}\text{C}$. Una vez ahí, mantenemos la misma durante 7200 segundos

(2 horas).

4.3.2 Problemas encontrados

DADOS es un simulador atomístico basado en técnicas de Monte Carlo. La idea principal es que se basa en la simulación de eventos que ocurren con una cierta frecuencia. Las frecuencias están asociadas a probabilidades, de tal forma que eventos que sucedan con frecuencias muy elevadas se pueden ver como eventos muy probables, y viceversa. Para implementar esta metodología, los simuladores de Monte Carlo generan números aleatorios con distribución constante.

DADOS utiliza un parámetro llamado `randomSeed`, que actúa a modo de semilla de números aleatorios (véanse apéndices de esta memoria). Teóricamente, éste no debería ser un parámetro influyente ya que, aunque se generen números distintos, la teoría probabilística garantizará que dos simulaciones idénticas deben generar los mismos resultados puesto que el número de eventos en ambas es suficientemente alto [8].

Al realizar varias simulaciones con distintos valores de `RandomSeed`, hemos comprobado que los resultados para los perfiles de arsénico con bastante distintos. El motivo puede ser doble:

- El código del programa presenta errores.
- El tamaño de la caja de simulación es demasiado pequeño por lo que el número de eventos no es suficientemente elevado como para garantizar la teoría anterior.

4.3.3 Ajuste del tamaño de la caja

Para intentar comprobar la fuente de error, aumentamos el tamaño de caja hasta unos valores de $x = 50$ nm, $y = 25$ nm, $z = 25$ nm. Apréciase que no hemos tomado unos valores muy superiores al caso anterior ya que esto ralentizaría en exceso la simulación. Tras simular de nuevo, obtuvimos los resultados que se muestran en las figuras 4.7, 4.8 y 4.9.

Como vemos, los perfiles son suficientemente parecidos hasta una profundidad de 15 nm, aproximadamente. Estos resultados bastan para concluir que el problema de esto era un tamaño de caja muy pequeño. Con las nuevas dimensiones se garantiza un compromiso entre eficiencia en tiempo de simulación y coherencia de resultados.

4.4 Test Suite (III): *Spike* de boro

En el capítulo 2 se habló de los defectos en semiconductores haciendo especial énfasis al final del mismo en los experimentos con el boro. En este apartado, veremos el clásico experimento de la *spike* de boro, de la que puede encontrarse amplia información no sólo al final del capítulo 2, sino en las referencias [26], [27] y [35].

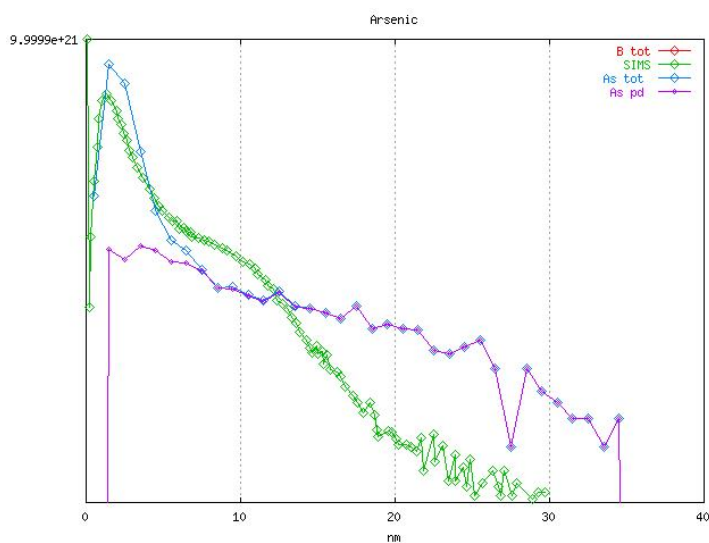


Figura 4.7: Implantación de arsénico con `randomSeed = 1`

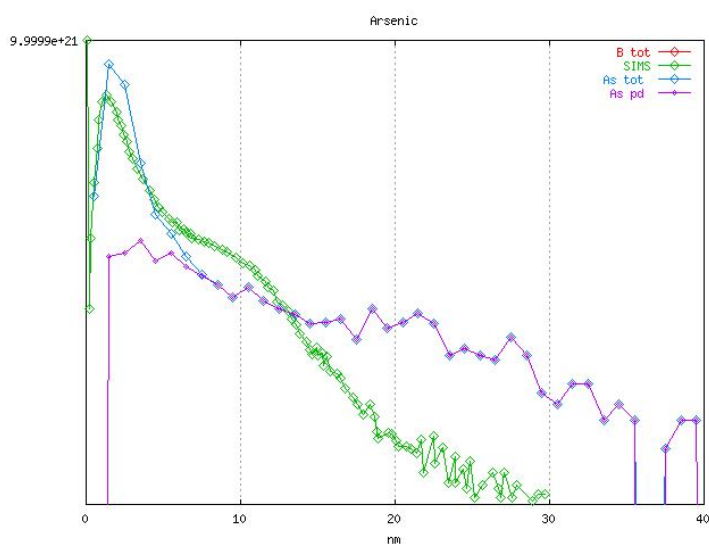


Figura 4.8: Implantación de arsénico con `randomSeed = 1562`

4.4.1 Descripción del script

Creamos una caja de simulación de tamaño $x = 350$ nm, $y = 20$ nm, $z = 20$ nm. Definimos una interfaz de óxido de silicio de 1,5 nm de espesor. Cargamos un perfil plano de boro de 10^{19} cm^{-3} entre unas profundidades de 100 nm y 120 nm. En la figura 4.10 se muestra el perfil gráficamente.

Una vez cargado el perfil, procedemos a implantar silicio a 40 KeV. La dosis empleada es de $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y la tasa es de $10^{12} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$. La temperatura de implantación es la ambiente ($26,85$ °C). Posteriormente, realizamos un breve recocido de 4 segundos con subida lineal de temperatura desde $26,85$ °C hasta 800 °C. El segundo recocido, mantenido a 800 °C, dura 2100 segundos (35 minutos).

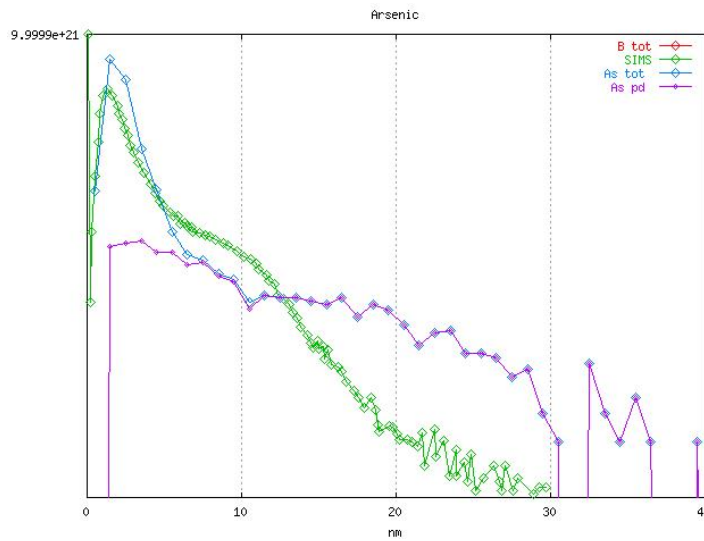


Figura 4.9: Implantación de arsénico con `randomSeed = 8654`

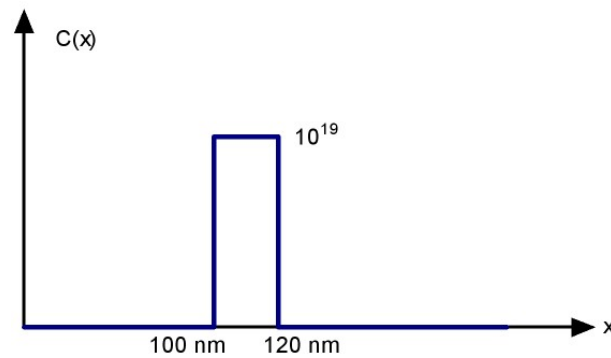


Figura 4.10: *Spike* de boro utilizada para la simulación

4.4.2 Resultados. Ajuste del tamaño de la caja

Tras realizar algunas simulaciones, comprobamos que el tamaño de la caja era demasiado pequeño puesto que los resultados presentaban un alto grado de ruido estadístico. Llegamos a la conclusión, asimismo, que un tamaño más idóneo y eficiente en cuanto a recursos consumidos era $x = 350 \text{ nm}$, $y = 70 \text{ nm}$, $z = 70 \text{ nm}$.

En la figura 4.11 se muestra el resultado de la simulación. En color azul se muestran los resultados experimentales mientras que en rojo se representa el boro total al final de la simulación. Apréciase la relativa similitud entre ambas curvas. Obsérvese también que se cumple lo que ya estudiamos en el capítulo 2: La mayor parte del boro que permanece en la región de la *spike* está en forma de clusters.

Ya por último, comentaremos algunos resultados de la simulación en cuanto a concentraciones se refiere. Mostramos en la figura 4.12 las concentraciones de boro en distintos estados. Como vemos, la concentración de boro al comienzo de la simulación es, en su totalidad, en defectos puntuales, correspondiente a los iones sustitucionales de la *spike*. Posteriormente, se produce el *clustering* del boro, produciéndose complejos de boro e intersticiales. Parte del boro que se

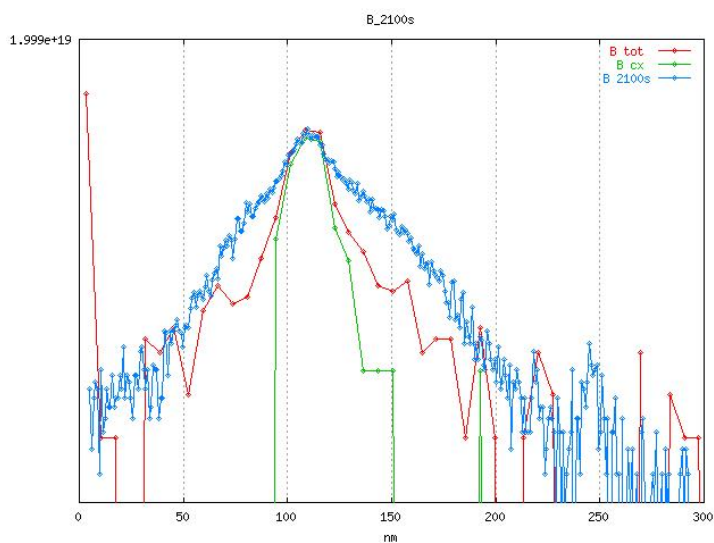


Figura 4.11: *Spike* de boro tras la implantación de silicio

aleja de la *sipke* por la TED queda inmovilizado en la superficie del silicio. Obsérvese que las concentraciones son bastante estacionarias durante gran parte de la simulación.

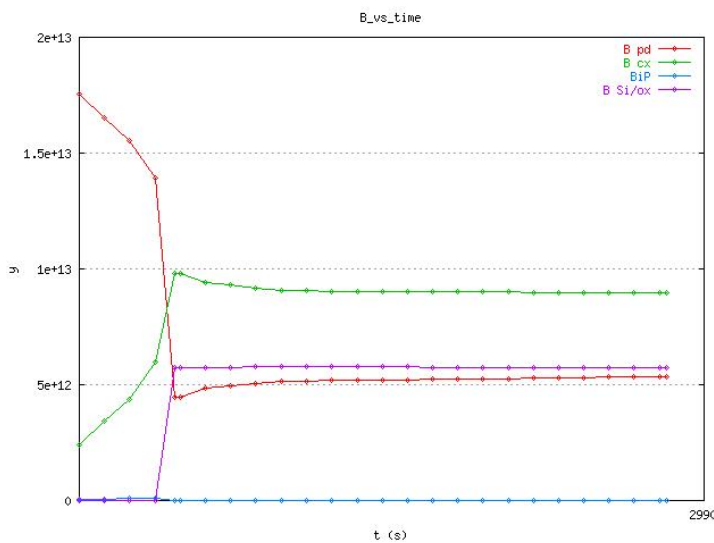


Figura 4.12: Concentraciones de boro en distintos estados

4.5 Calibración del umbral de amorfización

Retomemos el concepto de amorfización. Como ya comentamos en la sección 4.2.1, DADOS la implementa a través de un sencillo umbral. En la sección anterior analizamos el parámetro `LatticeCollapse_nm3`. Procederemos ahora a calibrar `AmorphizationThreshold`. En la sección siguiente abordaremos la metodología seguida para la calibración y, posteriormente, expondremos los resultados obtenidos.

4.5.1 Metodología

Se define la **dosis crítica** como aquella dosis de implantación para la cual se produce amorfización del silicio, entendida ésta como la formación de una capa continua de material amorfo. En la figura 4.13 se muestra la dosis crítica para el antimonio, fósforo y boro en función de la temperatura de implantación. Los puntos se corresponden con datos experimentales, mientras que la línea continua procede del modelo propuesto por Morehead *et al.* [22]. La base de este modelo está en suponer que la amorfización continua de los iones implantados se debe al solapamiento de regiones amorfas formadas durante la trayectoria del ion, hasta formar una capa amorfa. A este modelo también se le conoce con el nombre de **nucleación heterogénea**.

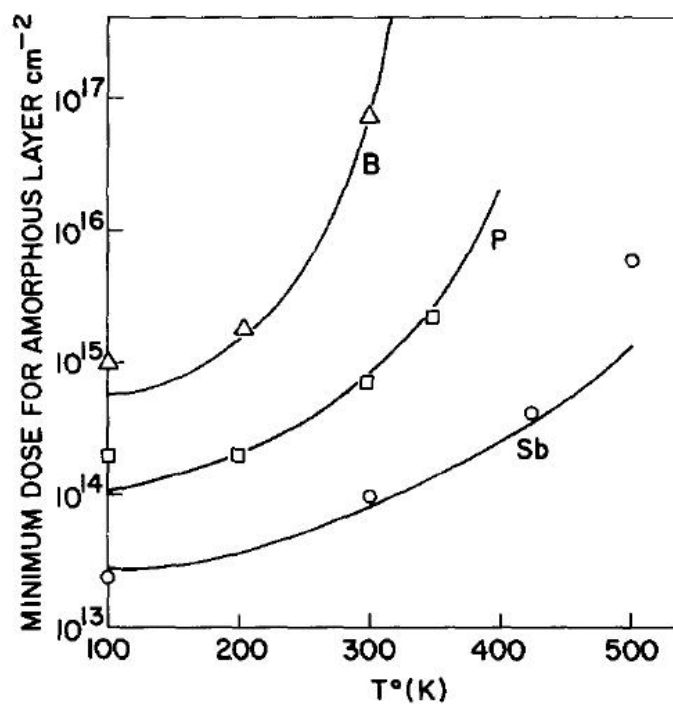


Figura 4.13: Dosis crítica para diversos materiales en función de la temperatura [22]

La idea del método de calibración es implantar materiales de los que tenemos datos (boro, fósforo y antimonio) en silicio a las temperaturas que nos proporcionan las gráficas. En la práctica, hemos utilizado un método descrito como sigue. Tomada una temperatura de implantación, la gráfica 4.13 nos da la dosis crítica. Implantamos con una dosis ligeramente superior. Como la implantación es lineal, si el umbral es correcto, debería amorfizar justo en el instante de tiempo correspondiente a la dosis teórica.

Veamos un ejemplo. El antimonio (Sb) amorfiza a $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ a una temperatura de 100 K. Implantamos a la velocidad indicada por las gráficas, $0,2 \mu\text{A}/\text{cm}^{-2}$. Puesto que a DADOS le tenemos que pasar una *dose rate* en $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$, transformamos valores dividiendo por la carga del electrón, $1,6 \cdot 10^{-19}$. De esta forma, resulta una velocidad de $1,25 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$. En cuanto a la energía, los datos proporcionados son 200 KeV para fósforo y boro, y 300 KeV para el antimonio. Si el umbral de amorfización fuese correcto, debería aparecer una capa continua amorfa cuando llegase a una dosis de $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, es decir, en un tiempo:

$$t = \frac{\text{Dose}}{\text{Dose rate}} = \frac{3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}}{1,25 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}} = 24 \text{ s} \quad (4.2)$$

Implantamos a una dosis superior para alcanzar el tiempo t . Se pueden dar tres situaciones:

- Si se forma una capa continua amorfa a los 24 segundos aproximadamente, el umbral de amorfización es correcto para el antimonio.
- Si la capa se forma antes de los 24 segundos, el umbral es demasiado bajo, porque amorfiza demasiado pronto. Subiremos el umbral.
- Si la capa se forma después de los 24 segundos, el umbral es demasiado alto, porque amorfiza demasiado tarde. Bajaremos el umbral.

De esta forma, creamos un método iterativo que nos permite calibrar el umbral para cada material.

La temperatura de implantación será la más baja posible, en concreto, -170 °C. A tal temperatura, apenas hay recombinaciones que propician el recocido dinámico, durante el cual podrían intervenir procesos no calibrados en DADOS. En la tabla 4.1 se muestran las dosis críticas para los materiales empleados en la calibración.

Tabla 4.1: Dosis críticas a $T = -170$ °C [22]

| Material | Dosis crítica |
|----------|-----------------------------------|
| Sb | $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ |
| P | $2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ |
| B | $1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ |

Por último, comentaremos que es necesario tomar algún valor de partida. Pelaz *et al.* proponen valores en torno a 10^{22} cm^{-3} . Nosotros tomaremos un umbral de inicialización de $1,5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

4.5.2 Descripción de los scripts

A continuación, en la tabla 4.2, plasmamos los datos principales de las simulaciones realizadas para valores del umbral de amorfización entre $1,5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ y $2,2 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-2}$, que es el rango donde se ha visto que se encuentran los resultados.

Tabla 4.2: Parámetros de entrada a DADOS

| Parámetro | Sb | P | B |
|--|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| Tamaño de caja (nm) | $30 \times 30 \times 240$ | $25 \times 25 \times 280$ | $15 \times 15 \times 900$ |
| Energía (KeV) | 300 | 200 | 200 |
| Dosis (cm^{-2}) | $5 \cdot 10^{13}$ | $3 \cdot 10^{14}$ | $1,5 \cdot 10^{15}$ |
| <i>Dose rate</i> ($\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$) | $1,25 \cdot 10^{12}$ | $1,25 \cdot 10^{12}$ | $1,25 \cdot 10^{12}$ |

Comentarios:

- El tamaño de caja se ha elegido de tal forma que el material pueda amorfizar pero sin tomar valores excesivamente grandes, recuérdese la figura 2.20. De esta forma, se logran simulaciones computacionalmente más eficientes.
- Las energías de implantación se han elegido acordes con las indicaciones de [22].
- Las dosis se han elegido superiores a la crítica pero tampoco mucho mayores ya que el simulador DADOS, para generar las cascadas, utiliza MARLOWE, un simulador basado en la aproximación de colisiones binarias (BCA) que emplea métodos muy costosos desde el punto de vista de tiempo de cálculo.
- Para aumentar la precisión, se ha forzado al simulador para que tome bastantes *snapshots*. En concreto, 20 por década y uno cada vez que el material cambie a amorfo.
- Como DADOS es un simulador basado en técnicas estadísticas (*kinetic* Monte Carlo), se ha considerado que la creación de una capa amorfa se da cuando participan en ella al menos dos secciones adyacentes de cajas pequeñas en el plano YZ.

4.5.3 Resultados

En las tablas 4.3, 4.4 y 4.5, y en la figura 4.14 se muestran los resultados obtenidos con las simulaciones.

Tabla 4.3: Resultados de calibración de umbral de amorfización para el antimonio

| Umbral de amorfización | Dosis crítica | Error relativo |
|-------------------------------------|--------------------------------------|----------------|
| $1,5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $2,71 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -9,58 % |
| $1,6 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $2,95 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -1,67 % |
| $1,7 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $3,20 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 6,67 % |
| $1,8 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $3,21 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 7,08 % |
| $1,9 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $3,40 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 13,33 % |
| $2,0 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $3,75 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 25,00 % |
| $2,1 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $3,98 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 32,50 % |
| $2,2 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $4,20 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 40,00 % |

Tabla 4.4: Resultados de calibración de umbral de amorfización para el fósforo

| Umbral de amorfización | Dosis crítica | Error relativo |
|-------------------------------------|--------------------------------------|----------------|
| $1,5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $1,47 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -26,31 % |
| $1,6 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $1,60 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -20,00 % |
| $1,7 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $1,80 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -10,25 % |
| $1,8 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $1,89 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -5,75 % |
| $1,9 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $1,93 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -3,75 % |
| $2,0 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $2,05 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 2,63 % |
| $2,1 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $2,21 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 10,38 % |
| $2,2 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $2,21 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 10,38 % |

Para trabajar más cómodamente con los datos, realizamos una regresión lineal para aproximar los resultados por una recta. Imponemos la condición de que dicha función pase por el origen, es decir, que sea de la forma $y \propto x$. Esto es así porque, para umbrales nulos, es lógico que la dosis

Tabla 4.5: Resultados de calibración de umbral de amorfización para el boro

| Umbral de amorfización | Dosis crítica | Error relativo |
|-------------------------------------|--------------------------------------|----------------|
| $1,5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $6,85 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -31,51 % |
| $1,6 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $7,60 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -24,05 % |
| $1,7 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $7,76 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -22,45 % |
| $1,8 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $7,76 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -22,45 % |
| $1,9 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $8,55 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -14,49 % |
| $2,0 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $9,16 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | -8,48 % |
| $2,1 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $1,00 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 0,05 % |
| $2,2 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ | $1,05 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ | 5,15 % |

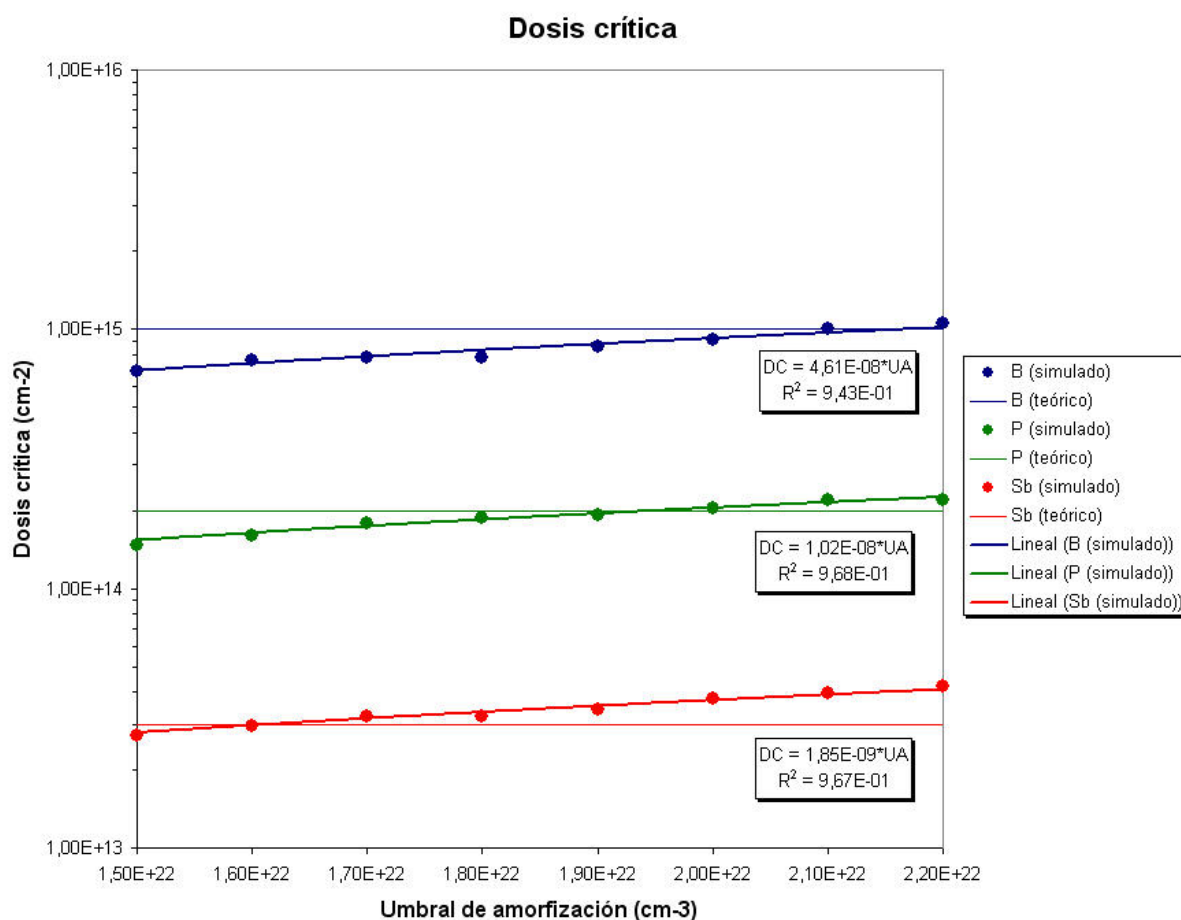


Figura 4.14: Resultados de calibración de umbral de amorfización

crítica sea cero; es decir, que el material amorfece siempre. De todas formas, comprobamos que el error cometido forzando a anular la ordenada en el origen era prácticamente inapreciable¹. El cálculo en este momento de los umbrales para cada material es inmediato, sin más que igualar la función a los valores correspondientes. Los resultados se muestran en la tabla 4.6.

Como vemos, no hay coincidencia plena entre valores, si bien su diferencia no es preocupante. De hecho, retomando la gráfica 4.13 vemos que existe cierta holgura de valores entre los datos

¹El parámetro R^2 que aparece en las gráficas indica el grado de precisión de la aproximación.

Tabla 4.6: Umbrales de amorfización. Resultados

| Material | Umbral de amorfización |
|----------|--------------------------------------|
| Sb | $1,62 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ |
| P | $1,96 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ |
| B | $2,17 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ |

experimentales y el modelo implementado. Por tanto, pequeñas variaciones no generan errores apreciables. Se ha realizado un análisis de errores utilizando la media aritmética; hemos obviado otras metodologías como puede ser la media geométrica ya que lo que buscamos es un error promedio bajo, no un error bajo en solamente un tipo de material. Tras realizar cálculos, hemos llegado a que el valor óptimo está en $1,9 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, puesto que genera dosis críticas comprendidas en los rangos óptimos que proporciona Morehead *et al.* [22]. En concreto, los rangos admitidos están entre $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ para el antimonio, $1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ y $2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ para el fósforo y $8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ y $1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ para el boro. En la figura 4.15 se muestra la gráfica de Morehead *et al.* [22] con los datos simulados en colores. Obsérvese la bondad de los resultados de las simulaciones con los datos experimentales, ligeramente corregidos con el modelo teórico.

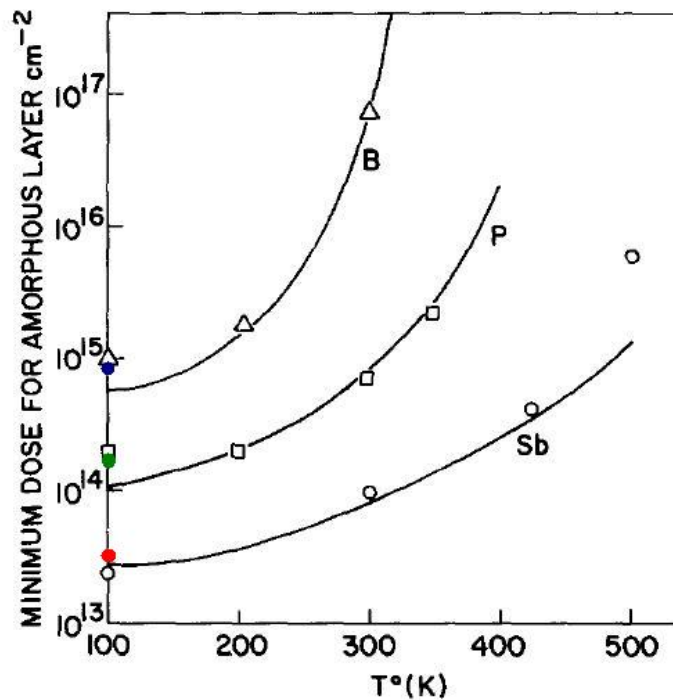


Figura 4.15: Dosis crítica para diversos materiales en función de la temperatura [22] y resultados de las simulaciones

Por último, haremos un breve inciso en el tema de la precisión. La precisión de los datos la hemos limitado a un único decimal, $1,9 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Esto es así puesto que los datos de partida han sido obtenidos de gráficas y, además, tampoco consideramos que sea necesaria una mayor resolución, dada la escasa incidencia que tendrán ligeras variaciones del umbral de amorfización en futuras simulaciones.

4.6 Conclusiones

A lo largo de este capítulo, se ha procedido a realizar una calibración y análisis de resultados con el simulador DADOS. Los trabajos se han desarrollado en tres áreas fundamentalmente:

- Ajuste del tamaño de caja en simulaciones de la *spike* de boro a baja dosis para garantizar resultados coherentes con mínimos tiempos de computación.
- Comprobación del buen funcionamiento del código tras verificar los correctos resultados con generadores de números aleatorios distintos.
- Ajuste del umbral de amorfización. Tras calibrar un parámetro de entrada a DADOS para su funcionamiento interno como es `LatticeCollapse_nm3`, se procedió a ajustar el umbral de amorfización, `AmorphizationThreshold`. Para ello, se realizaron implantaciones de baja temperatura y, mediante métodos de promediado y regresión lineal, se ha llegado a un resultado de $1,9 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

A partir de estos datos, futuras líneas de trabajo podrían ir encaminadas hacia la calibración de parámetros de amorphous pockets, en los que ya intervienen las energías de las recombinaciones de pares IV.

Conclusiones

5.1 Conclusiones del proyecto

A lo largo de este proyecto se ha implementado un sistema de ayuda para el simulador atomístico UVAS-DADOS y se ha realizado también una calibración de parámetros.

Para la ayuda, hemos partido de un análisis teórico previo para comprender los conceptos a explicar posteriormente. Se ha utilizado una metodología basada en la ausencia de redundancia para la mejora en la mantenibilidad y también en el uso de herramientas sencillas pero eficientes de procesado HTML. La información se ha organizado, por un lado, en ayuda para el manejo del UVAS y, por otra parte, información sobre modelos físicos y parámetros de entrada. A su vez, todo ello se interrelaciona a través de una amplia red de hipervínculos. Por último, comentaremos que el desarrollo de la ayuda nos ha servido para comprobar y corregir la implementación de los modelos físicos.

En cuanto al calibrado, hemos realizado ciertas simulaciones para ajustar tamaños de caja atendiendo al principio del coste/rendimiento, en términos de tiempo de simulación. Pero, sin duda, lo más importante ha sido la calibración del umbral de amorfización que, tras implantar a baja temperatura (para evitar que haya recombinaciones) boro, antimonio y fósforo, hemos llegado a un valor óptimo de $1,9 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

5.2 Líneas futuras

No cabe ninguna duda de que UVAS Help tendrá que ser constantemente actualizado por nuevos modelos que se implementen o mejoren en DADOS. Confiamos en que el diseño previo haga el trabajo más fácil.

En cuanto a la parte más física, se podría continuar con las energías de activación de los amorphous pockets, ya a más alta temperatura. El calibrado del umbral de amorfización era fundamental para dar el siguiente paso.

Bibliografía

- [1] J. M. Rabaey. *Digital integrated circuits : a design perspective*. Upper Saddle River: Prentice-Hall, 2nd edition, 2003.
- [2] G. H. Gilmer, T. D. de la Rubia, D. M. Stock, and M. Jaraiz. Diffusion and interactions of point defects in silicon: molecular dynamics simulations. *Nuclear Instrumental Methods*, 102, 1995.
- [3] N. Strecker, V. Moroz, and M. Jaraiz. Introducing monte carlo diffusion simulation into tcad tools.
- [4] R.B. Adler, A.C. Smith, and R.L. Longini. *Introducción a la física de semiconductores*. Ed. Reverté, 1970.
- [5] L. A. Marqués, L. Pelaz, P. Castrillo, and J. Barbolla. Molecular dynamics study of the configurational and energetic properties of the silicon self-interstitial. *Physical Review B*, 71(8), February 2005.
- [6] N. E. B. Cowern, K. T. F. Janssen, G. F. A. van de Walle, and D. J. Gravesteijn. Impurity diffusion via an intermediate species: The boron-silicon system. *Physical Review Letters*, 65(19), November 1990.
- [7] R. Pinacho, P. Castrillo, M. Jaraiz, I. Martín-Bragado, J. Barbolla, H.-J. Grossmann, G.-H. Gilmer, and J.-L. Benton. Carbon in silicon: Modeling of diffusion and clustering mechanisms. *Journal of Applied Physics*, 92(3), May 2002.
- [8] C. Alberola López. *Probabilidad, variables aleatorias y procesos estocásticos. Una introducción orientada a las telecomunicaciones*. Universidad de Valladolid, 2003.
- [9] N.E.B. Cowern, G. Mannino, Stolk P.A., F. Roozeboom, H.G.A. Huizing, J. G. M. van Berkum, F. Cristiano, A. Claverie, and M. Jaraiz. Energetics of self-interstitial clusters in silicon. *Physical Review Letters*, 82(22), May 1999.
- [10] N. E. B. Cowern, G. Mannino, P. A. Stolk, F. Roozeboom, H. G. A. Huizing, J. G. M. van Berkum, F. Cristinano, A. Claverie, and M. Jaraiz. Cluster ripening and transient enhanced diffusion in silicon. *Materials science in semiconductor processing*, 1999.
- [11] M. P. Chichkine, M. M. de Souza, and E. M. Sankara Narayanan. Growth of precursors in silicon using pseudopotential calculations. *Physical Review Letters*, 88(8), 2002.
- [12] T. E. M. Staab, A. Sieck, M. Haugk, M. J. Puska, Th. Fruenheim, and H. S. Leipner. Stability of large vacancy clusters in silicon. *Physical Review B*, 65, 2002.

- [13] M. Tang, L. Colombo, J. Zhu, and T. Diaz de la Rubia. Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial-vacancy recombination, and formation volumes. *Physical Review B*, 55(21), 1997.
- [14] L. A. Marques, L. Pelaz, J. Hernandez, J. Barbolla, and G. H. Gilmer. Stability of defects in crystalline silicon and their role in amorphization. *Physical Review B*, 64, 2001.
- [15] K. R. C. Mok, M. Jaraiz, I. Martín-Bragado, J. E. Rubio, P. Castrillo, R. Pinacho, J. Barbolla, and M. P. Srinivasan. Ion-beam amorphization of semiconductors: A physical model based on the amorphous pocket population. *Journal of Applied Physics*, 98, April 2005.
- [16] L. Pelaz, L. A. Marqués, and J. Barbolla. Ion-beam-induced amorphization and recrystallization in silicon. *Journal of Applied Physics*, 96(11), December 2004.
- [17] M. J. Cartula, T. Diaz de la Rubia, L. A. Marques, and G. H. Gilmer. Ion-beam processing of silicon at kev energies: A molecular-dynamics study. *Physical Review B*, 54, 1996.
- [18] G. Bai and M. A. Nicolet. Defects production and annealing in self-implanted silicon. *Journal of Applied Physics*, 70(649), 1991.
- [19] O. W. Holland, S. J. Pennycook, and G. L. Albert. New model for damage accumulation in silicon during self-ion irradiation. *Applied Physics Letters*, 55(24), December 1989.
- [20] E. C. Baranova, V. M. Gusev, Y. V. Martynenko, C. V. Starinin, and I. B. Haibullin. On silicon amorphization during different mass ion implantation. *Radiation Effects*, 18(1-2), 1973.
- [21] J. R. Dennis and E. B. Hale. Energy dependence of amorphizing implant dose in silicon. *Applied Physics Letters*, 29(9), 1976.
- [22] F. F. Morehead, B. L. Crowder, and R. S. Title. Formation of amorphous silicon by ion bombardment as a function of ion, temperature, and dose. *Journal of Applied Physics*, 102(3), March 1972.
- [23] R. D. Goldberg, J. D. Williams, and R. G. Elliman. Amorphization of silicon by elevated temperature ion irradiation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 106(242), 1995.
- [24] L. Pelaz, G. H. Gilmer, M. Jaraiz, S. B. Herner, H. J. Gossmann, D. J. Eaglesham, G. Hobler, C. S. Rafferty, and J. Barbolla. Modeling of the ion mass effect on transient enhanced diffusion: Deviation from the “+1” model. *Applied Physics Letters*, 73(10), September 1998.
- [25] L. Pelaz, G. H. Gilmer, V. C. Venezia, H. J. Gossmann, M. Jaraiz, and J. Barbolla. Modeling of the effects of dose, dose rate, and implant temperature on transient enhanced diffusion. *Applied Physics Letters*, 74(14), April 1999.
- [26] L. Pelaz, M. Jaraiz, G. H. Gilmer, H. J. Gossmann, C. S. Rafferty, D. J. Eaglesham, and J. M. Poate. B diffusion and clustering in ion implanted si: The role of b cluster precursors. *Applied Physics Letters*, 70(17), April 1997.
- [27] L. Pelaz, G. H. Gilmer, H. J. Gossmann, C. S. Rafferty, M. Jaraiz, and J. Barbolla. B cluster formation and dissolution in silicon: A scenario based on atomistic modeling. *Applied Physics Letters*, 74(24), June 1999.

-
- [28] R. Pinacho, M. Jaraiz, P. Castrillo, I. Martín-Bragado, J. E. Rubio, and J. Barbolla. Modeling arsenic deactivation through arsenic-vacancy clusters using an atomistic kinetic monte carlo approach. *Applied Physics Letters*, 86(25), June 2005.
- [29] I. Martín-Bragado. *Simulación atómica de procesos para Microelectrónica*. Universidad de Valladolid, 2004.
- [30] Microsoft developers network (msdn). <http://msdn.microsoft.com>.
- [31] J. Martínez Álvarez. *Introducción a .NET*. Telefónica Investigación y Desarrollo, Agosto 2006.
- [32] Avant! *Taurus manual for version 2002.2*, 2002.
- [33] Synopsys. *Sentaurus manual for version Y-2006.06*, 2006.
- [34] S. Izumi, S. Hara, T. Kumagai, and S. Sakai. Molecular dynamics study of homogeneous crystal nucleation in amorphous silicon. *Journal of Crystal Growth*, 274, September 2004.
- [35] L. Pelaz, V. C. Venezia, H. J. Gossmann, G. H. Gilmer, A. T. Fiory, C. S. Rafferty, M. Jaraiz, and J. Barbolla. Activation and deactivation of implanted boron in silicon. *Applied Physics Letters*, 74(24), June 1999.
- [36] J. E. Rubio, M. Jaraiz, I. Martín-Bragado, R. Pinacho, P. Castrillo, and J. Barbolla. Physically based modelling of damage, amorphization, and recrystallization for predictive device-size process simulation. *Materials science and engineering*, 2004.
- [37] S. C. Jain and D. J. Roulston. A simple expression for band gap narrowing. *Solid State Electronics*, 34, 1991.
- [38] I. Martín-Bragado, P. Castrillo, M. Jaraiz, Pinacho R., Rubio J. E., J. Barbolla, and V. Moroz. Fermi-level effects in semiconductor processing: A modeling scheme for atomistic kinetic monte carlo simulators. *Journal of Applied Physics*, 98, September 2005.
- [39] Y. S. Oh and D. E. Ward. A calibrated model for trapping of implanted dopants at material interface during thermal annealing. *IEEE/IEDM*, 509, 1998.

UVAS Help (I): General information

A.1 General information

UVAS is an atomistic simulator fully developed by the Department of Electronics of the University of Valladolid, Spain. It can be used to simulate a large amount of processes in a very short time compared with other classical simulators because its core, DADOS (Diffusion of Atomistic Defects, Object Oriented Simulator), is based on atomistic technique kinetic Monte Carlo (kMC). UVAS also allows to display simulation results by means of a complete data structure, both in graphic and text modes.

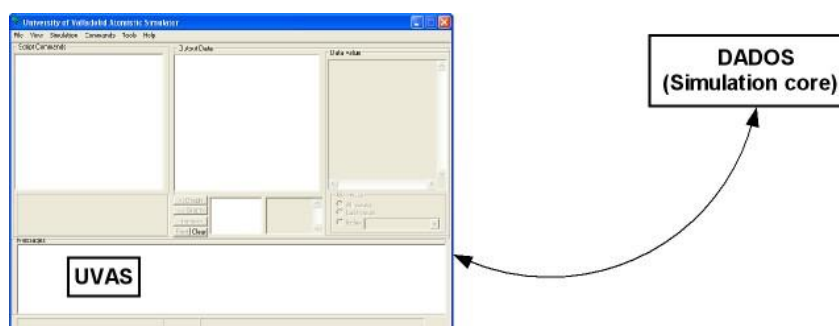


Figure A.1: General structure UVAS-DADOS

A.2 How to install and run UVAS

No installation program is provided with UVAS. The default input parameter file is `dados.ddp` (can be `anyname.ddp`). We will refer to them simply as `UVAS.exe` and `dados.ddp`. Please follow these straightforward steps to successfully run UVAS:

Unzip `DADOS.zip`, `config.zip`, `eel.zip` and the `UVAS.zip` executable. If the drive is `C:` you should build the directory tree indicated in table A.1.

Your simulation files can be located anywhere, as well as modified versions of the DDP parameters file.

Table A.1: UVAS directory

| Directory/File | Description |
|------------------------|--|
| C:\DADOS\BIN\ | Includes pgnuplot.exe, wgnupl32.exe (to save graphics into GIF files) and RasMolUVAS.exe (to see atomic configurations). |
| C:\DADOS\config\ | Configuration files. |
| C:\DADOS\ImplantFiles\ | IMPLANT files, that store cascades when simulating implant processes. |
| C:\DADOS\ee1\ | Stopping power files, to simulate change in trajectory when a particle is moving. |
| C:\DADOS\temp\ | Temporary files. |
| C:\DADOS\UVAS.exe | Executable file (double click on it to run UVAS). |
| C:\DADOS\dados.ddp | Parameters file. |
| C:\DADOS\UVAS_Help.chm | Help system. |
| C:\DADOS\TestSuite\ | A full collection of examples to see physical properties simulated with DADOS. |

A.3 UVAS overview

UVAS has a very easy environment to work with. When running a simulation, its aspect is like the one shown in figure A.2.

UVAS main parts are listed below:

Commands window. It shows the process script or simulation details.

Commands description. A brief description of the selected command is given.

Data browser. A full data tree can be seen here, with whole information about the current simulation.

Data printer. It is a way to transfer results into a file.

Vectors control. It is a way to access simulation results.

Data viewer. Results will be shown here in text mode.

Messages window. Information about simulation progress is shown in this window.

Progress bar. Indicates the progress over the command being executed.

State bar. It shows the process being executed at the moment.

UVAS uses symbols in order to indicate properties. Everything is shown in table A.2.

A.4 Properties and options

UVAS options can be found by clicking on **View -> Properties**. Once there, three sections are offered to be modified:

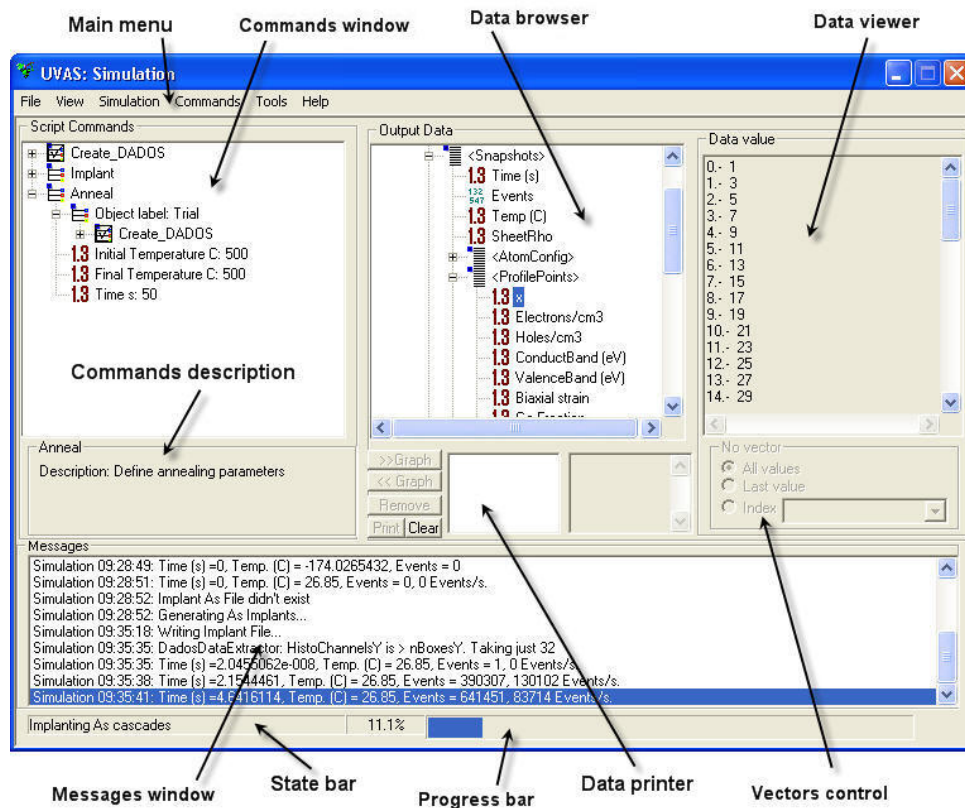


Figure A.2: Generic window

- File.
- Data Browser.
- Script Wizard.

A.4.1 File














Binary save. If this option is selected, simulations will be saved as a binary file. Otherwise, they will be saved with ASCII format.

Verbosity. Indicates the level of information to be shown in the messages window. This level is an integer between 0 (no information) and 4 (full information). Level 2 is established as default.

A.4.2 Data Browser

Limit vector list. You can specify the number of elements shown in order to save memory and computerization capabilities. It is not recommended to establish a low value in order not to lose results.

Table A.2: Symbols used for data in UVAS

| Symbol | Meaning |
|---|---|
|  | Non executed command. |
|  | Executed command. |
|  | Vector (array of data). |
|  | Read vector (array of data) in Commands Window. |
|  | Decimal number. |
|  | Read decimal number in Commands Window. |
|  | Integer. |
|  | Enumeration. |
|  | Integer. |
|  | Read integer in Commands Window. |
|  | Text. |
|  | Read text in Commands Window. |
|  | Pointer. |

Show pointers. It shows or hides pointers in the Data browser. Pointers are a special type of data in UVAS.

Change to last value warning. When selected, if you set a value in the "Index" item of the Vectors Control higher than the highest, UVAS will automatically change to the last one.

Ask for simulation and object. If this option is selected, UVAS will ask to user about data origin which have been read from a file, in case they are not stored in memory.

Enumerate vector elements. Sets a counter for the elements listed in vectors to be shown.

Write output to disk instead of print. While checked, results will be written in files instead of printed on the window.

A.4.3 Script Wizard

Autoexpand. While creating Script Wizard tree, it expands different items associated with it.

Max. historic in. When you set a value in the "Index" item of the Vectors Control, UVAS will save the last ones. With this parameter you can specify how many of then you want to save.

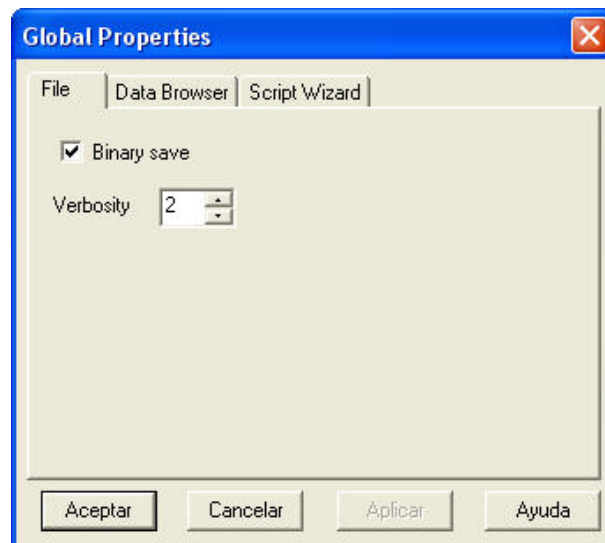


Figure A.3: File options



Figure A.4: Data Browser options



Figure A.5: Script Wizard options

B

UVAS Help (II): Creating and running a simulation

B.1 Creating a script

A script is a set of commands that indicate UVAS the process to simulate. To create it please follow these steps:

- Click on **File** -> **New...** and give a name for the simulation. See figure B.1.
- Click on **Commands** and choose from the given options. Full information about available commands can be found here. See figure B.2.
- Once added all necessary commands, the script is defined. We can save it by selecting **File** -> **Save...** and we will get an UVA file which can be used to be simulated afterwards.

B.2 UVAS commands

UVAS provides with these commands for simulations:

- **CreateDADOS.**
- **Anneal.**
- **Apply_Strain_Profile.** [TO BE DEVELOPED]
- **Implant.**
- **Implant_Read_Profile.**
- **Input_Data_Series.**
- **Load_To_Continue.** [TO BE DEVELOPED]

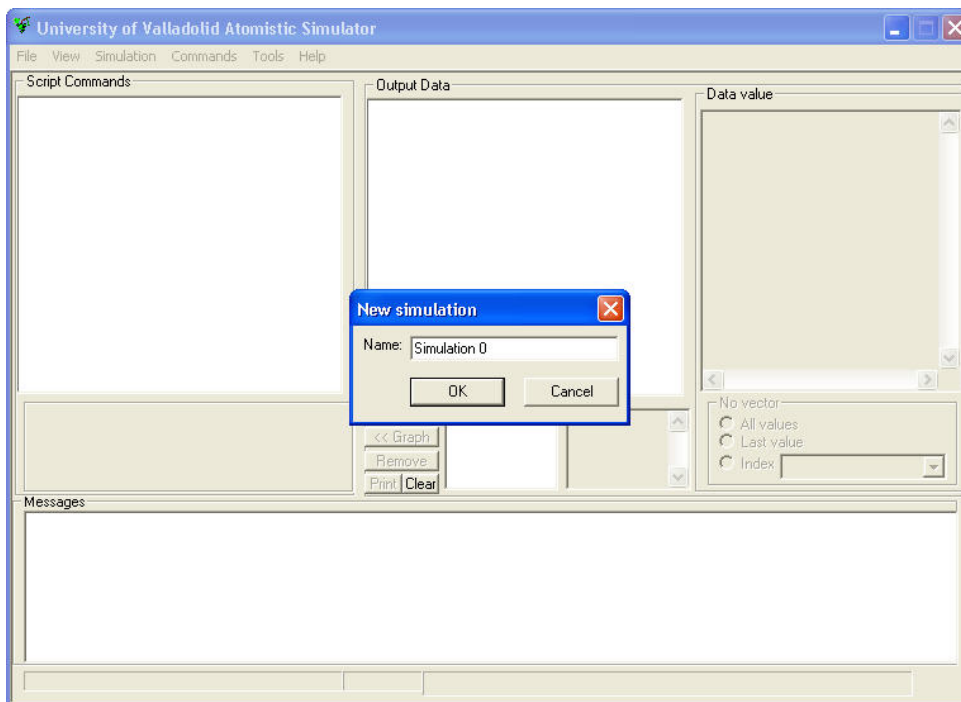


Figure B.1: New simulation

- Open_Graphics.
- Read_Profile.
- Run_Next_Simulation.
- Save_3D_Config. [TO BE DEVELOPED]
- Save_Output_Plots.
- Save_Simulation.
- Save_To_Continue. [TO BE DEVELOPED]
- Set_Ge_Fraction_Profile.
- Set_Material.
- Set_Output_Options.
- Surface_IV_gen_rec.
- Take_Snapshot.

B.2.1 CreateDADOS

It should be the first command for every simulation. With this command, a silicon simulation box is created as simulation domain.

Parameters:

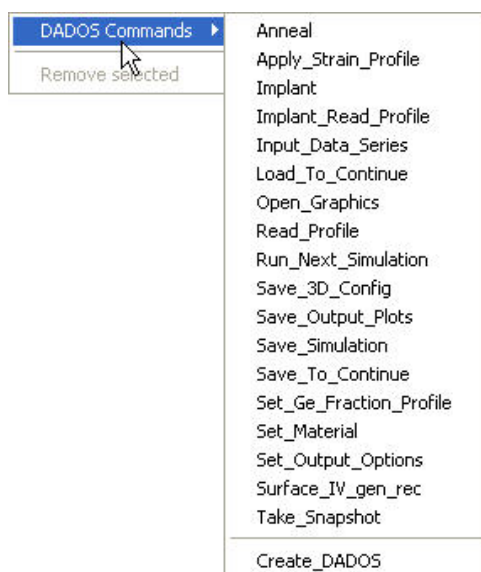


Figure B.2: UVAS commands

Object label, Client data. It is not necessary to be worried about it as these words are only used by internal code to work. Only give a name for them.

Parameters file. It is the DDP file where the simulation parameters are defined.

Minimum x, Minimum y, Minimum z, Maximum x, Maximum y, Maximum z. The simulation box used by DADOS to work is simply defined by two 3D points (see figure below), indicating the two opposite sides of the box (distances must be expressed in NANOMETERS). Obviously, the larger the box is, the more accurate and statistically significant the simulation will be, although a longer time will be needed to simulate. DADOS uses as internal minimum x the value zero, this means that if you use a different value for Minimum x, a part of the simulation box will not be shown in the results.

This command will be shown in every command as it is the basic one. It can be checked that when this command has been executed, a tick appears not only in the main command but in all the others.

With the command `Set_Material`, UVAS can create different regions for simulations. See figure B.4.

When executed (verbosity level 2), the following is shown in the messages window (figure B.5). As we can see, UVAS shows full information about boxes and amorphization parameters.

B.2.2 Anneal

The annealing process is simulated by changing the temperature.

Parameters:

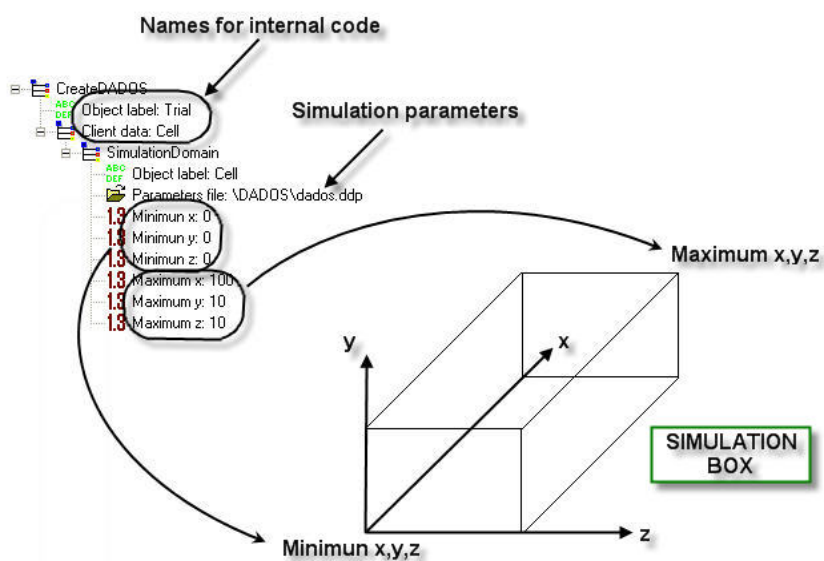


Figure B.3: CreateDADOS command

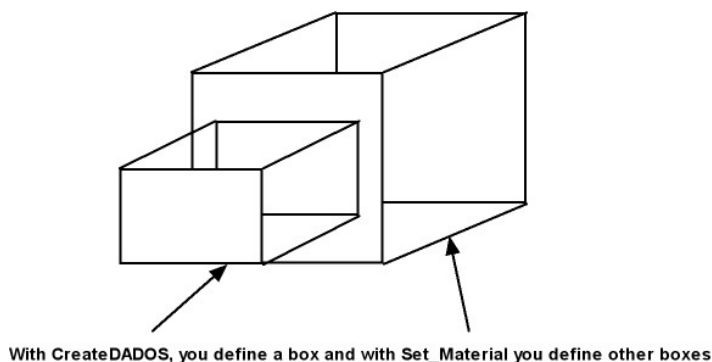


Figure B.4: CreateDADOS and Set_Material to create different simulation boxes

```

Simulation 17:39:05: Saved C:\DADOS\Simulation.uva in binary mode
Simulation 17:39:07: Simulation started
Simulation 17:39:07: Reading DADOS physics parameters from:
Simulation 17:39:07: /DADOS\dados.ddp
Simulation 17:39:07: Boxes: X=128, Y=8, Z=8, 0.78125nm x 1.25nm x 1.25nm
Simulation 17:39:08: Boxes volume (cm3) = 1.2207e-021 per particle conc = 8.192e+020
Simulation 17:39:08: MaxVStorage= 1.00001e+024 Part/cm3, AmorphousVthresholdN=18 Part/box
Simulation 17:39:08: Lattice Collapse (# boxes) = 33
Simulation 17:39:08: Latt. collapse (nm3) = 40.2832

```

Figure B.5: Information shown in the messages window when executed CreateDADOS

Initial Temperature, Final Temperature. UVAS makes a linear interpolation (short steps), as it works with discrete parameters. These temperature must be expressed in CENTI- GRADE DEGREES.

Time. The time between initial and final time must be expressed in SECONDS.

If a constant temperature for annealing is required, please set two annealing process: the first one will last a little time (e.g. 0.5 s for each 100°C), from initial temperature up to the final one, and in the second anneal maintain equal both temperatures for the required time. See figure B.7.

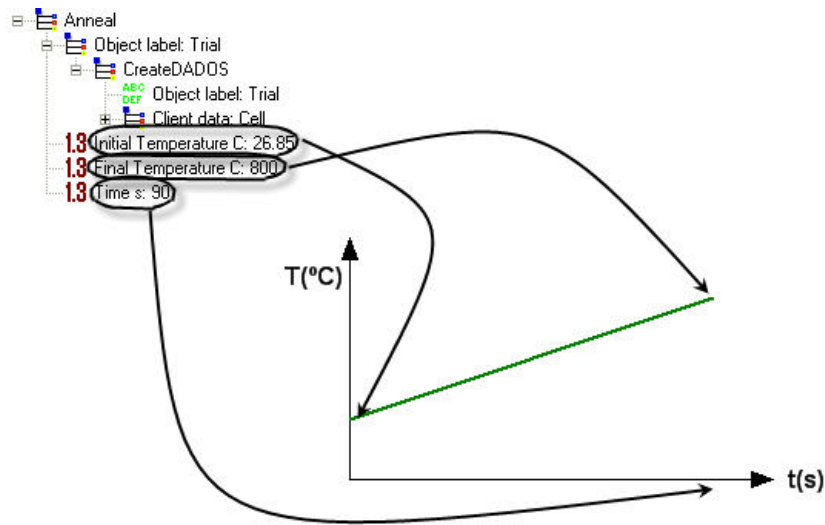


Figure B.6: Anneal command

This technique is not compulsory, a discontinuity in temperature is allowed in DADOS but it is highly recommended setting slopes as shown.



Figure B.7: Constant annealing technique

B.2.3 Apply_Strain_Profile [TO BE DEVELOPED]

This command is used to create a simulation box with a variable lattice parameter depending on the depth (x). This property is important when the structure is not straight but curved. This parameter needs to be introduced in a STRAIN file.



Figure B.8: Apply_Strain_Profile command

B.2.4 Implant

DADOS uses a program based on the binary collisions approach (BCA) in order to generate cascades to implant in silicon, which is called MARLOWE. After the cascades have been generated, DADOS stores them in an IMPLANT file, which is saved in the `ImplantFiles` directory. This way, in the next simulation, it is not necessary to re-calculate the cascades. However, if the simulation box is modified, IMPLANT file will be modified as well. It is very important that only one similar implant in the same directory can be simulated at the same time, in order not to overwrite the file.

When executed (verbosity level 2), the following is shown in the messages window. In the example, as it didn't exist the IMPLANT file, UVAS creates it (see figure B.9).

```
Simulation 17:39:10: Implant Ge File didn't exist
Simulation 17:39:10: Generating Ge Implants...
Simulation 17:39:24: Writing Implant File...
```

Figure B.9: Information shown in the messages window when executed `Implant`

Parameters:

Implant species. A species to implant can be selected here from a list. Not all the species are implemented (see DDP file). For those who are not, DADOS only creates the damage. If you want to do the same with other implemented species, please set a negative energy.

Energy. It is the implant energy, expressed in KILOELECTRON-VOLTS.

Tilt. See figure B.11. When tilt is zero, the implant direction is $\langle 100 \rangle$, i.e., $\{[100],[010],[001]\}$.

Rotation. See figure B.11.

Dose. Total concentration to implant, expressed in PARTICLES PER SQUARE CENTIMETER.

Dose rate. Implant rate, expressed in PARTICLES PER SQUARE CENTIMETER AND PER SECONDS.

Mask Y min. See figure B.12.

Mask Y Max. See figure B.12.

Mask Height. See figure B.12.

Mask Angle. See figure B.12.

Window Z Max. See figure B.12.

Temperature. Implant temperature expressed in DEGREES CENTIGRADE. This is an important parameter as implant results (damage) depends on temperature.

Target Structure. A target structure can be selected here from a list.

MaxDifferentCascades. MARLOWE generates only one cascade and DADOS repeats it in different positions randomly chosen. The maximum number of repetitions is given by this parameter. It should be large enough to avoid statistic errors but not huge.

Comments:

- It is obvious that implant time can be obtained as dose/dose_rate, as it is a linear process.
- If you want to eliminate the mask, please set Mask Y Min higher than Mask Y Max.
- DADOS implements two types of conditions for cascades.

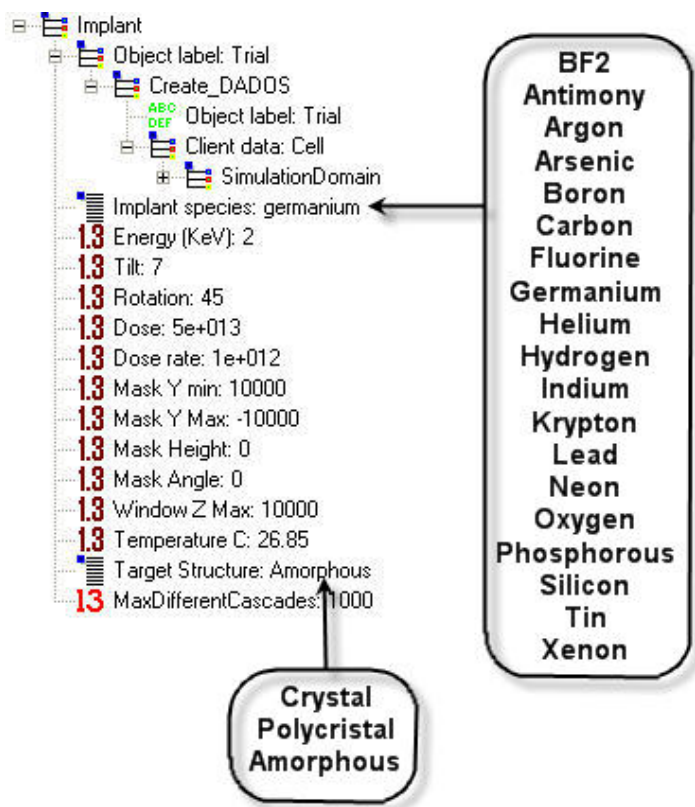


Figure B.10: Implant command

B.2.5 Implant_Read_Profile

This command should be used at any moment after loading a profile file with Read_Profile. It implants all the profiles opened so far simultaneously.

Parameters:

Time. Time used to implant the profile. This parameter must be expressed in SECONDS. Time can be set to zero, but at high temperatures, if the particles are mobile, a great amount of processes are happening that can affect the computer stability; therefore, it is highly recommended using a non-zero value if the particles are mobile.

Temperature. Implant temperature expressed in CENTIGRADES DEGREES. This is an important parameter as implant results (damage) depends on temperature.

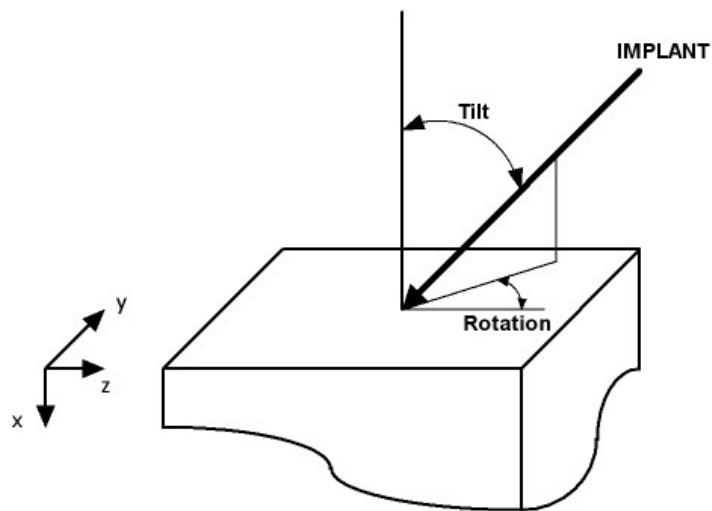


Figure B.11: Tilt and rotation

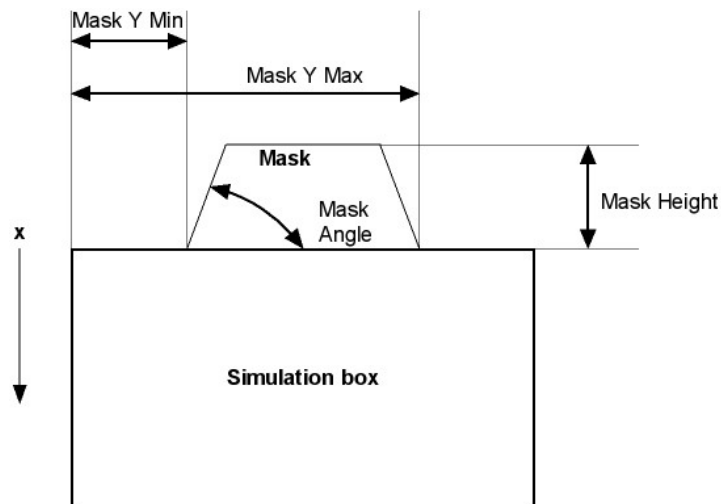


Figure B.12: Mask parameters

This command is useful for:

- Epitaxial growth.
- Academic purposes.
- Introduction of profile and damage in different stages.

B.2.6 Input_Data_Series

A DA2IN file can be inserted here to be plotted as external data.

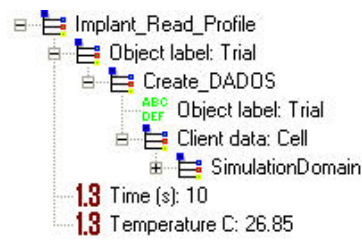


Figure B.13: Implant_Read_Profile command

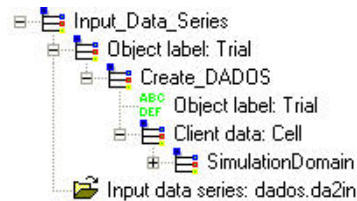


Figure B.14: Input_Data_Series command

B.2.7 Load_To_Continue

This command must be used with a RESTART file, generated with Save_To_Continue. It is used to continue with a simulation.



Figure B.15: Load_To_Continue command

B.2.8 Open_Graphics

When this command is reached during the simulation, UVAS opens the graphics structure defined in the indicated GPH file. Its function is similar to the one provided by Main Menu.

B.2.9 Read_Profile

This command is useful for creating profiles in silicon. At any moment after this command, Implant_Read_Profile should be called in order to implant it. As shown in the figure, it is necessary to provide a file with the information of the implant as simply as giving two columns: one for depth and the other one for concentration (please see data file format for more information). The particle type is given by the file extension, shown in table B.1.

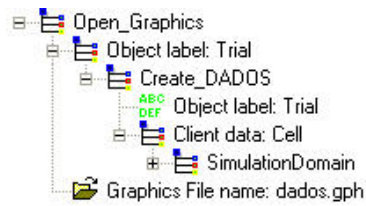


Figure B.16: Open_Graphics command

Table B.1: Extensions and particles for Read_Profile command

| Extension | Particle |
|-----------|--------------|
| INT | Interstitial |
| DAM | Damage |
| VAC | Vacancy |
| ARS | Arsenic |
| BOR | Boron |
| CAR | Carbon |
| FLU | Fluorine |
| HYD | Hydrogen |
| IND | Indium |
| OXY | Oxygen |
| PHO | Phosphorous |
| ANT | Antimony |

B.2.10 Run_Next_Simulation

Once a script has been saved, it can be opened using this command in order to continue with a new simulation after another one have been finished. This way, several simulations can be chained to be executed (at different times, not simultaneously).

Commonly, this command is preceded by a saving command, such as Save_Output_Plots or Save_Simulation.

B.2.11 Save_3D_Config [TO BE DEVELOPED]

This command saves the 3D particle configuration data to a 3D file. The saved configuration is the one at the moment of this command has been called.

In general, it is not recommended to set this command during or just after the implant process, as a lot of memory would be required due to the fact that MARLOWE generates a great amount of particle coordinates.



Figure B.17: Read_Profile command



Figure B.18: Run_Next_Simulation command

B.2.12 Save_Output_Plots

This command is used by UVAS to store the output plots into a GIF file (one per plot). Its function is similar to the one provided by Main Menu. This command uses the program gnuplot, located in BIN directory. The name of the file will be the name of the simulation followed by a dot and followed by the name of the graph. For instance, if the name of the simulation is “Amorph_Threshold” and the name of the graphic is “Amorph vs Time”, the GIF file will be `Amorph_Threshold.Amorph vs Time.gif`.

This command does not save the entire simulation (for doing this, please use `Save_Simulation`). However, it can be useful for well-known simulations, in order to save memory.

B.2.13 Save_Simulation

When UVAS reads this command, the simulation with its current results are saved into a UVA file. The information stored is the present at the moment UVAS reads this command. After a simulation has been saved as an UVA file, it cannot be run any more. For running it again, please use `Save_To_Continue` command.

With this command, the entire simulation is saved, including results. Notice that a great amount of memory might be required, depending on the output options (number of snapshots, 3D structures, etc.).

B.2.14 Save_To_Continue [TO BE DEVELOPED]

Sometimes, simulations are long, specially if simulation box is large. In this case, it can be interesting to pause the simulation after a step. For doing this, just set `Save_To_Continue` command when pause is required and UVAS will save all the information in the file with

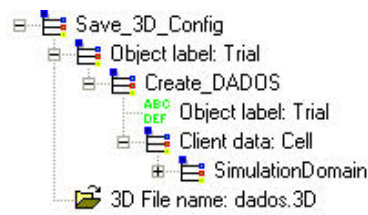


Figure B.19: Save_3D_Config command



Figure B.20: Save_Output_Plots command

RESTART extension. For restarting the simulation, please use Load_To_Continue command with the RESTART file saved before.

B.2.15 Set_Ge_Fraction_Profile [TO BE DEVELOPED]

Use this command to set the germanium fraction profile along "x" axis. Information about it must be included in the SIGE file.

B.2.16 Set_Material

It is used to properly define the interface in silicon. If this command is not used, DADOS assumes that there is no surface; therefore, there is no simulation of generation or recombination there. Remember that point defects are generated in the surface under equilibrium conditions, thus, the use of this command is highly recommended in most simulations. Generation and recombination in the volume are not implemented in DADOS, as their frequency is extremely low, in order to save memory and computerization resources. Silicon oxide or Ambient are the most common materials employed but other ones can be chosen from those shown in figure B.24.

Parameters:

Initial x, Initial y, Initial z. Initial coordinates for the new material, expressed in NANOMETERS.

Final x, Final y, Final z. Final coordinates for the new material, expressed in NANOMETERS.

As DADOS works with boxes, and the number of boxes for materials must be integers, it is not guaranteed that the final material size is going to be the specified one but DADOS will do



Figure B.21: Save_Simulation command



Figure B.22: Save_To_Continue command

its best. For example, if the box size is $X = 100$ nm, $Y = 10$ nm, $Z = 10$ nm, with 19 bits, the x size of small boxes is 0.78125 nm, which means that the size of material in x axis will be of two boxes, i.e., 1.5625 nm, and not 1.5 nm (the specified one).

B.2.17 Set_Output_Options

This is an important command as UVAS doesn't save every result in order not to waist a lot of memory. It must be set BEFORE the commands which provide results. Here, you will indicate what you want to save.

Parameters:

Start output time. It is the time when the first snapshot is taken. It has the same function as `InitOutputTime` in the parameters file, although the value here is the one UVAS will take for the simulation.

Snapshots per decade. Indicates the number of snapshots saved per time decade. If this value is set to zero, UVAS will save a snapshot only when the material changes (if checked this option), which can be fairly useful sometimes, especially for checking the dopants profile deviation from the majority-carriers one.

Enable events/snapshot. When selected, UVAS saves a snapshot when a number of events specified in **Events per Snapshot** happen.

Snapshot before ChgUpdate. When selected, UVAS saves an snapshot just before the charge is updated.

Snapshot after change Material. When selected, UVAS saves a snapshot when the material changes: amorphous to crystalline or crystalline to amorphous.

Incremental events. When selected, UVAS shows the results of the last snapshot. If not, UVAS makes an average over the time to calculate results.

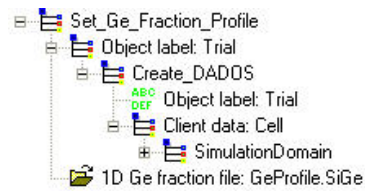


Figure B.23: Set_Ge_Fraction_Profile command

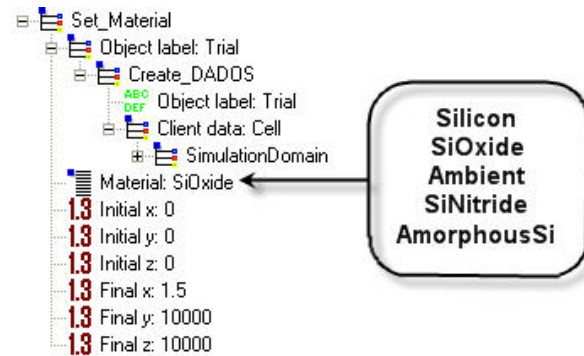


Figure B.24: Set_Material command

Save 3D. When selected, UVAS saves 3D structures, useful for plotting atomic configurations.

Save last n. Please indicate here the number of snapshots UVAS will save. If more than n are generated, UVAS will discard the first ones.

1Dprofiles nX. Number of points in 1D profiles for abscissas. It is not recommended that this parameter is too high in order to save memory.

2Dprofiles nY. Number of points in 2D profiles for ordinates. The number of points in abscissas axis is taken from 1Dprofiles nX. It is not recommended that this parameter is too high in order to save memory.

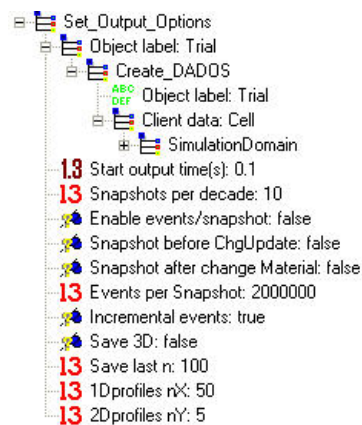


Figure B.25: Set_Output_Options command

B.2.18 Surface_IV_gen_rec

After defining another material by means of `Set_Material`, it is necessary to define the interface characteristics. This command is also interesting to simulate oxidation and nitridation processes.

Parameters:

RecL I. Recombination length for interstitials. If this value is zero, it means that surface is a perfect sink for interstitials. If this value is set to “-1”, the surface will neither recombine nor emit interstitials. This parameter must be expressed in NANOMETERS.

SuperSat I. Prefactor of emission for interstitials. This value is only to initialize. DADOS uses another value, specified in the DDP file.

RecL V. Recombination length for vacancies. If this value is zero, it means that surface is a perfect sink for vacancies. If this value is set to “-1”, the surface will neither recombine nor emit vacancies. This parameter must be expressed in NANOMETERS.

SuperSat V. Prefactor of emission for vacancies. This value is only to initialize. DADOS uses another value, specified in the DDP file.

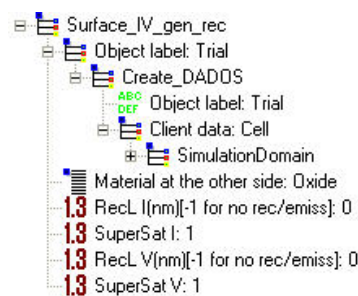


Figure B.26: `Surface_IV_gen_rec` command

B.2.19 Take_Snapshot

When this command is found in a simulation, UVAS gets a snapshot of current configuration and is saved in the final data structure.

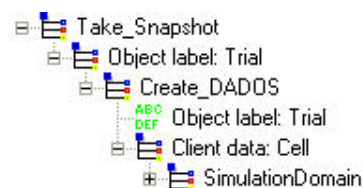


Figure B.27: `Take_Snapshot` command

B.3 Running a script

Once defined a script, please follow these steps to run it:

1. For simulating the script, please click on **Simulation** -> **Start**.
2. Simulation can be paused and continued when necessary, or stopped. For doing this, click on **View** menu (figure B.28). When the simulation is paused, commands which have not been executed can be eliminated or other comands can be added.
3. When the simulation has finished, a message will appear in the Messages Window indicating “Script done”. Now, the results can be saved by selecting **File** -> **Save...**, and a UVA file will be created. Now, the UVA file contains the results which can be opened with UVAS, but the script used cannot either be modified or run again. Therefore, it is highly recommended not to run an original script if you want to simulate it several times (copy it and give a different name instead).

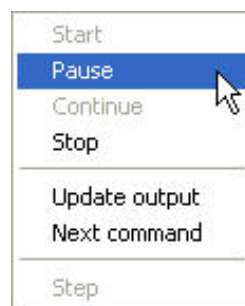


Figure B.28: Pausing a simulation

Notice that when a command has been fully executed in a simulation, a tick sign appears on its symbol in the Commands Window.

Other options:

Update output. Creates an snapshot.

Next command. Skips the command which is being currently executed and runs the next one.

Next command [NOT IMPLEMENTED].

B.4 Data files

UVAS uses several types of data files in the commands to add external data to the simulations and also in the DDP file. In general, these files are organised in two columns, with pairs of data, like in abscissas and ordinates axis.

B.4.1 In-plane lattice parameter

No interpolation is made in the in-plane lattice parameter. The program only maintains the value until the next one. Data (x, y) must be numbers. Pairs of data must be in different lines. See figure B.29.

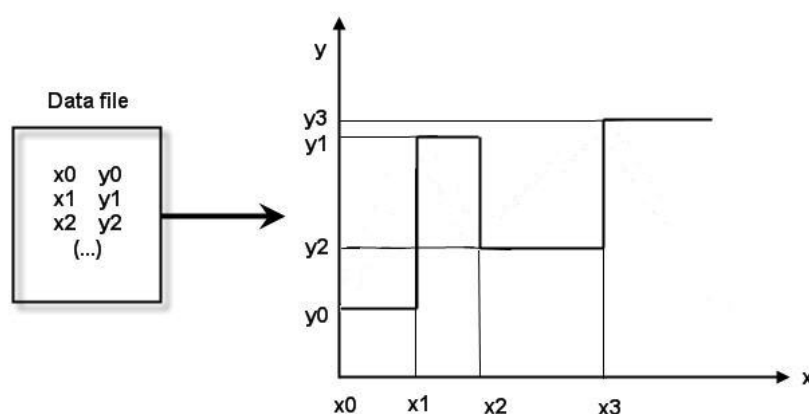


Figure B.29: In-plane lattice parameter structure

B.4.2 DDP file (I): One variable dependence. Binding energies

A linear interpolation is made among discrete data. A “-1” is required at the end of the list to indicate DADOS that there are no more data. If a value is not included, DADOS uses the default value. Data (x, y) must be numbers. Pairs of data must be in different lines. See figure B.30.

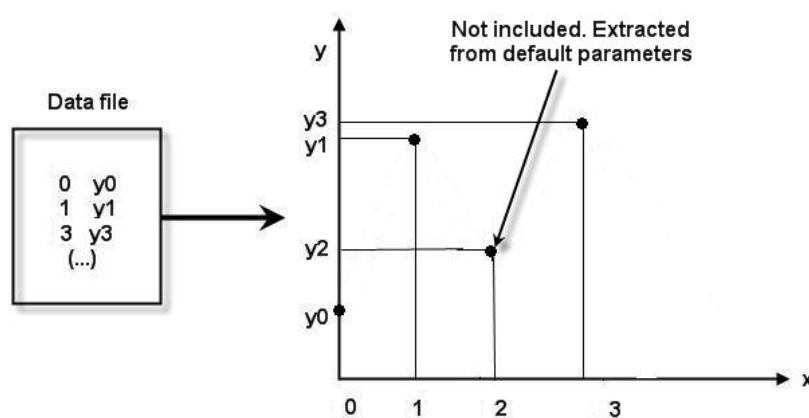


Figure B.30: DDP file (I): Onv variable dependence. Binding energies structure

B.4.3 DDP file (II): One variable dependance. Amorphous pocket energies

A linear interpolation is made among discrete data. A “-1” is required at the end of the list to indicate DADOS that there are no more data. Data (x, y) must be numbers. Pairs of data must be in different lines. See figure B.31.

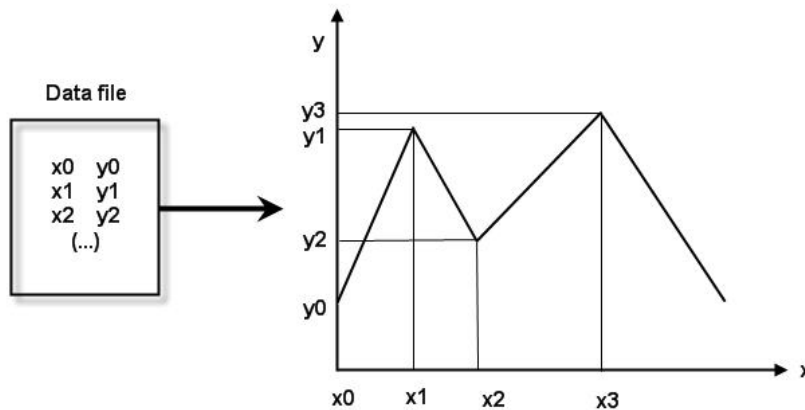


Figure B.31: DDP file (II): One variable dependance. Amorphous pockets energies structure

B.4.4 DDP file (III): Two variables dependance

Data here are organized in a matrix where the first two columns indicate the index while the third one is used for the parameter value. A “-1” is required at the end of the list to indicate DADOS that there are no more data. Data (x, y) must be numbers. It is not necessary that the data are in columns; DADOS will read them in order. An example is shown in figure B.31.

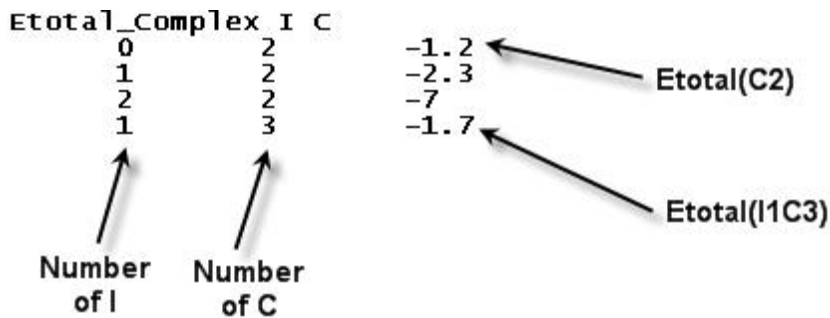


Figure B.32: DDP file (III): Two variables dependance structure

B.4.5 DA2IN files

No interpolation is made. Data (x, y) must be numbers. Pairs of data must be in different lines. See figure B.33.

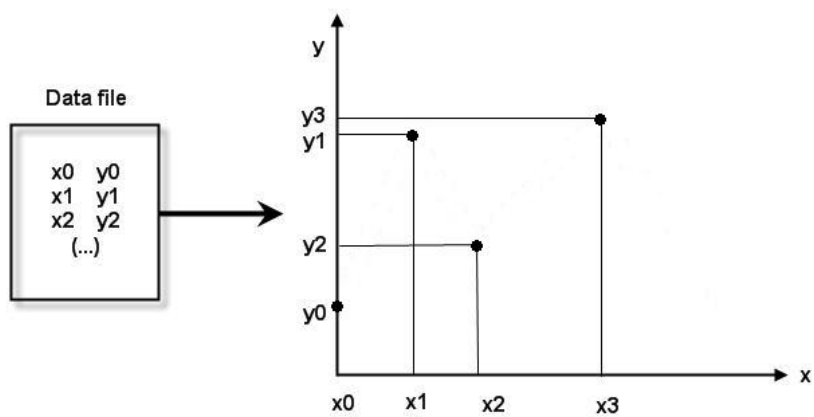


Figure B.33: DA2IN file structure

UVAS Help (III): Particles and defects

DADOS implements both particles and defects. According to atomistic theories [3], only particles in defects are handled in DADOS.

C.1 Particles

In table C.1 implemented particles in DADOS are shown.

Comments

- The “Material” column indicates the material where the particle can be found. For silicon, silicon-germanium [TO BE DEVELOPED] is included, which is a similar structure but with different lattice parameter.
- We use “P” to indicate positive state of charge (plus) and “M” to indicate a negative state of charge (minus).
- The symbol of phosphorous in DADOS is “Ph” instead of the traditional “P” because this one is used to indicate positive state of charge.
- DADOS does not describe the microscopic configuration. For instance, a pair boron plus interstitial is the same for DADOS than a boron atom in interstitial position; in both configurations, there is a boron atom plus an extra atom.

C.2 Defects

DADOS uses these kinds of defects for simulations:

- Amorphous.

- Amorphous pockets (AmorphousPockets).
- Complexes (Complex).
- Dislocation loops (DLoops).
- Interstitials in $\{311\}$ (I311).
- Platelets [TO BE DEVELOPED].
- Point defects (PointD).
- Silicon interface (SiInterface).
- Supersaturation (SuperSat).
- Voids.

Supersaturation is not a defect but are included here for an easier handling and visualization.

DADOS distinguishes between events and interactions for simulating:

Events happen by themselves, with a frequency that depends on the temperature. For example: point defects jumps.

Interactions are related with capture distance. As we will see later, the only mobile defects implemented in DADOS are point defects, and therefore the interactions are going to take place between (mobile) point defects and any other defect. For example: clusters growth. Interactions occur in DADOS depending on:

- Whether or not the interaction is allowed,
- involved barrier energies,
- charge states.

To clarify ideas, emissions are always events whereas captures are always interactions. Events

Particles in DADOS are always associated to defects, which are the ones used to create events.

The events are shown in the messages window, as we can see in the figure C.1. These events are basically associated to jumps, because these are the most frequent ones.

```
Simulation 18:07:03: Time [s] =0.15951678, Temp. [C] = 26.85, Events = 1468
Simulation 18:07:04: Time [s] =0.20023437, Temp. [C] = 26.85, Events = 1565, 97 Events/s.
Simulation 18:07:04: Time [s] =0.25210419, Temp. [C] = 26.85, Events = 1690
Simulation 18:07:04: Time [s] =0.31710092, Temp. [C] = 26.85, Events = 2192
Simulation 18:07:04: Time [s] =0.39899539, Temp. [C] = 26.85, Events = 2252
Simulation 18:07:04: Time [s] =0.50168725, Temp. [C] = 26.85, Events = 2480
Simulation 18:07:04: Time [s] =0.63114262, Temp. [C] = 26.85, Events = 2583
Simulation 18:07:05: Time [s] =0.79502835, Temp. [C] = 26.85, Events = 3043, 460 Events/s.
```

Figure C.1: Events in the messages window

All implemented defects are neutral except, in some cases, point defects.

C.2.1 Amorphous

Description

Amorphous silicon.

Particles involved

None.

Events allowed

- Recrystallization.

Interactions allowed

None.

Related DADOS mechanisms

- Amorphization.
- Recrystallization.
- Trapping.

Comments

1. It is important to make the difference between amorphous as a defect and amorphous box. The latter is a box whose concentration of native defects is above a certain threshold. But amorphous is also one of these defects that belongs to an amorphous box.
2. When a dopant is in an amorphous box, it is not considered to belong to the amorphous defect but is considered to be a new point defect to whose name is added "AmorphousSi", e.g. "BAmorphousSi". We call this "impurities in other structures".
3. Both interstitials and vacancies are used for visualization, but they are not actually amorphous particles. Amorphous boxes contribute to the interstitials and vacancies profiles with concentration values similar to the amorphization threshold.
4. Internally, DADOS keeps the balance of I-V particles.
5. Amorphous regions are formed from amorphous pockets, and they are silicon with a high density of interstitials and vacancies.

6. Amorphous regions can capture amorphous pockets and point defects but they do not go inside, as migration prefactor for these particles in amorphous regions is set to zero. They keep trapped in the surface and they can be emitted afterwards.

C.2.2 AmorphousPockets

Description

Amorphous pocket: Initial damage structure, with interstitials and/or vacancies in an irregular shape.

Particles involved

Single neutral native defects.

Events allowed

- IV recombination, i.e. shrinkage.
- Neutral interstitials emission.
- Neutral vacancies emission.

Interactions allowed

- I capture, but only if:
 - Captured I is neutral or,
 - captured I is charged but the amorphous pocket contains one or more vacancies.
- V capture, but only if:
 - Captured V is neutral or,
 - Captured V is charged but the amorphous pocket contains one or more interstitials.
- Bi capture, but only if:
 - Amorphous pocket contains one or more interstitials and one or more vacancies.

Related DADOS mechanisms

- Amorphization.
- Amorphous pockets to I311 transformation.

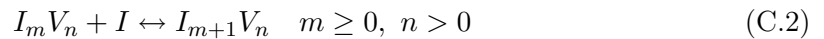
- Amorphous pockets to voids transformation.
- Captures.
- Emissions from defects.
- Shrinkage.

Comments

1. Small and irregularly shaped I clusters or V clusters are regarded as a particular case of amorphous pockets with only one type of particles.
2. Amorphous pockets can shrink due to emissions and recombinations. However, although both effects are implemented in DADOS, the latter is more important, as its frequency is much higher.
3. Particles in amorphous pockets are immobile.
4. Obviously, emission of interstitials or vacancies is allowed only if there are any.
5. Let's suppose some cases:



This reaction is allowed in both directions as DADOS implements both emission and capture of neutral particles. However, it is not allowed the emission nor capture of charged particles. If this phenomena were implemented, then emission frequency would depend on Fermi level. What DADOS does is to maintain this rate constant and include the charges effects in charge update handling.



This reaction is allowed in both directions but the the reverse one (\leftarrow) is not frequent due to the shrinkage occurs before more likely.



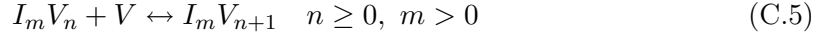
“q” represents the charge. This reaction is only allowed in the forward direction. In DADOS, it is not allowed the emission of charged particles. If this phenomenon was implemented, then emission frequency would depend on Fermi level. What DADOS does is to maintain this rate constant and the charges effects are included in charge update handling.

6. Let's suppose some cases:

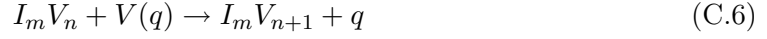


This reaction is allowed in both directions as DADOS implements both emission and capture of neutral particles. However, it is not allowed the emission nor capture of charged particles. If this phenomena were implemented, then emission frequency would depend on

Fermi level. What DADOS does is to maintain this rate constant and include the charges effects in charge update handling.



This reaction is allowed in both directions but the the reverse one (\leftarrow) is not frequent due to the shrinkage occurs before more likely.



“q” represents the charge. This reaction is only allowed in the forward direction. In DADOS, it is not allowed the emission of charged particles. If this phenomenon was implemented, then emission frequency would depend on Fermi level. What DADOS does is to maintain this rate constant and the charges effects are included in charge update handling.

7. In order to simulate the immobilization of B_i s by amorphous pockets, we assume the following reaction:



We assume that the interaction of B_i s with an amorphous pocket with only one type of particle (I_m or V_n) is not allowed because there is no evidence that boron activation in vacancy clusters or boron pile-up in interstitial clusters is observed experimentally.

8. With reasonable values of binding energy (E_b), the rate of the mechanism $V_n \rightarrow V_{n+1} + I$ or $I_n \rightarrow I_{n+1} + V$ is negligible. Therefore, this event is not implemented. WARNING: If binding energy is higher (or much higher) than formation energy, the simulation can give inaccurate results as the suppositions are not true.
9. The trasformation from an amorphous pocket with only one type of particle to either a I311 or a void is a particular type of event, depending on the temperature.
10. Amorphous pockets accumulation generates amorphous regions.
11. Amorphous pockets are considered to be electrically neutral.

C.2.3 Complex

Description

Binary complex, i.e., clusters of impurities (dopants) and interstitials or vacancies.

Implemented types: $I_m B_n$, $I_m C_n$, $V_m A s_n$, $V_m O_n$, $V_m F_n$, $V_m P h_n$. “n” and “m” are the number of particles of each type. “m” can be zero, therefore impurities clusters are included here.

Particles involved

Two types of particles:

Back particles. Single neutral “native defects”.

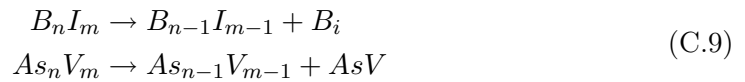
Front particles. Single impurities.

Events allowed

- Back particle emission: emits a back particle.
- Front particle emission:
 - Mobile particles are emitted as single particles (e.g. fluorine).



- Immobile particles are emitted as a pair, for example:



- Complementary particle emission (e.g. $V_m A s_n \rightarrow V_{m+1} A s_n + I$). This event is a generalization of Frank-Turnbull mechanism.

Interactions allowed

- Neutral point defect capture,
 - with growth (e.g. $V_n A s_m + V \rightarrow V_n A s_{m+1}$) or,
 - with recombination (e.g. $V_n A s_m + A s_i \rightarrow V_{n-1} A s_{m+1}$).
- Binary complex capture (e.g. $V_n A s_m + A s V \rightarrow V_{n+1} A s_{m+1}$).

Related DADOS mechanisms

- Captures.
- Complementary particle emission.
- Complex implementation.
- Emissions.

Comments

1. Emitted particles are neutral and, consequently, the reverse processes of these (interactions) are only allowed with neutral point defects, in order to maintain microscopic reversibility.
2. Complementary particle emission is implemented here and not in amorphous pockets because in complexes it is much more frequent. Notice that in some particular cases, due to the binary complex energies, this process could be frequent; therefore, in this case, it would not be consistent to allow recombination with charged native point defects.
3. Here, interactions are the reverse processes to events.
4. Recombination is immediate as, in DADOS, activation energy for complex shrinkage is assumed to be zero.
5. Binary complexes are considered to be neutral and they are responsible for electrical deactivation of some dopants (such as boron or arsenic).
6. Binary complexes dissolution implies an electrical reactivation.
7. Particles in binary complexes are immobile.

C.2.4 DLoops

Description

Dislocation loop: Planar extended defect of interstitials in $\{111\}$ orientations.

Particles involved

Neutral interstitials.

Events allowed

- Neutral interstitials emission.

Interactions allowed

- Captures of:
 - Neutral interstitials.
 - Interstitial boron.

Related DADOS mechanisms

- Captures.
- DLoops implementation.
- I311 to dislocation loops transformation.
- Pile-up.

Comments

1. Perfect dislocation loops are not implemented in the current version of DADOS.
2. Neutral vacancies emission and captures are not implemented yet. [TO BE DEVELOPED]
3. Interactions for dislocation loops are the reverse process of neutral interstitials emission.
4. Particles in dislocation loops are immobile.
5. In the current version of DADOS, dislocation loops in DADOS are formed from I311.

C.2.5 I311

Description

Extended defect (cluster) of neutral interstitials in $\{311\}$ orientations.

Particles involved

Neutral interstitials.

Events allowed

- Neutral interstitial emission.
- Transformation into a dislocation loop (large I311s).

Interactions allowed

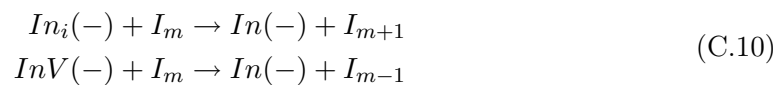
- Neutral interstitial capture (growth).
- V capture and recombination.
- Capture of some types of dopants, although only indium is implemented.

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets to I311 transformation.
- Captures.
- Emissions.
- I311 implementation.
- I311 to dislocation loops transformation.
- Pile-up.

Comments

1. Particles in I311 clusters are immobile.
2. Recombination is immediate, as in DADOS, activation energy for shrinkage is assumed to be zero. Captures and recombination with charged vacancies is allowed as vacancy emission from I_m structures is going to be very unlikely.
3. When a mobile Indium-vacancy or Indium-interstitial pair meets a 311 cluster, the Indium atom piles up:



This way, the indium atom maintains the negative charge. Other dopants in this situation are NOT observed experimentally.

4. I311 are normally created from amorphous pockets with only interstitials at high enough temperature.

C.2.6 Platelet [TO BE DEVELOPED]

Description

Platelet. Extended defect in $\{100\}$ orientations.

Particles involved

Neutral vacancies and hydrogen.

Events allowed

- H emission.

Interactions allowed

- H capture.

Comments

1. Particles in platelets are immobile.
2. This defect is under development.

C.2.7 PointD

Description

Native point defects. They can be:

- Native defects, such as interstitials, vacancies, neutral (I, V) or charged (IP, IM, VM, VMM, VP, VPP).
- Substitutional dopants pairs, such as B_i (boron + interstitial), AsV (arsenic + vacancy), etc.

Particles involved

Any particle.

Events allowed

- Migration.
- Break-up (for pairs only):
 - Creating an interstitial (e.g. $As_i \rightarrow As + I$).
 - Creating a vacancy (e.g. $Asv \rightarrow As + V$).

Interactions allowed

- A point defect can interact only with another point defect.
- Please, see DDP file, section PointD Interactions. PointD Interactions are set to be false by default. To enable one interaction please use the keyword `EnableInteraction` and then write the two species to interact, the result of the interaction (AmPock, PointD or

ImpCluster) and the type of ImpCluster (I or V) or the resulting point defect (none for AmPock). For instance, if we want to enable the interaction between boron and interstitial to create an interstitial boron, we should add to DDP file: `EnableInteraction I B PointD Bi`.

Related DADOS mechanisms

- Break-up.
- Charge update.
- Particle jumps.

Comments

1. All mobile particles are point defects, but not all point defects are mobile. All defects are implemented in the same way, and for those which are immobile, the prefactor of migration is set to zero.
2. Break-up mechanism is always allowed, but the reverse reaction can be canceled if required. For doing this, please use `EnableInteraction` keyword in the DDP file.
3. DADOS permits the reactions that keep the charge state. That means:
 - All the recombinations are allowed.
 - Non-recombination reactions are allowed only if they keep the charge state.
4. It is not recommended to allow a reaction in which the charge is not kept. For instance, `EnableInteraction IP C PointD Ci`, because `CiP`, the hypothetical result, is not implemented, and problems of microscopic reversibility would appear.
5. Electrical interactions, in DADOS, are implemented by Fermi methods and not by Coulomb theories. Thus, it is not allowed the interaction of the same electrical type particles in order to avoid repulsions.
6. In the `EnableInteraction` sentence, we do not specify the charge in the resulting point defect because DADOS handles it. For instance: `EnableInteraction I B PointD Bi`, will give as a result `BiM`, or `EnableInteraction I AsVM PointD As` will give as a results `AsP` because in the recombination process it is not necessary to keep the charge.

C.2.8 SilInterface

Description

Silicon interface. Two materials are needed here. One of them must be silicon and the other can be silicon oxide, silicon nitride or ambient (these are the ones currently implemented in DADOS).

Particles involved

Any particle.

Events allowed

- Single neutral native defects emission, but DADOS studies whether the box has or not amorphized.
- Dopants emission.

Interactions allowed

- Captures of:
 - Interstitials.
 - Vacancies.
 - Interstitial-arsenic.
 - Vacancy-arsenic.
 - Interstitial-boron.
 - Interstitial-carbon.
 - Fluorine.
 - Interstitial-phosphorous.
 - Vacancy-phosphorous.

Related DADOS mechanisms

- Captures.
- Segregation.
- Trapping.

Related physical magnitudes

- Recombination length.
- Solubility.

Comments

1. Events are the reverse processes of captures.
2. Amorphous silicon is not managed as an interface because it doesn't trap nor emit interstitials or vacancies (at least not in the same way as others).
3. Both interactions and events are only implemented with neutral particles.
4. The probability of capture of interstitials and vacancies is controlled by the recombination length, defined in the DDP file by the parameter `RecLenm`.
5. The emission rate for interstitials and vacancies can be set different from the equilibrium one by using the command `SuperSat`.
6. No interfaces are considered at the border between silicon and silicon-germanium or silicon-germanium and silicon-germanium (alloys). [TO BE DEVELOPED]
7. Silicon interface acts as an interstitial and vacancy sink.

C.2.9 SuperSat

See supersaturation in chapter F.

Comments

1. Supersaturation is included here to help visualization. After choosing the particle (interstitials or vacancies), you are allowed to choose the SuperSat option in defects.

C.2.10 Voids

Description

Voids. Rounded extended defects (clusters) of neutral vacancies.

Particles involved

Neutral vacancies.

Events allowed

- Neutral vacancies emission.
- Neutral interstitials emission. [TO BE DEVELOPED]

Interactions allowed

- Neutral vacancies capture (growth).
- Interstitials capture and recombination.

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets to voids transformation.
- Captures.
- Emissions.
- Voids implementation.

Comments

1. Recombination is immediate, as in DADOS, activation energy for void shrinkage is assumed to be zero.
2. Particles in voids are immobile.

Table C.1: Particles in DADOS

| DADOS name | Definition | Material |
|--|-----------------------------------|-------------------|
| Single neutral “native defects” | | |
| I | Neutral interstitial | Silicon |
| V | Neutral vacancy | Silicon |
| Charged “native defects” | | |
| IP | Positive interstitial | Silicon |
| IM | Negative interstitial | Silicon |
| VP | Positive vacancy | Silicon |
| VPP | Doubly positive vacancy | Silicon |
| VM | Negative vacancy | Silicon |
| VMM | Doubly negative vacancy | Silicon |
| Single impurities | | |
| O | Oxygen | Silicon |
| C | Carbon | Silicon |
| B | Negative boron | Silicon |
| F | Fluorine | Silicon |
| H | Hydrogen | Silicon |
| In | Negative indium | Silicon |
| As | Positive arsenic | Silicon |
| Ph | Positive phosphorous | Silicon |
| Sb | Positive antimony | Silicon |
| Impurity-“native defect” pairs | | |
| Ci | Interstitial-carbon | Silicon |
| Bi | Neutral interstitial-boron | Silicon |
| BiP | Positive interstitial-boron | Silicon |
| BiM | Negative interstitial-boron | Silicon |
| InV | Neutral vacancy-indium | Silicon |
| InVM | Negative vacancy-indium | Silicon |
| Ini | Neutral interstitial-indium | Silicon |
| IniM | Negative interstitial-indium | Silicon |
| AsV | Neutral vacancy-arsenic | Silicon |
| AsVP | Positive vacancy-arsenic | Silicon |
| AsVM | Negative vacancy-arsenic | Silicon |
| Asi | Neutral interstitial-arsenic | Silicon |
| AsiP | Positive interstitial-arsenic | Silicon |
| PhV | Neutral vacancy-phosphorous | Silicon |
| PhVP | Positive vacancy-phosphorous | Silicon |
| PhVM | Negative vacancy-phosphorous | Silicon |
| Phi | Neutral interstitial-phosphorous | Silicon |
| PhiP | Positive interstitial-phosphorous | Silicon |
| Impurities in other structures | | |
| AsAmorphousSi | Arsenic in amorphous | Amorphous silicon |
| AsNitride | Arsenic in nitride | Silicon nitride |
| AsOxide | Arsenic in oxide | Silicon oxide |
| BAmorphousSi | Boron in amorphous | Amorphous silicon |
| BNitride | Boron in nitride | Silicon nitride |
| BOxide | Boron in oxide | Silicon oxide |
| PhAmorphousSi | Phosphorous in amorphous | Amorphous silicon |
| PhNitride | Phosphorous in nitride | Silicon nitride |
| PhOxide | Phosphorous in oxide | Silicon oxide |

UVAS Help (IV): Viewing results

D.1 Data structure

At certain moments during the simulation, UVAS collects all the information about it and saves it. This is called a **snapshot**. Data structure are then build by snapshots, which can be seen as vector elements. See figure D.1.

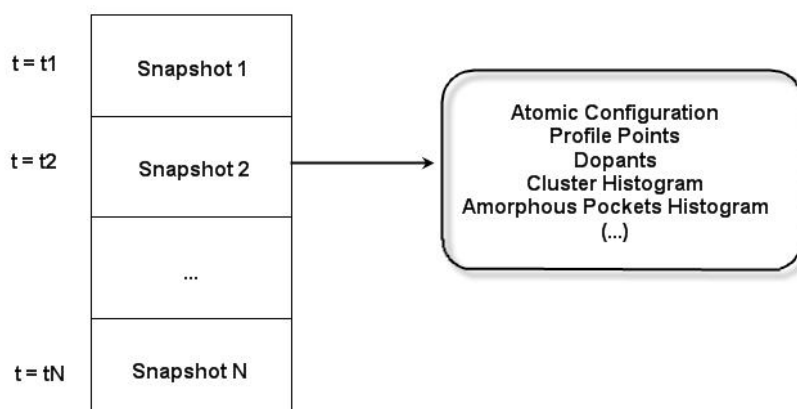


Figure D.1: Snapshots

In each snapshot, you can find a lot of information about the current simulation. These data include:

Time in seconds.

Number of events occurred.

Temperature in centigrade degrees.

SheetRho in ohms.

Atomic configuration: including information listed:

- Coordinates (x, y, z) : Positions where an element (defect point, dopant, ...) is found.

- Particle type.
- Dopant type.
- Defect type.
- Defect size.

Profile points. A plot of profiles along the x axis. The number of points shown is defined by the command `Set_Output_Options`. Some data are shown here:

- x: Depth.
- Electrons and holes per cm^{-3} .
- Conduct and valence band energies in eV.
- Biaxial strain: Lattice parameter deviation from the silicon standard.
- Ge fraction.
- Ge per cm^{-3} .
- Average concentration: Concentration of mobile particles (interstitials and vacancies, either single or associated with a dopant). As it is difficult to get these particles in each snapshot, UVAS counts the hops in order to achieve an accurate approach, i.e. a time integration is carried out.
- Instantaneous concentration of different particle types: Concentration of immobile particles.
- Total number of particle types. The sum of the last two parameters.

Dopants XY. Dopants concentration distribution in XY plane, including information listed:

- Position in the simulation box.
- Defect type: See defects.

Extended defect histogram gives full information about I or V clusters.

Amorphous pockets histogram (structure) provides with information about the number of interstitials and vacancies in amorphous pockets and its concentration.

Amorphous pockets histogram (min(I,V)) gives the concentration of the minimum number of interstitials and vacancies in amorphous pockets.

Amorphous pockets histogram (I+V) gives the concentration of the total number of interstitials and vacancies in amorphous pockets.

Binary complex map collects information about binary complexes during process, such as interstitials with B or C, or vacancies with As, F, O or P.

Bulk shows the concentration of amorphous regions, amorphous pockets, complexes, dislocation loops, 311 clusters, platelets, point defects, Si interfaces, interstitial supersaturation and voids in the bulk.

Interface stores the number of particles in the interface between material 0 and material 1.

Data structure can be accessed through Data browser in UVAS interface. See figure D.2.

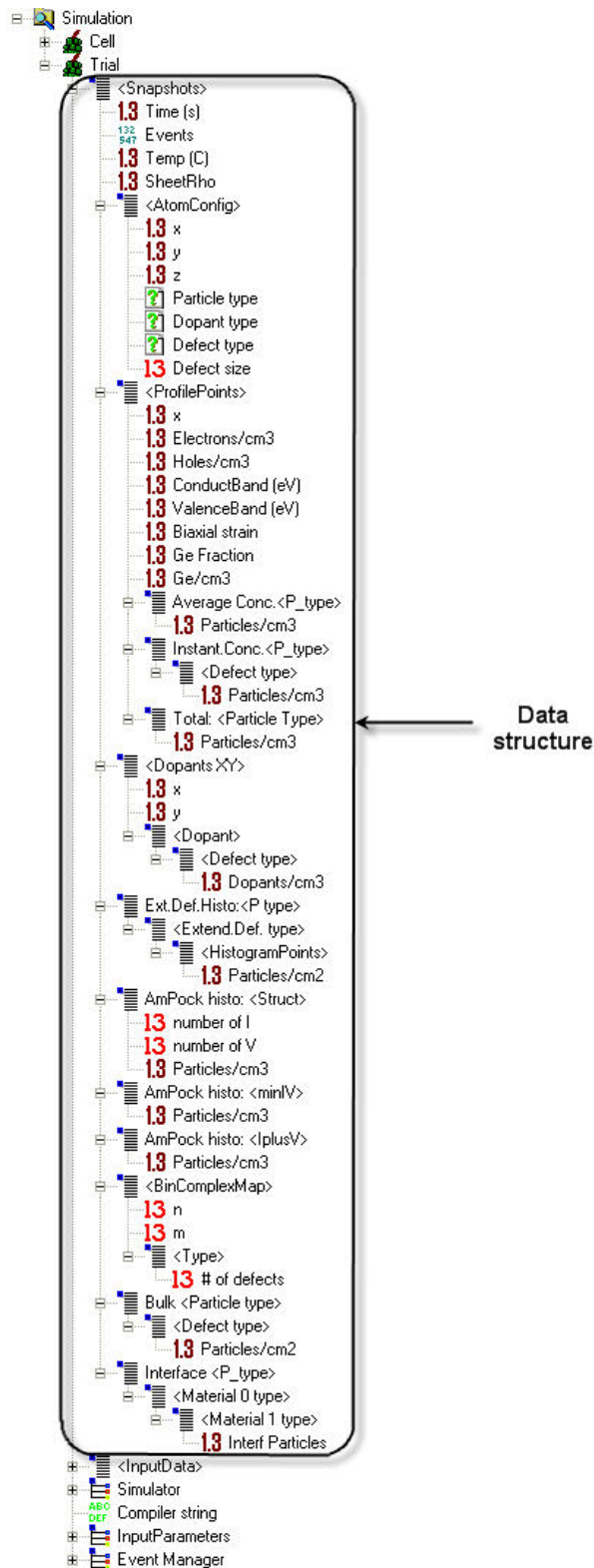


Figure D.2: UVAS data structure

D.2 Extracting and viewing results

When a simulation has started, data structure is created and is being filled with information from the current simulation. Remembering the data structure, we can work with it as elements

of a vector. Each element is a snapshot, and each snapshot has a lot of information, some of them can be seen as new vectors.

Two ways are available to see simulation results: text and graphic mode.

D.2.1 Text mode

Use Data browser in order to access data values. First of all, please click on “Snapshots” in the results tree. By using the vector treatment section, you can choose the snapshot whose information you want to access to. In the example shown in figure D.3, simulation has yielded 9 snapshots.

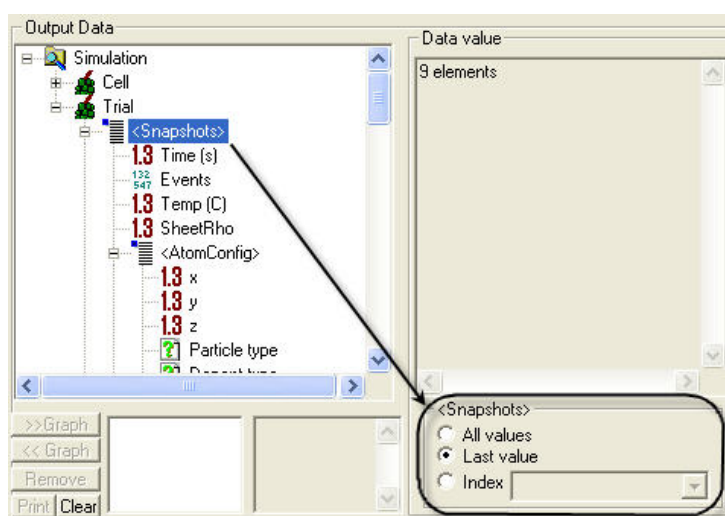



Figure D.3: Accessing snapshots

Once selected, you can click on any element of the snapshot. Please notice that some elements can be vectors, in whose case, this symbol will appear: . In this case, you can select new elements from these vectors, in an iterative way (see figure D.4).

D.2.2 Graphic mode

Most of times, it is much better to see graphics in order to analyse the results. Every element from data structure can be graphically represented. Basically, two types of graphics are implemented in UVAS:

2D Graphs. Used for representing profiles in one dimension (depth, x), concentrations versus time, etc.

3D Graphs. Used for representing atomic profiles.

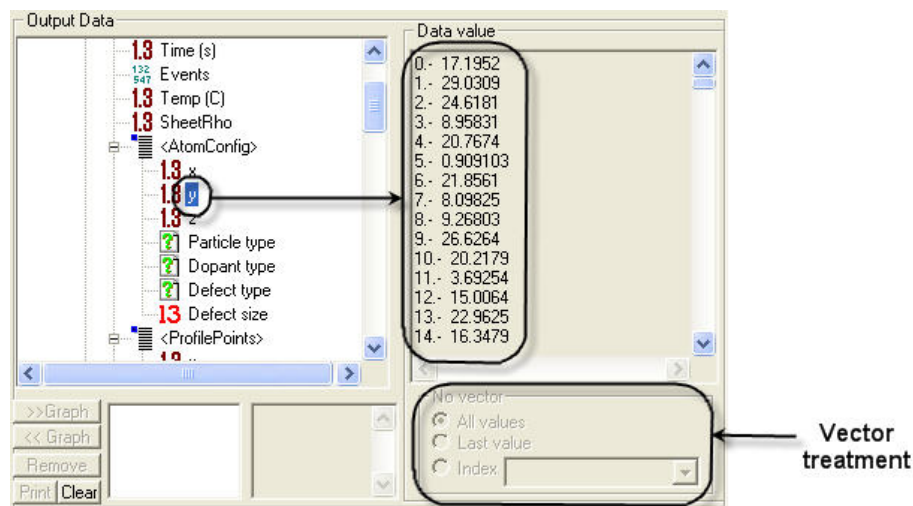


Figure D.4: Vectors treatment

D.2.3 Transferring data into a file

Sometimes, it might be useful to have the results of a simulation in a text file. For doing this (see figure D.5):

1. Click on the series to save in the Series Selector.
2. Click on “» Graph” in the Data Printer. You will see the series title in the box next to the button.
3. Click on “Print” and you will get the results in a text mode.
4. Select all the text by right clicking and copy it into a file.

“Clear” button is used to erase the content shown in the box whereas “Remove” eliminates the series in the Data Printer.

D.3 2D Graphs

2D graphs UVAS implementation has an appearance as shown in the figure D.6.

XY coordinates change automatically only by moving the mouse course onto the graph area.

Subwindows appear by double-clicking on the indicated areas of the 2D graph window.

Title options. Both title and font size can be changed.

Legend properties. Items:

- Margin.

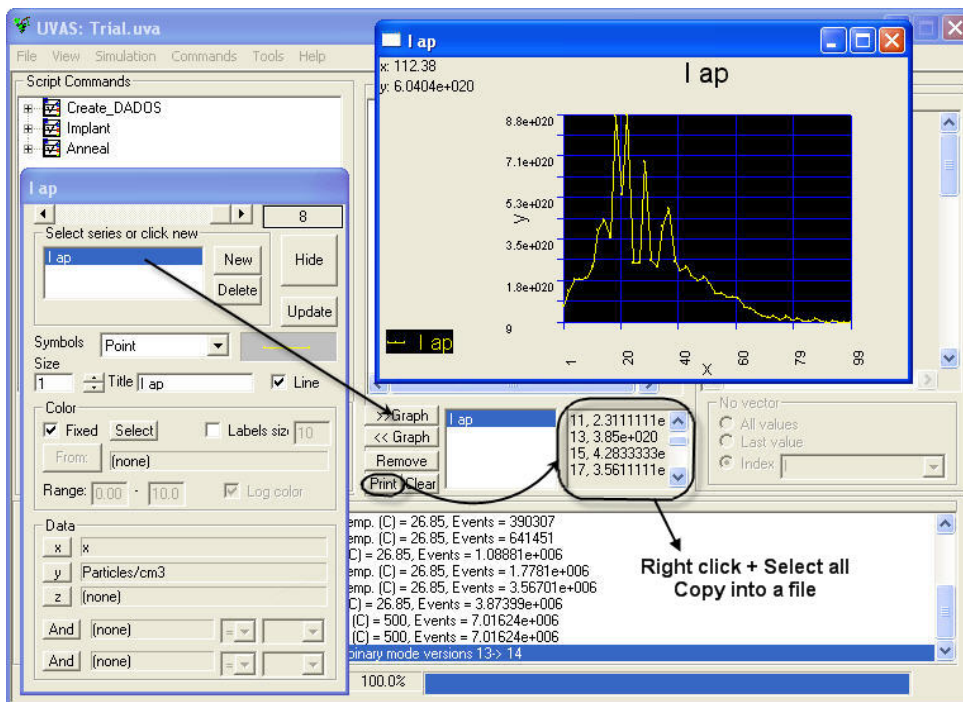


Figure D.5: Transferring data into a file

- Text: Size of text.
- Number of symbols: Number of symbols in the legend. They represent values from simulation in the graph.

Axis options. Valid for both abscissa and ordinate axis. Items:

- Title.
- Axis values: You can limit the axis values and setting tics for it. Log scale and grid are also available in UVAS.

Series selector. This is the most important part of UVAS graphics. Here is where UVAS is indicated what to draw. In terms of appearance, you can set here the title for each series, and the symbols and sizes employed.

If you right click on the draw area (see figure D.7), you will find interesting options:

Autoscale. Automatically adjusts axis to their minimum and maximum values.

Series... Opens series selector.

Export... Creates files with different formats (GIF, PNG, EPS,...).

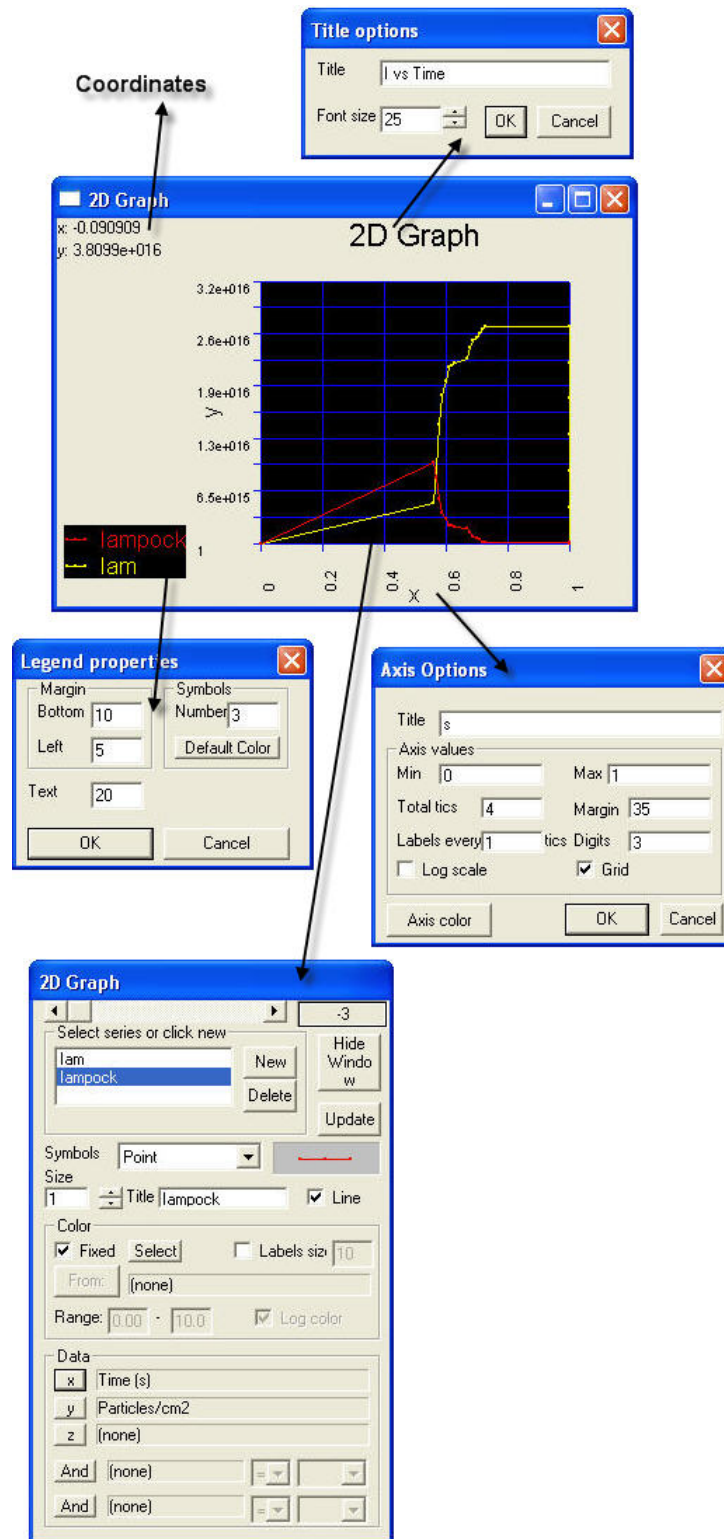


Figure D.6: 2D graph options

D.4 3D Graphs

3D graphs in UVAS is basically used to plot atomic configuration in the simulation box. Its general appearance is shown in the figure D.8.

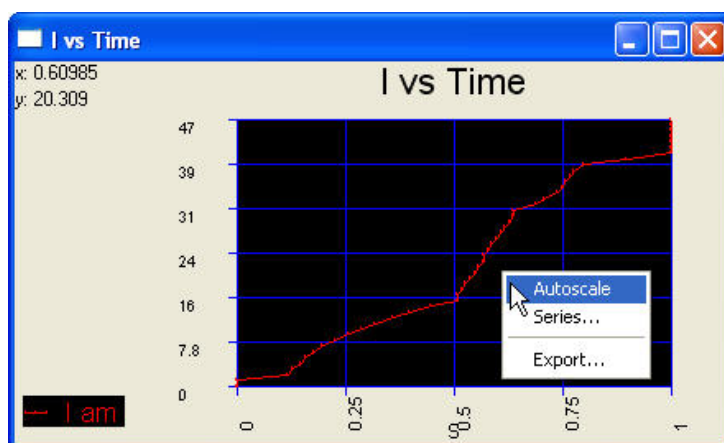


Figure D.7: 2D graph

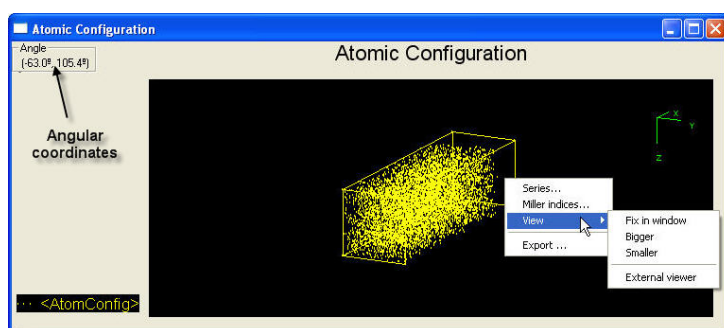


Figure D.8: 3D graph

As can be seen, only interesting elements are plotted (point defects, dopants,...) according to atomistic simulation principles. Coordinates are shown by both angles on the top left corner and by cartesian axis on the top right. If you click on the draw area and keep pushed, you can move the box and therefore change the angle of view.

Many of the available options are the same as in 2D Graphs. By right clicking, a sub-menu with the following options can be accessed:

Series... Opens series selector.

Miller indices. Changes Miller indices.

View... Items:

- Bigger and Smaller: Changes the size of the box.
- Fix in window: It is the autoscale option.
- External viewer.

Export... Creates files with different formats (GIF, PNG, EPS,...). One of the most useful one is the XYZ format, because it generates a file which can be opened with RasMol. Figure D.9 shows an example of this.

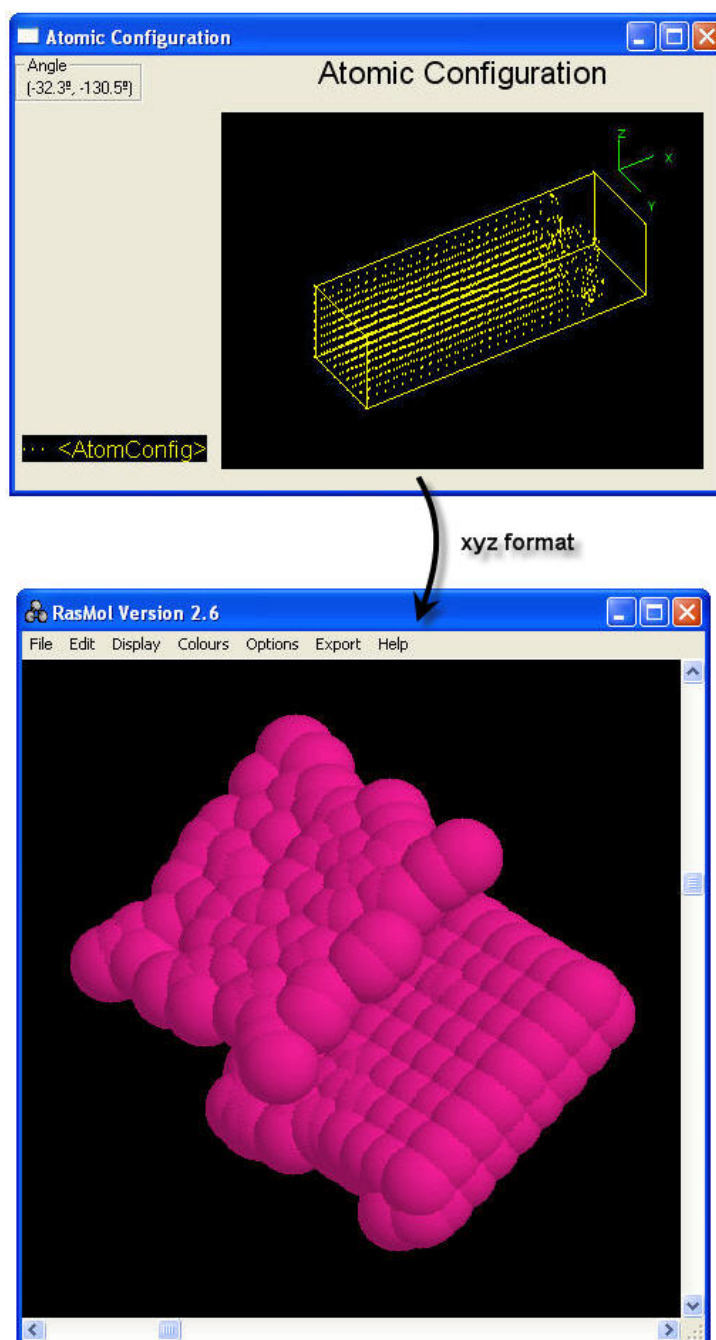


Figure D.9: XYZ format

D.5 Plotting data

For all cases, please create a new 2D or 3D graph, as required. After that, open the results tree and double click on the draw area in order to open Series Selector. See figure D.10.

You can use all the graphs you want and save them. For doing this, click on **View -> Save graphics**. A GPH file will be created, that can be opened for other simulations (it is not compulsory to use it with the same type of simulation as this file does only work with the data

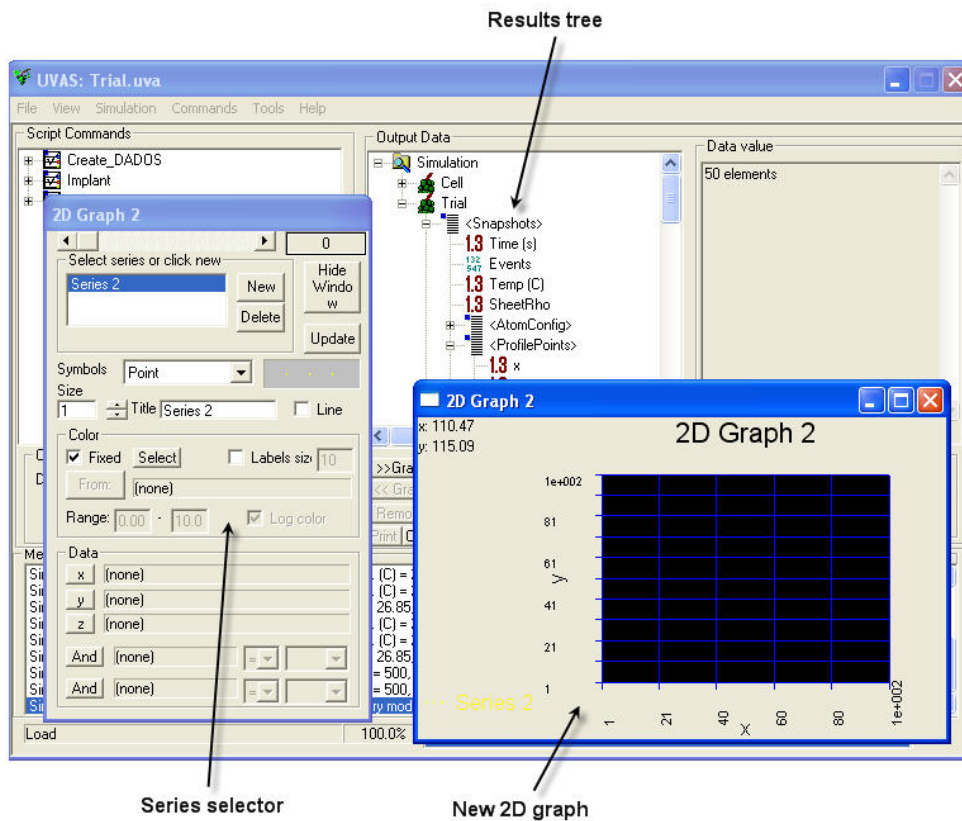


Figure D.10: Creating a new 2D graph

structure, but not with specific scripts).

You only need to know what you want to plot. Remember data and snapshots structures. Choose parameters to be shown in the Data Browser and, when selected, click on “x”, “y” or “z” in the Series Selector. Let’s see some examples.

D.5.1 Plotting the number of electrons or holes versus depth

A new 2D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “Last Value”. We are going to plot only the last snapshot, corresponding to the last simulated time.
2. Open <ProfilePoints> and select “All Values”, because we want to see all the information from the last snapshot.
3. Select “x” and click on “x” in the Series Selector.
4. Do the same with “Electrons/cm³” and “y”.
5. Click on “Update”.

This method is also valid to plot conduction band, valence band, biaxial strain, Ge fraction and Ge concentration. See figure D.11 as example.

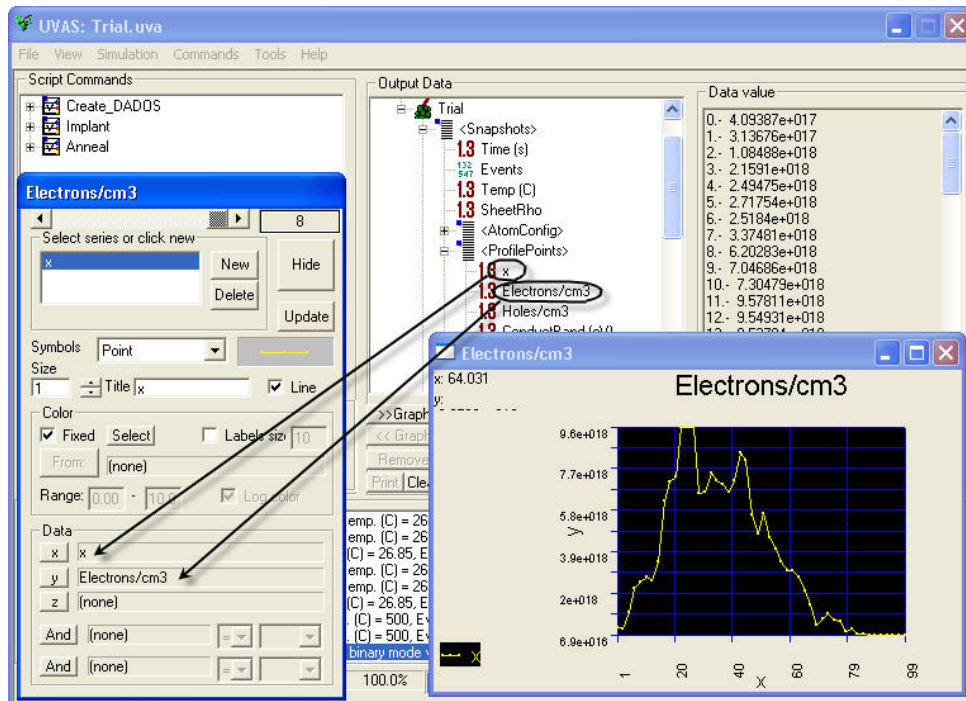


Figure D.11: Plotting the number of electrons or holes versus depth

D.5.2 Plotting the concentration of an immobile type of particle versus depth

A new 2D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “Last Value”. We are going to plot only the last snapshot, corresponding to the last simulated time.
2. Open <ProfilePoints> and select “All Values”, because we want to see all the information from the last snapshot.
3. Select “x” and click on “x” in the Series Selector.
4. Click on “Instant.Conc.<P_type>” and select “Index”, where you will be able to choose the type of particle (I, V, dopants,...).
5. Do the same for <Defect type> and choose the state of the particle (point defect, amorphous,...). Remember you will get plotted here only immobile particles, such as I or V in clusters, amorphous pockets, substitutional dopants,...
6. Click on “y” while “Profile” is selected and update the graph.

See figure D.12 as example.

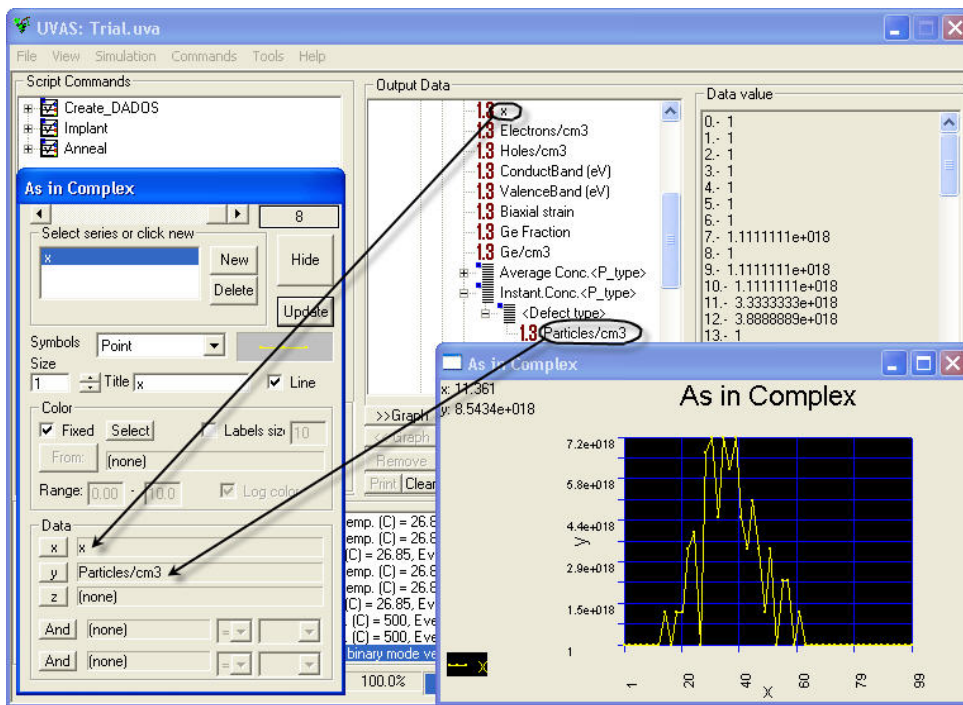


Figure D.12: Plotting the concentration of an immobile type of particle versus depth

D.5.3 Plotting the concentration of a mobile type of particle versus depth

A new 2D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “Last Value”. We are going to plot only the last snapshot, corresponding to the last simulated time.
2. Open <ProfilePoints> and select “All Values”, because we want to see all the information from the last snapshot.
3. Select “x” and click on “x” in the Series Selector.
4. Click on “Average Conc.<P_type>” and select “Index”, where you will be able to choose the type of particle (I, V, dopants,...). Remember you will get plotted here only mobile particles, such as free I or V, interstitial dopants,...
5. Click on “y” while “Particles/cm3” is selected and update the graph.

See figure D.13 as example.

Notice that the concentration here is much lower than in the case of immobile particles, in agreement with theoretical results.

The last option in <ProfilePoints> is “Total: <Particle Type>” which is obviously used to plot both mobile and immobile particles. The algorithm followed to do it is exactly the same than for plotting mobile particles.

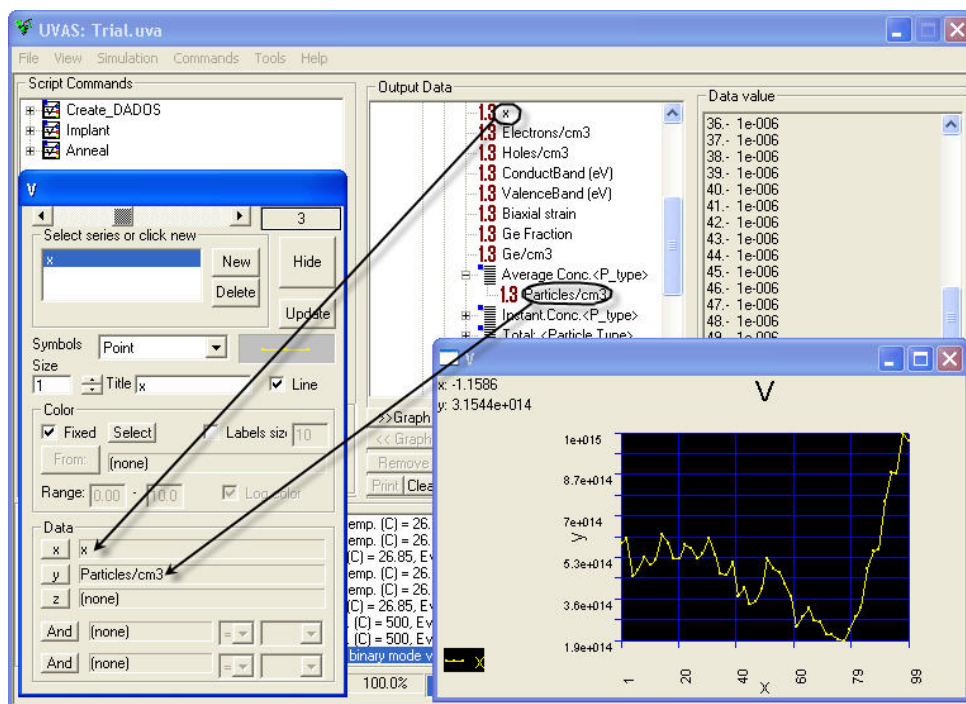


Figure D.13: Plotting the concentration of a mobile type of particle versus depth

D.5.4 Plotting the concentration of a type of particle versus time

A new 2D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “All Values”. We are going to plot all the snapshots, as we want to see the entire simulation.
2. While “Time” item selected, click on “x” in Series selector.
3. Open <ProfilePoints>, select “Index”, and choose the type of particle. If you want to plot immobile particles, do exactly the same for “Instant.Conc.<P_type>” and finally, choose the state of the particle from the “Index” item in <Defect type>. If you want to plot mobile particles, do the same for “Average Conc.<P_type>”.
4. Click on “y” while Profile is selected and update the graph.

See figure D.14 as example.

D.5.5 Plotting the concentration of a type of particle versus temperature

Plotting a concentration versus temperature is similar to the plot versus time. Let’s give an example with the number of electrons. A new 2D graph is required for this.

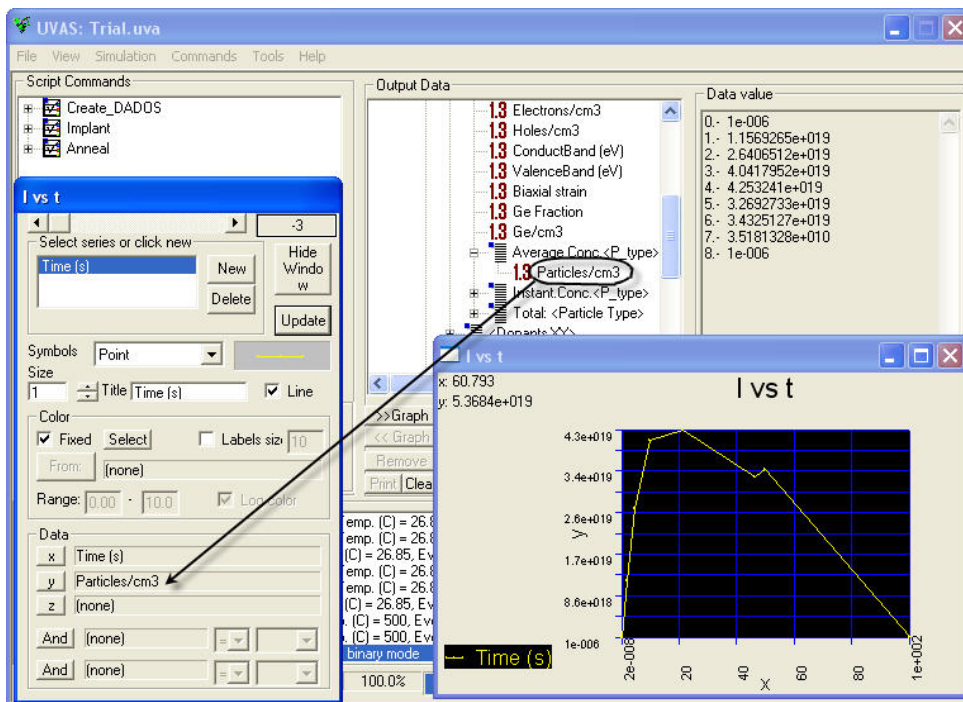


Figure D.14: Plotting the concentration of a type of particle versus time

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “All Values”. We are going to plot all the snapshots, as we want to see the entire simulation.
2. While “Temperature” item selected, click on “x” in Series selector.
3. Open <ProfilePoints> and select “Last Value”.
4. While “Electrons/cm3” item selected, click on “y” in Series selector.
5. Click on “Update”.

See figure D.15 as example.

D.5.6 Plotting the atomic configuration

A new 3D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “All Values”. We are going to plot all the snapshots, as we want to see the entire simulation.
2. Open <AtomConfig> and select “All Values”, because we want to see all the information from the last snapshot.
3. While selected <AtomConfig>, click on “x” and the three dimensions will be automatically set in the Series Selector.

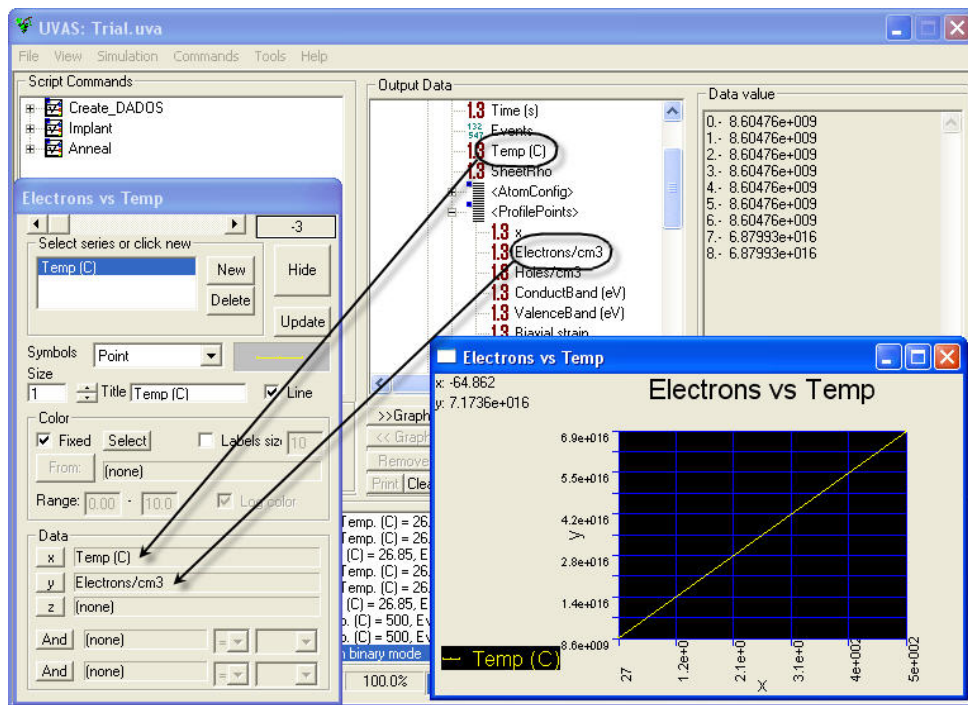


Figure D.15: Plotting the concentration of a type of particle versus temperature

4. Click “Update” to plot.

See figure D.16 as example.

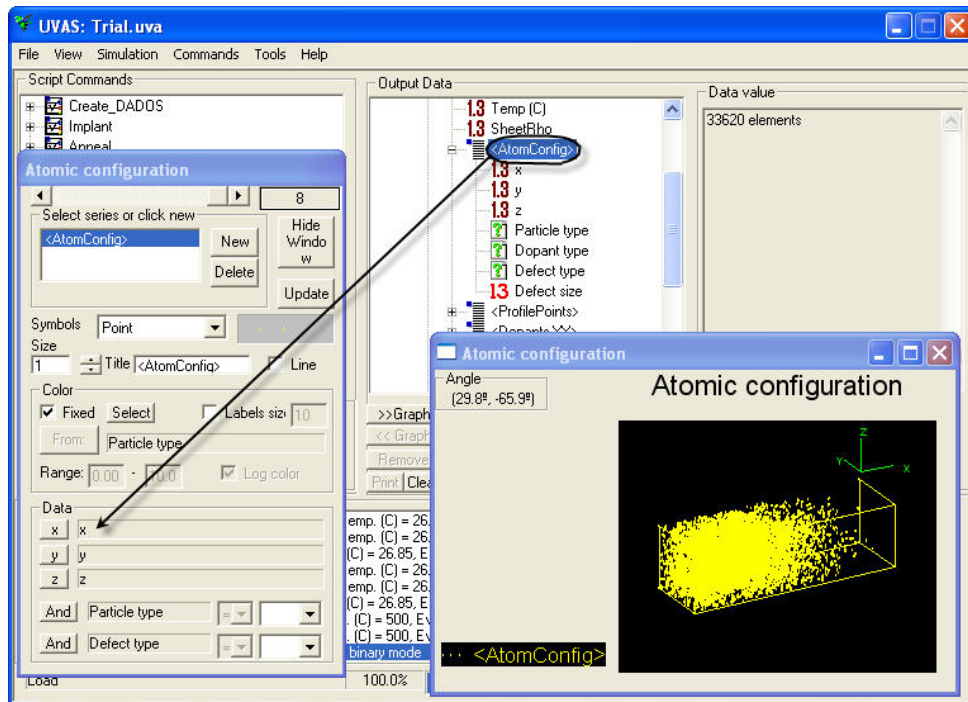


Figure D.16: Plotting the atomic configuration (I)

If we uncheck the “Fixed” option, UVAS will draw with different colors according to the type of particle (see figure D.17).

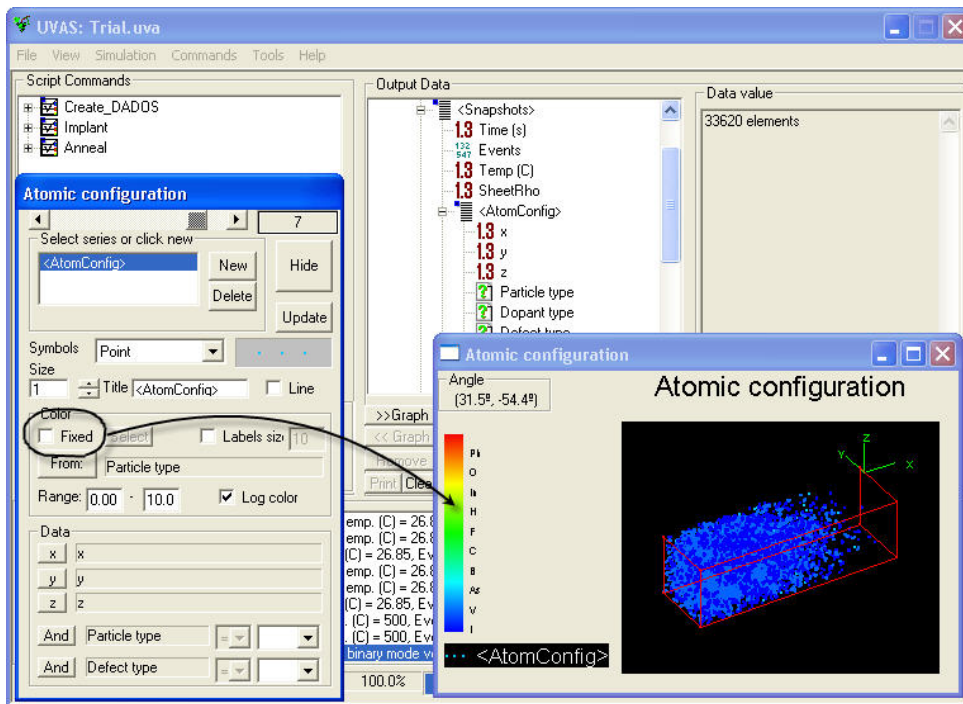


Figure D.17: Plotting the atomic configuration (II)

D.5.7 Plotting only some structures from the atomic configuration

Let's suppose we have an atomic configuration plotted on a 3D graph. Series selector provides with a tool for selecting only some particles to be drawn. First of all, the particle type must be chosen (I, V, dopants, ...), and then, if necessary, a configuration can be, as well, selected (amorphous, I311, ...). UVAS allows to select different conditions in order to provide a wide range of possibilities, such as plotting only I in 311 (==), everything but I (!=), etc. When you have everything defined, please click on "Update". In the figure D.18, we have plotted arsenic in any configuration except in amorphous.

Table D.1: Example of selecting atomic configuration

| | | |
|---------------|----|-----------|
| Particle type | == | As |
| Defect type | != | Amorphous |

D.5.8 Viewing the evolution in different times

This is valid for both 2D and 3D graphs, but not plots versus time obviously.

1. Once plotted, please move up to the last frame.

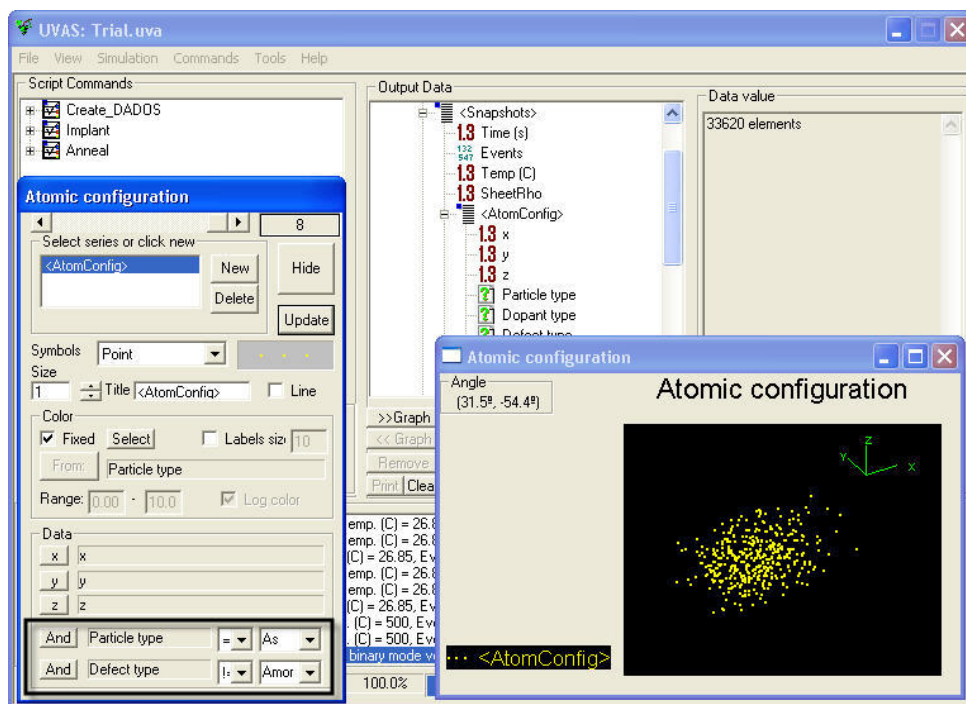


Figure D.18: Plotting only some structures from the atomic configuration

2. Select the “Time” item in the results tree and click on the indicated part of the Series Selector.
3. When moving the bar, graph will be automatically updated. Notice that now, in the box next to this bar, the time will be shown.

See figure D.19 as example.

D.5.9 Plotting amorphous pockets histograms (I): I+V or min(I,V)

Use this solution in order to plot the number of I+V or min(I,V) versus depth. A new 2D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “Last Value”. We are going to plot only the last snapshot, corresponding to the last simulated time.
2. Open “AmPock histo” (the one you prefer, <minIV> or <IplusV>) and select “All Values”, because we want to see all the information from the last snapshot.
3. While selected “Particles/cm³”, click on “y” in the Series Selector.
4. Click “Update” to plot.

See figure D.20 as example.

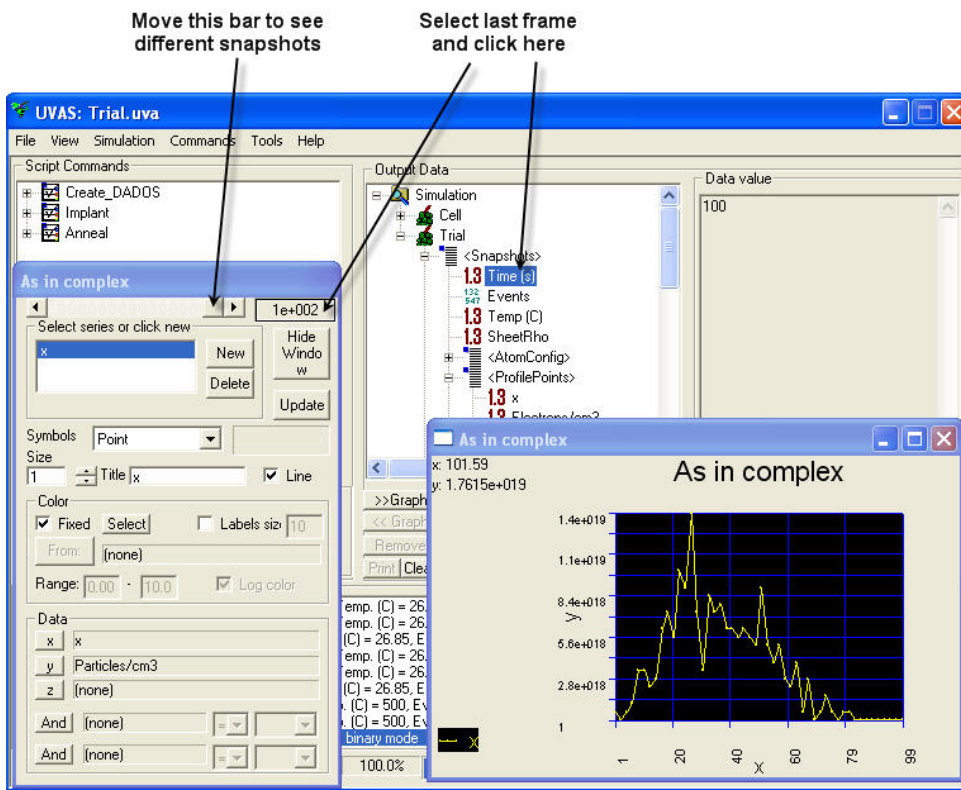


Figure D.19: Viewing the evolution in different times

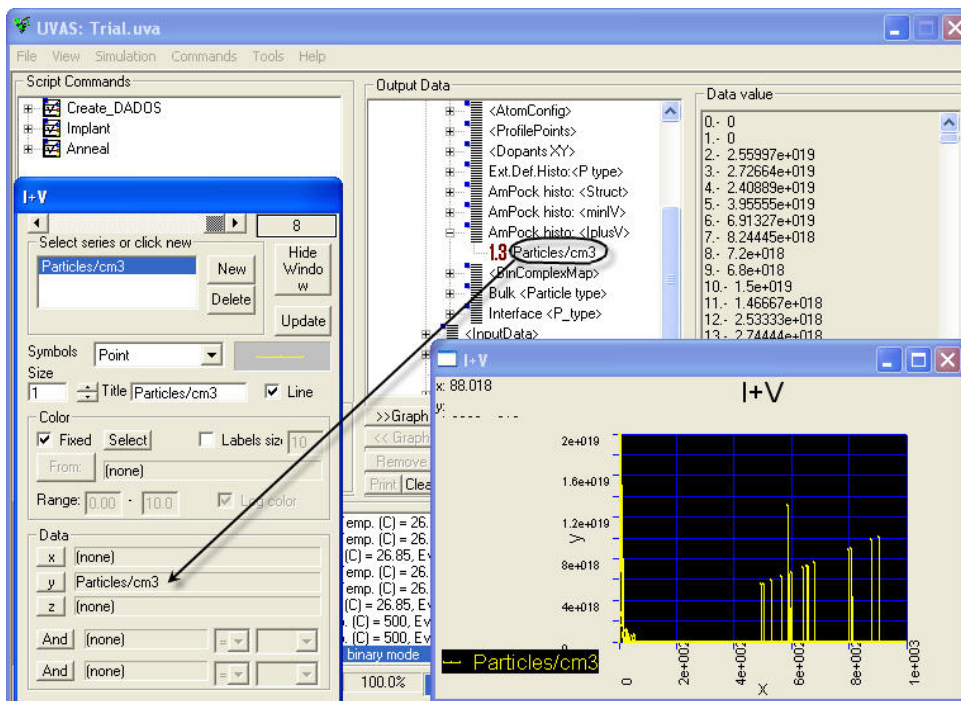


Figure D.20: Plotting amorphous pockets histograms (I): I+V

D.5.10 Plotting amorphous pockets histograms (II): I and V contained

Use this solution in order to plot the number of I and V contained in the amorphous pockets. A new 2D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “Last Value”. We are going to plot only the last snapshot, corresponding to the last simulated time.
2. Open “AmPock histo: <Struct>” and select “All Values”, because we want to see all the information from the last snapshot.
3. While selected “number of I”, click on “x” in the Series Selector.
4. Do the same for “number of V” and “y”, and for “Particles/cm3” and “z”.
5. In the Series Selector, use “Rectangle” as a symbol with a big size in order to get an homogeneous result.
6. Uncheck the “Fixed” option and click on “From” button. Automatically, “Particles/cm3” will appear in the box on the right. This means we are going to use a range of colors to plot the different amount of amorphous pockets of each size.
7. Now, we have to define the limits: the lower is usually zero, and the top level is normally set to a value a bit higher than the highest in the results vector, which can be seen in the Data viewer by clicking on “Particles/cm3”. For very large spans, it is highly recommended to check the option “Log color”.

As we can see in the picture below, the plot shows the different amount of amorphous pockets in the simulation. Abscissa axis indicates the number of interstitials, while ordinates axis is used for the number of vacancies. Actually, it is a 3D plot in which the third coordinate is plotted by means of colors.

See figure D.21 as example.

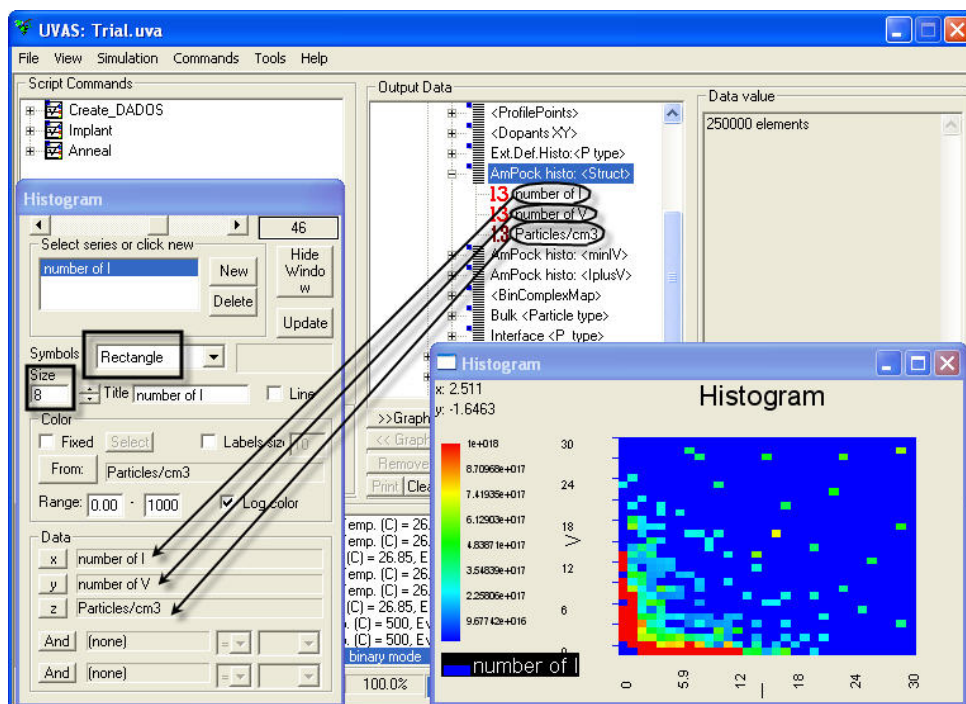


Figure D.21: Plotting amorphous pockets histograms (II): I and V contained

D.5.11 Plotting binary complex maps

Use this solution in order to plot the number of particles contained in binary complexes. A new 2D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “Last Value”. We are going to plot only the last snapshot, corresponding to the last simulated time.
2. Open <BinComplexMap> and select “All Values”, because we want to see all the information from the last snapshot.
3. While selected “n”, click on “x” in the Series Selector.
4. Do the same for “m” and “y”.
5. Open <Type> and choose one of the available options for binary complexes: I_nB_m , I_nC_m , V_nAs_m , V_nO_m , V_nF_m , V_nPm . Index “n” represents the number of native defects in the complex and index “m” represents the number of dopants in the complex.
6. While selected “# of defects” in the Data browser, uncheck the “Fixed” option and click on “From” button. Automatically, “# of defects” will appear in the box on the right. This means we are going to use a range of colors to plot the different amount of amorphous pockets of each size.
7. Now, we have to define the limits: the lower is usually zero, and the top level is normally set to a value a bit higher than the highest in the results vector, which can be seen in the Data viewer by clicking on “Particles/cm3”. For very large spans, it is highly recommended to check the option “Log color”.

As we can see in the picture D.22, the plot shows the different amount of binary complexes in the simulation. Abscissa axis indicates the number of interstitials, while ordinate axis is used for the number of dopants. UVAS limits both “n” and “m” with a maximum of 9 each one.

D.5.12 Plotting a particular binary complex versus time

Remember how to plot binary complex maps. Index “n” is used by UVAS to represent number of I or V and index “m” was employed for number of dopants. If we want to represent the number of a binary complex, such as V_nAs_m , we have to represent it just by indicating subindex “nm”. For example, for V_1As_2 , set index "12".

A new 2D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “All Values”. We are going to plot all the snapshots, as we want to see the entire simulation.
2. While “Time” item selected, click on “x” in Series selector.
3. Open <BinComplexMap>, select “Index”, and choose the index correspondent to the binary complex you want to plot.

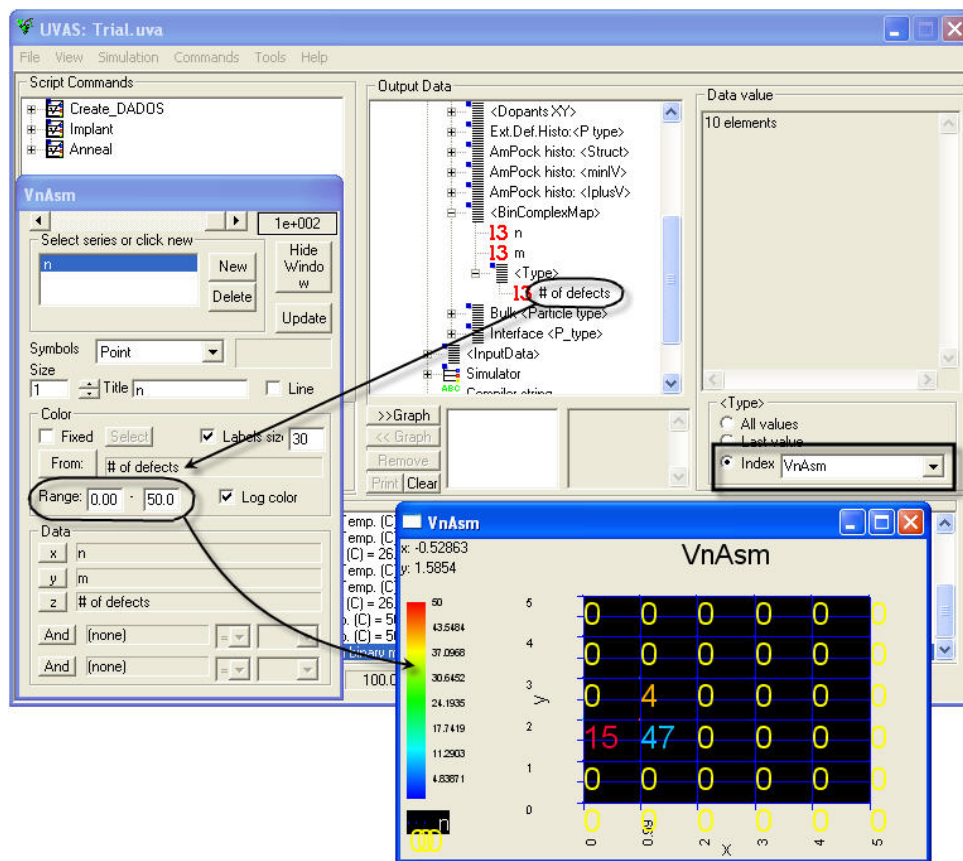


Figure D.22: Plotting binary complex maps

4. Click on “Type” and choose the generic binary complex.
5. Click on “y” while “# of defects” is selected and update the graph.

See figure D.23 as example.

D.5.13 Plotting dopants histograms

Use this solution in order to plot the concentration of dopants contained in a projection over the XY plane. A new 2D graph is required for this.

1. Select <Snapshots> item in the Data browser and then click on “Last Value”. We are going to plot only the last snapshot, corresponding to the last simulated time.
2. Open <DopantsXY> and select “All Values”, because we want to see all the information from the last snapshot.
3. While selected “x”, click on “x” in the Series Selector.
4. Do the same for “y” and “y”.

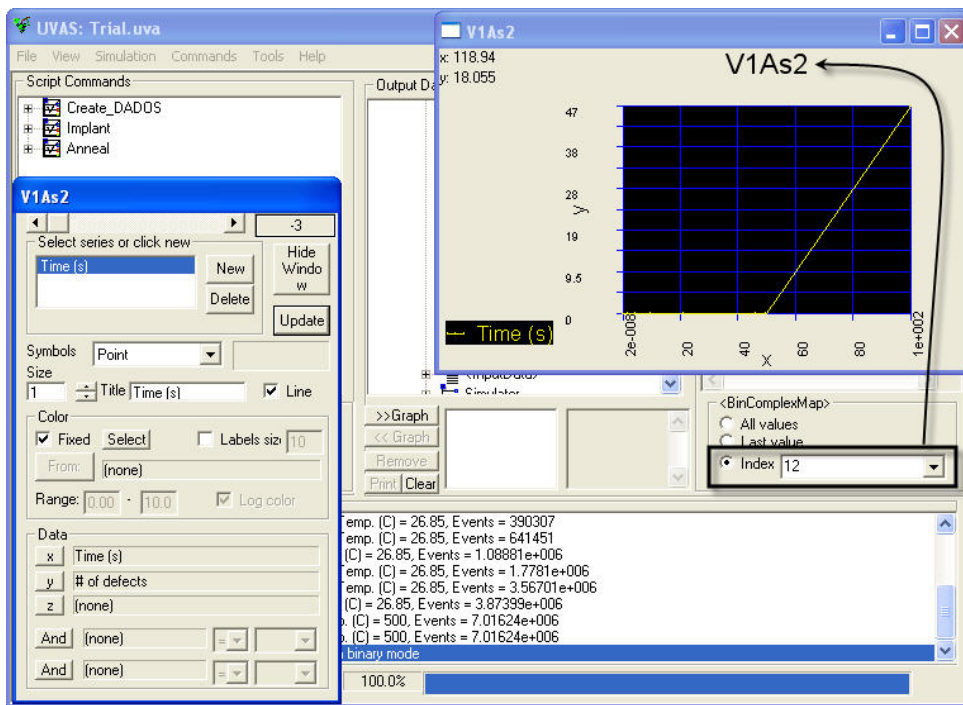


Figure D.23: Plotting a particular binary complex versus time

5. In the “Dopants” section, select the dopant from the “Index” part. Select also the “Defect type”, which can be Complex or PointD.
6. While selected “Dopants/cm3”, select “z” in the Series Selector.
7. In the Series Selector, use “Rectangle” as a symbol with a big size in order to get an homogeneous result.
8. Uncheck the “Fixed” option and click on “From” button. Automatically, “Dopants/cm3” will appear in the box on the right. This means we are going to use a range of colors to plot the different concentration of dopant in each position.
9. Now, we have to define the limits: the lower is usually zero, and the top level is normally set to a value a bit higher than the highest in the results vector, which can be seen in the Data viewer by clicking on “Dopants/cm3”. For very large spans, it is highly recommended to check the option “Log color”.

As we can see in the picture D.24, the plot shows the different concentration of dopant. Abscissas axis indicates the X, while ordinates axis is used for the Y. Actually, it is a 3D plot in which the third coordinate is plotted by means of colors.

D.5.14 Plotting more than one graph in the same draw area

Obviously, you are only allowed to plot more than one graphs in the same draw area if abscissas are the same.

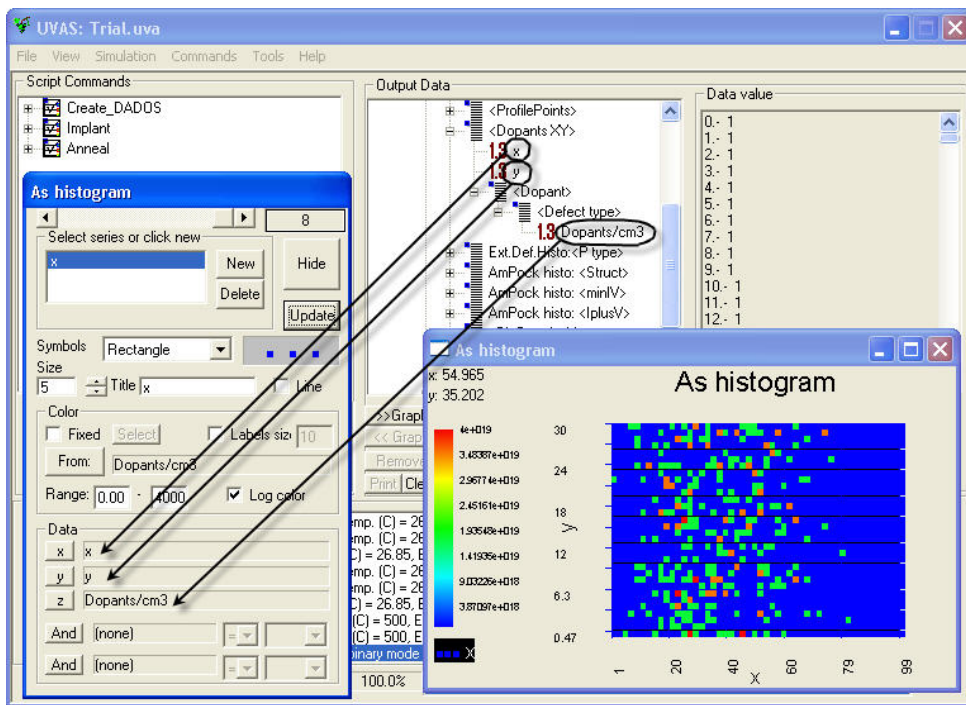


Figure D.24: Plotting dopants histograms

1. Create a new series in the Series Selector by clicking in “New”.
2. Do the same as for plotting the former.
3. Use this way to plot as many data as required.

See figure D.25 as example.

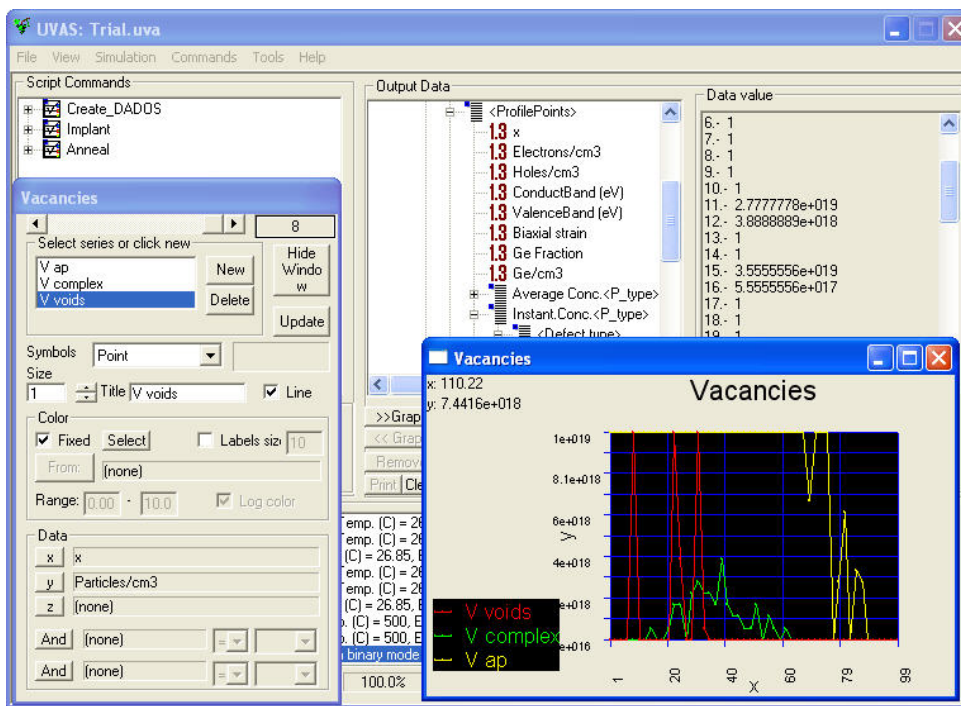


Figure D.25: Plotting more than one graph in the same draw area

UVAS Help (V): Input physical parameters

E.1 Input physical parameters

Input parameters file is the file used to store all the parameters used in simulations. When a simulation is run, UVAS asks for a DDP file, whose name is usually dados.ddp but it can be whatever.

In the following sections, an interrogation mark (?) is used to stand for a particle. For instance, Eb_? is the binding energy for particle "?", such as Eb_Ci (binding energy for interstitial-carbon).

E.2 DDP file

This is a file where UVAS reads the physical parameters for the simulation.

DDP file has key words representing parameters and its values. These words can be:

Single. One key word plus the parameter value. For instance: Em_C 5 (the migration energy for carbon is 5 eV).

Compound. One key word plus another value indicating a particle plus the parameter value. For instance: D0_ClusterProp V 10 (this prefactor for vacancies clusters is 10 cm²/s).

Also, some parameters for clusters and complexes are defined with different values depending on the size.

E.2.1 dados.ddp

(GLOBAL OPTIONS)

randomSeed 1 (int from 1 to 31327)

BitsBoxes 19 (max. number of boxes = 2^{bitsbxs})

ChargeVarPercent 0.20 (maximum relative error allowed in Fermi level updates)

InitOutputTime 1.0 s

DebugFlag 4 (0:Normal, no debug; 1:No interactions between particles; 2: IntrinsicFermi level; 3:MBstatistics; 4: extended defects periodic in YZ, but diffusion jumps always mirror)

T-ramps: intervals from T-high are $\text{pow}(\text{dTBase}, \text{nInit} + \text{n})$ up to their max. (dTLimit)

dTBase 2.0 (>1.)

nInit 1 (int)

dTLimit 20.0 degrees

(POINT DEFECTS)

(Interstitial and Vacancy thermal generation)

C0relEq_I 1e4 (adim.) Eform_I 4.0 (eV)

C0relEq_V 1300 (adim.) Eform_V 3.8 (eV)

(Single Point Defects: migration)

Dm_V 1.e-3 (cm²/s) Em_V 0.4 (eV)

Dm_I 5e-2 Em_I 0.8

Dm_O 0.13 Em_O 2.53

Dm_C 0. Em_C 5.

Dm_B 0. Em_B 5.

Dm_F 5e-3 Em_F .8

Dm_H 1e-3 Em_H 1.1 (??)

Dm_In 0. Em_In 5.

Dm_As 0. Em_As 5.

Dm_Ph 0. Em_Ph 5.

Dm_Sb 0. Em_Sb 5.

(Charged Single Point Defects V-, V--, V+, V++, I-, I+: migration)

Dm_VM 1.e-3 (cm²/s) Em_VM 0.4 (eV)

Dm_VMM 1.e-3 (cm²/s) Em_VMM 0.5 (eV)

Dm_VP 1.e-3 (cm²/s) Em_VP 0.6 (eV)

Dm_VPP 1.e-3 (cm²/s) Em_VPP 0.8 (eV)

Dm_IM 5e-2 Em_IM 0.8

Dm_IP 5e-2 Em_IP 0.8

(Ci atom)

Dm_Ci 1.e-3 (cm2/s) Em_Ci 0.87 (eV) (migration)
 Db_Ci 2.5 (cm2/s) Eb_Ci 1.7 (eV) (binding)

(Bi- atom)

Dm_BiM 1.e-3 (cm2/s) Em_BiM 0.3 (eV) (migration)
 Db_BiM 0.9 (cm2/s) Eb_BiM 0.25 (eV)

(Bi atom)

Dm_Bi 1.e-3 (cm2/s) Em_Bi 0.1 (eV) (migration)

(Bi+ atom)

Dm_BiP 1.e-3 (cm2/s) Em_BiP 1.4 (eV) (migration)

(InV- Pair)

Dm_InVM 0. (cm2/s) Em_InVM 5. (eV) (migration)
 Db_InVM 1.5e-3 (cm2/s) Eb_InVM 1.6 (eV) (binding)

(InV Pair)

Dm_InV 0. (cm2/s) Em_InV 5. (eV) (migration)

(Ini- atom)

Dm_IniM 2. (cm2/s) Em_IniM 2.2 (eV) (migration)
 Db_IniM 0 (cm2/s) Eb_IniM 1.8 (eV) (bind)

(Ini atom)

Dm_Ini 1.6e-6 (cm2/s) Em_Ini 0.9 (eV) (migration)

(AsV+ Pair)

Dm_AsVP 1.5e-4 (cm2/s) Em_AsVP 1.3 (eV) (migration)
 Db_AsVP 1e-3 (cm2/s) Eb_AsVP 1.01 (eV) (binding)

(Arsenic-Vacancy Pair)

Dm_AsV 1.5e-4 (cm2/s) Em_AsV 1.3 (eV) (migration)

(AsV- Pair)

Dm_AsVM 1.5e-4 (cm2/s) Em_AsVM 1.6 (eV) (migration)

(Asi+ atom)

Dm_AsiP 4e-2 (cm2/s) Em_AsiP 1.4 (eV) (migration)
 Db_AsiP 5e-2 (cm2/s) Eb_AsiP 0.3 (eV) (binding)

(Asi atom)

Dm_Asi 4e-2 (cm2/s) Em_Asi 1.4 (eV) (migration)

(PhV+ Pair)

Dm_PhVP 0. (cm2/s) Em_PhVP 5. (eV) (migration)
 Db_PhVP 5.e-3 (cm2/s) Eb_PhVP 0.6 (eV) (binding)

(Phosphorus-Vacancy Pair)

Dm_PhV 0. (cm²/s) Em_PhV 5. (eV) (migration)

(PhV- Pair)

Dm_PhVM 0. (cm²/s) Em_PhVM 5. (eV) (migration)

(Phi+ atom)

Dm_PhiP 2e-4 (cm²/s) Em_PhiP 1.3 (eV) (migration)

Db_PhiP 5e-2 (cm²/s) Eb_PhiP 1.5 (eV) (binding)

(Phi atom)

Dm_Phi 2e-4 (cm²/s) Em_Phi 1.3 (eV) (migration)

(Point defects. Electronic levels at T=0, in eV)

e_VMM0 1.06 (Fahey)

e_VM0 0.6 (Fahey)

e_VP0 0.03 (Watkins)

e_VPP0 0.13 (Watkins)

e_IM0 1.0 (J.Zhu)

e_IP0 0.35 (Bracht)

e_BiM0 0.8 (Ec-0.37 in agreement with Watkins)

e_BiP0 1.04 (Ec-0.13 in agreement with Watkins)

e_AsVM0 0.77 (Arsenic)

e_AsVP0 0.2 (Arsenic)

e_IniM0 0.6 ???(Indium)

e_InVM0 0.7 ???(Indium)

e_AsiP0 0.1

e_PhVM0 0.7 ? (Ec-0.45 after Watkins ?)

e_PhVP0 0 ???

e_PhiP0 1.1

(Band gap)

Eg0 1.17 (eV)

Agap 4.73e-4 (eV/K)

Bgap 636. (K)

Nc300 3.2e19 (cm⁻³)

Nv300 1.8e19 (cm⁻³)

expNc 1.5

expNv 1.5

(Band gap narrowing, Jain & Roulston's model.

Values, in eV, from Persson et al, JAP 86, 4419 (1999))

Acn1_4 0

Acn1_3 -14.84e-3

Acn1_2 0.78e-3

Acp1_4 -16.27e-3

Acp1_3 0

Acp1_2 -0.18e-3

```

Avn1_4 15.08e-3
Avn1_3 0
Avn1_2 0.74e-3
Avp1_4 0
Avp1_3 18.46e-3
Avp1_2 -2.63e-3

```

(AMORPHIZATION-RECRYSTALLIZATION)

```

V0recryst 1.7e8 (cm/s)      Erecryst 2.7 (eV) (recryst. velocity)
recrystDepositProb_As 0.3 recrystMaxActive_As 1e21 (cm-3) maxDepositedCxSize_As 4
recrystDepositProb_B 1.0 recrystMaxActive_B 3.5e20 (cm-3) maxDepositedCxSize_B 3
recrystDepositProb_Ph 0.3 recrystMaxActive_Ph 1e21 (cm-3) maxDepositedCxSize_Ph 3
recrystDepositProb_Sb 0.3 recrystMaxActive_Sb 1e21 (cm-3) maxDepositedCxSize_Sb 3

```

```

inRelDamChange 0.05 (controls the damage update frequency)
AmorphizationThreshold 1.5e22 (I+V / cm3)
MaxIVStorage 1e24 (set it to less than 1e22 for very large simulations
to use less memory)
LatticeCollapse_nm3 40

```

```

ExponentAmorphousPocket 1 (prefactor dependence on size)
D0AmorphousPocket 3e-4 (cm2/s)
Eac(minIV),NObarrier, maxmergesize=50
piecewise linear interpolation, default=recryst. energy
Eb_AmorphousPocket
1 0.68
80 1.0
235 2.7
-1

```

(CLUSTERS)

Vacancy Clusters:

```
D0_ClusterProp V 10 (cm2/s)
```

Default energies:

```

Eb_SmallestCluster V 1.5 (eV)
Eb_LargeCluster V 3.7 (eV)
exponent_Cluster V 0.6667

```

Reassigned energies from Staab et al., PRB 2002
(No voids rippening allowed by the moment)

```

Eb_Cluster V
2 1.4
3 1.4
4 2.4

```

```
5      3.0
6      3.4
7      0
8      2.4
9      3.4
10     3.4
11     0
12     2.4
13     3.0
14     3.0
15     0
16     0
17     0
-1
(-1 == end of array )
```

Interstitial Clusters

```
D0_ClusterProp I 100. (cm2/s)
```

Default energies:

```
Eb_SmallestCluster I 2.48 //2.57 (eV)
Eb_LargeCluster    I 3.06 //3.34 (eV)
exponent_Cluster   I 0.75 //0.9
```

Reassigned energies (modified Cowern set):

Eb_Cluster I

```
2  2.45
3  2.45
4  2.62
5  2.53
6  2.7
7  2.36
8  3.15
9  2.63
10 2.58
11 2.83
12 2.92
13 2.823
14 2.823
15 2.824
16 2.824
17 2.825
18 2.825
19 2.825
20 2.826
21 2.826
22 2.827
```

23 2.827
24 2.827
25 2.828
26 2.828
27 2.829
28 2.829
29 2.829
30 2.83
31 2.83
32 2.831
33 2.831
34 2.831
35 2.832
36 2.832
37 2.833
38 2.833
39 2.833
40 2.834
41 2.834
42 2.835
43 2.835
44 2.835
45 2.836
46 2.836
47 2.837
48 2.837
49 2.837
50 2.838
51 2.838
52 2.839
53 2.839
54 2.839
55 2.84
56 2.84
57 2.841
58 2.841
59 2.841
60 2.842
61 2.842
62 2.843
63 2.843
64 2.843
65 2.844
66 2.844
67 2.845
68 2.845
69 2.845
70 2.846
71 2.846

```

72 2.847
73 2.847
74 2.847
75 2.848
76 2.848
77 2.849
78 2.849
79 2.849
80 2.85
81 2.85
82 2.851
83 2.851
84 2.851
85 2.852
86 2.852
87 2.853
88 2.853
89 2.853
90 2.854
91 2.854
92 2.855
93 2.855
94 2.855
95 2.856
96 2.856
97 2.857
98 2.857
99 2.857
100 2.858
101 2.858
102 2.859
103 2.859
-1
(-1 == end of array )

```

(THREEONEONES)

MIN311SIZE 33

```

size0_Clusterto311 0.3 (prefactor for cluster to 311 transition size)
EClusterto311      0.35 (eV)(-Eact for cluster to 311 transition size)

```

(DISLOCATION LOOPS)

Transition size model:

```

size0_311toDLoop 1.6 (prefactor for 311 to DLoop transition size)
                  (set to negative to deactivate the model)
E311toDLoop      0.68 (eV)(-Eact for 311 to DLoop transition size)

```

Transition rate model:

```

R0_311ToDL      0 //4.5e11 (s-1) (set to zero to deactivate the model)
Ebar0_311ToDL  3.   (eV)
Ebar1_311ToDL  3.   (eV)
expo_311ToDL   2.   (Ebarr=Ebar0+Ebar1/(n/N0-1)**expo)

```

```
DODLoopProp 2e5
```

```

gamma 0.4375
mu    472
nu    0.3
burgVectMod 0.3135

```

(PLATELETS)

```
DOPlateletProp 2e5
```

(VOIDS)

```

MINVoidsSIZE 27
size0_ClustertoVoids 0.3 (prefactor for cluster to Voids transition size)
EClustertoVoids      0.35 (eV)(-Eact for cluster to Voids transition size)

```

(COMPLEXES)

(I_B complex)

```
DOF_ComplexProp I B 200. (cm2/s)
```

```

Etotal_Complex I B
      1 4 -3.6  2 4 -6.7  3 4 -9.5  4 4 -11.5  5 4 -11.5
      1 3 -3.4  2 3 -3.8  3 3 -6.8  4 3 -6.8
0 2 +1.7  1 2 -1.0  2 2 -3.5  3 2 -5.4
      2 1 -2.5
-1                               (-1 == end of array )

```

```
EbarrierB_Complex I B
```

```
-1
```

```
EbarrierF_Complex I B
```

```
-1
```

(I_C complex) RP

```

Etotal_Complex I C
0  2 -1.2
1  2 -2.3
2  2 -7
1  3 -1.7
2  3 -9.7

```

```

3 3 -11.5
2 4 -12.5
3 4 -13.7
4 4 -16
3 5 -13
4 5 -20.5
5 5 -25
4 6 -25.4
5 6 -26.9
6 6 -30.9
7 7 -35.6
8 8 -40.3
9 9 -45
-1

```

```

EbarrierB_Complex I C
-1

```

```

EbarrierF_Complex I C
-1

```

```

(V_As complex)
Etotal_Complex V As

```

```

0 4 0      1 4 -5.4
0 3 0      1 3 -4.4
0 2 0      1 2 -3.9

```

```
-1
```

```

EbarrierB_Complex V As
-1

```

```

EbarrierF_Complex V As
-1

```

```

(V_Ph complex)                                uncalibrated
Etotal_Complex V Ph

```

```

0 4 0      1 4 -6      2 4 -10.3
0 3 0      1 3 -6
0 2 0      1 2 -5

```

```
-1
```

```

EbarrierB_Complex V Ph
-1

```

```

EbarrierF_Complex V Ph

```

-1

(V_F complex)

Ettotal_Complex V F

| | | |
|---|---|--------|
| 1 | 1 | -2.38 |
| 1 | 2 | -4.63 |
| 1 | 3 | -7.08 |
| 1 | 4 | -7.12 |
| 1 | 5 | -8.5 |
| 1 | 6 | -9.7 |
| 1 | 7 | 3 |
| 0 | 2 | -0.5 |
| 0 | 3 | -1 |
| 0 | 4 | -1.5 |
| 0 | 5 | -3 |
| 0 | 6 | -4.5 |
| 2 | 1 | -4.20 |
| 2 | 2 | -7.07 |
| 2 | 3 | -9.04 |
| 2 | 4 | -11.47 |
| 2 | 5 | -13.29 |
| 2 | 6 | -16.09 |

-1

EbarrierB_Complex V F

-1

EbarrierF_Complex V F

-1

Other MATERIALS:

INTERFACES and IMPURITY PARAMETERS

TRAPPING -----

Oh-Ward model:

Set Csol0_ to its negative value to simulate impurity IN-DIFFUSION
into the Silicon side.

Set Surf_h0 to zero to simulate impurity MIRROR interface.

Set Surf_e_a0 to zero to simulate impurity SINK interface.

(Arsenic)

| | | | | |
|----------------|---------|--------------|-------|---|
| Csol0_As | 2.2e22 | Esol_As | 0.47 | (electrical[substitutional] solubility) |
| Surf_h0_As | 2.31e-2 | Surf_Eh_As | 0.766 | |
| Surf_e_a0_As | 0.4 | Surf_Ee_a_As | 0 | |
| SurfMaxTrap_As | 3.0e14 | | | |

(Boron)

| | | | | |
|---------|-------|--------|----|--|
| Csol0_B | 1.e24 | Esol_B | 1. | |
|---------|-------|--------|----|--|

| | | | |
|---------------|---------|-------------|--------|
| Surf_h0_B | 1.66e-2 | Surf_Eh_B | 0.486 |
| Surf_e_a0_B | 0.178 | Surf_Ee_a_B | -0.086 |
| SurfMaxTrap_B | 2.0e14 | | |

(Phosphorus)

| | | | |
|----------------|--------|--------------|-------|
| Csol0_Ph | 1.e20 | Esol_Ph | 0. |
| Surf_h0_Ph | 0.715 | Surf_Eh_Ph | 1.75 |
| Surf_e_a0_Ph | 4e-3 | Surf_Ee_a_Ph | -0.37 |
| SurfMaxTrap_Ph | 6.8e14 | | |

(Carbon)

| | | | |
|---------------|------|-------------|-------|
| Csol0_C | 0 | Esol_C | 0. |
| Surf_h0_C | 100 | Surf_Eh_C | 0 |
| Surf_e_a0_C | 4e-3 | Surf_Ee_a_C | -0.37 |
| SurfMaxTrap_C | 1e18 | | |

(Fluorine)

| | | | |
|---------------|------|-------------|-------|
| Csol0_F | 0 | Esol_F | 0. |
| Surf_h0_F | 100 | Surf_Eh_F | 0 |
| Surf_e_a0_F | 4e-3 | Surf_Ee_a_F | -0.37 |
| SurfMaxTrap_F | 1e18 | | |

Possible material names: Oxide, Nitride, AmorphousSi.
 Append the material name to the PointD parameter name.
 (do not add material name for Silicon)

Set RecLnm_X to -1 for no X(I or V) surf emiss/recombination.
 Set Segreg_pref_ to zero to prevent jumps to the other side.
 Set Segreg_pref_ to its negative value to simulate impurity IN-DIFFUSION
 into the other material.

(OXIDE)

(Si/Oxide Interface gen/recomb)

```

RecLnm_VOxide 0
RecLnm_IOxide 0
SuperSat_VOxide 1
SuperSat_IOxide 1

```

(Arsenic)

| | | | |
|---------------------|---------|-------------------|------|
| Segreg_pref_AsOxide | 0.1 | Segreg_eV_AsOxide | 0.0 |
| Dm_AsOxide | 2.94e-4 | Em_AsOxide | 3.15 |

(Boron)

| | | | |
|--------------------|---------|------------------|------|
| Segreg_pref_BOxide | 3.3 | Segreg_eV_BOxide | 0.0 |
| Dm_BOxide | 3.12e-3 | Em_BOxide | 3.93 |

(Phosphorus)

| | | | |
|---------------------|------|-------------------|-----|
| Segreg_pref_PhOxide | 30.0 | Segreg_eV_PhOxide | 0.0 |
|---------------------|------|-------------------|-----|

| | | | |
|------------|------|------------|------|
| Dm_PhOxide | 14.2 | Em_PhOxide | 4.86 |
|------------|------|------------|------|

(Si/Nitride IV gen/recomb)

```

RecLnm_VNitride 0
RecLnm_INitride 0
SuperSat_VNitride 1
SuperSat_INitride 1

```

(Arsenic)

| | | | |
|-----------------------|---------|---------------------|------|
| Segreg_pref_AsNitride | 30.0 | Segreg_eV_AsNitride | 0.0 |
| Dm_AsNitride | 2.94e-4 | Em_AsNitride | 3.15 |

(Boron)

| | | | |
|----------------------|---------|--------------------|------|
| Segreg_pref_BNitride | 30.0 | Segreg_eV_BNitride | 0.0 |
| Dm_BNitride | 3.12e-3 | Em_BNitride | 3.93 |

(Phosphorus)

| | | | |
|-----------------------|------|---------------------|------|
| Segreg_pref_PhNitride | 30.0 | Segreg_eV_PhNitride | 0.0 |
| Dm_PhNitride | 14.2 | Em_PhNitride | 4.86 |

(AMORPHOUS Si)

(Si/AmorphousSi IV gen/recomb)

```

RecLnm_VAmorphousSi 0
RecLnm_IAmorphousSi 0
SuperSat_VAmorphousSi 1
SuperSat_IAmorphousSi 1

```

(Arsenic)

| | | | |
|---------------------------|-----|-------------------------|-----|
| Segreg_pref_AsAmorphousSi | 1.0 | Segreg_eV_AsAmorphousSi | 0.0 |
| Dm_AsAmorphousSi | 0.0 | Em_AsAmorphousSi | 5 |

(Boron)

| | | | |
|--------------------------|-----|------------------------|-----|
| Segreg_pref_BAmorphousSi | 1.0 | Segreg_eV_BAmorphousSi | 0.0 |
| Dm_BAmorphousSi | 0.0 | Em_BAmorphousSi | 5 |

(Phosphorus)

| | | | |
|---------------------------|-----|-------------------------|-----|
| Segreg_pref_PhAmorphousSi | 1.0 | Segreg_eV_PhAmorphousSi | 0.0 |
| Dm_PhAmorphousSi | 0.0 | Em_PhAmorphousSi | 5 |

(POINTD INTERACTIONS)

PointD Interactions are set to false by default. To enable one interaction use the keyword "EnableInteraction" and then write the two species to interact, the result of the interaction (AmPock, PointD or ImpCluster) and the type of ImpCluster (I or V) or the resulting point defect. (none for AmPock)

-I-

```

EnableInteraction I I AmPock none

```

| | | | | |
|-------------------|----|------|------------|------|
| EnableInteraction | I | V | AmPock | none |
| EnableInteraction | I | As | PointD | Asi |
| EnableInteraction | I | B | PointD | Bi |
| EnableInteraction | I | C | PointD | Ci |
| EnableInteraction | I | In | PointD | Ini |
| EnableInteraction | I | Ph | PointD | Phi |
| EnableInteraction | I | AsV | PointD | As |
| EnableInteraction | I | AsVM | PointD | As |
| EnableInteraction | I | AsVP | PointD | As |
| EnableInteraction | I | Bi | ImpCluster | I |
| EnableInteraction | I | Ci | ImpCluster | I |
| EnableInteraction | I | IM | AmPock | none |
| EnableInteraction | I | IP | AmPock | none |
| EnableInteraction | I | PhV | PointD | Ph |
| EnableInteraction | I | PhVM | PointD | Ph |
| EnableInteraction | I | PhVP | PointD | Ph |
| EnableInteraction | I | VM | AmPock | none |
| EnableInteraction | I | VMM | AmPock | none |
| EnableInteraction | I | VP | AmPock | none |
| EnableInteraction | I | VPP | AmPock | none |
| -V- | | | | |
| EnableInteraction | V | V | AmPock | none |
| EnableInteraction | V | As | PointD | AsV |
| EnableInteraction | V | F | ImpCluster | V |
| EnableInteraction | V | O | ImpCluster | V |
| EnableInteraction | V | Ph | PointD | PhV |
| EnableInteraction | V | Asi | PointD | As |
| EnableInteraction | V | AsiP | PointD | As |
| EnableInteraction | V | AsV | ImpCluster | V |
| EnableInteraction | V | Bi | PointD | B |
| EnableInteraction | V | BiM | PointD | B |
| EnableInteraction | V | BiP | PointD | B |
| EnableInteraction | V | Ci | PointD | C |
| EnableInteraction | V | IM | AmPock | none |
| EnableInteraction | V | IP | AmPock | none |
| EnableInteraction | V | Ini | PointD | In |
| EnableInteraction | V | IniM | PointD | In |
| EnableInteraction | V | Phi | PointD | Ph |
| EnableInteraction | V | PhiP | PointD | Ph |
| EnableInteraction | V | PhV | ImpCluster | V |
| EnableInteraction | V | VM | AmPock | none |
| EnableInteraction | V | VMM | AmPock | none |
| EnableInteraction | V | VP | AmPock | none |
| EnableInteraction | V | VPP | AmPock | none |
| -As- | | | | |
| EnableInteraction | As | AsVM | ImpCluster | V |
| EnableInteraction | As | IM | PointD | Asi |
| EnableInteraction | As | VM | PointD | AsV |
| EnableInteraction | As | VMM | PointD | AsV |

```

-B-
EnableInteraction B Bi ImpCluster I
EnableInteraction B IP PointD Bi
-C-
EnableInteraction C Ci ImpCluster I
-F-
EnableInteraction F F ImpCluster V
-H-
EnableInteraction H H Platelet none
-In-
EnableInteraction In IP PointD Ini
-O-
EnableInteraction O O ImpCluster V
-Ph-
EnableInteraction Ph IM PointD Phi
EnableInteraction Ph PhVM ImpCluster V
EnableInteraction Ph VM PointD PhV
EnableInteraction Ph VMM PointD PhV
-Asi-
EnableInteraction Asi AsV ImpCluster V
EnableInteraction Asi VM PointD As
EnableInteraction Asi VMM PointD As
EnableInteraction Asi VP PointD As
EnableInteraction Asi VPP PointD As
-AsiP-
EnableInteraction AsiP VM PointD As
EnableInteraction AsiP VMM PointD As
-AsV-
EnableInteraction AsV AsV ImpCluster V
EnableInteraction AsV IM PointD As
EnableInteraction AsV IP PointD As
-AsVM-
EnableInteraction AsVM IP PointD As
-AsVP-
EnableInteraction AsVP IM PointD As
-Bi-
EnableInteraction Bi Bi ImpCluster I
EnableInteraction Bi VM PointD B
EnableInteraction Bi VMM PointD B
EnableInteraction Bi VP PointD B
EnableInteraction Bi VPP PointD B
-BiM-
EnableInteraction BiM VP PointD B
EnableInteraction BiM VPP PointD B
-BiP-
EnableInteraction BiP VM PointD B
EnableInteraction BiP VMM PointD B
-Ci-
EnableInteraction Ci Ci ImpCluster I

```

```

-IM-
EnableInteraction IM IP AmPock none
EnableInteraction IM PhV PointD Ph
EnableInteraction IM PhVP PointD Ph
EnableInteraction IM VP AmPock none
EnableInteraction IM VPP AmPock none
-IP-
EnableInteraction IP PhV PointD Ph
EnableInteraction IP PhVM PointD Ph
EnableInteraction IP VM AmPock none
EnableInteraction IP VMM AmPock none
-Ini-
EnableInteraction Ini VM PointD In
EnableInteraction Ini VMM PointD In
EnableInteraction Ini VP PointD In
EnableInteraction Ini VPP PointD In
-IniM-
EnableInteraction IniM VP PointD In
EnableInteraction IniM VPP PointD In
-Phi-
EnableInteraction Phi PhV ImpCluster V
EnableInteraction Phi VM PointD Ph
EnableInteraction Phi VMM PointD Ph
EnableInteraction Phi VP PointD Ph
EnableInteraction Phi VPP PointD Ph
-PhiP-
EnableInteraction PhiP VM PointD Ph
EnableInteraction PhiP VMM PointD Ph
-PhV-
EnableInteraction PhV PhV ImpCluster V
-PhVM-
-PhVP-
-VM-
EnableInteraction VM VP AmPock none
EnableInteraction VM VPP AmPock none
-VMM-
EnableInteraction VMM VP AmPock none
EnableInteraction VMM VPP AmPock none

```

E.3 Global options

E.3.1 randomSeed

It is an integer from 1 to 31327 that DADOS uses as a seed to generate random numbers for simulations, according to Monte Carlo techniques. It can be changed in order to force to modify

random values during simulations but the results will be essentially the same if the simulation box is large enough and, thus, the simulation results are statistically relevant.

E.3.2 BitsBoxes

Number of bits used by DADOS to split the simulation box. The default value for this parameter is 19, which means that the maximum number of boxes will be 524288. See box split for more information.

E.3.3 ChargeVarPercent

Parameter is used by DADOS to establish charge update frequency. It is maximum relative error allowed in Fermi level updates. It can be a value between 0 and 1. See charge update for details.

E.3.4 InitOutputTime

It is the time when the first snapshot is taken. It has the same function as Start Output Time in the Set _ Output _ Options command, although the value here is just to initialize the simulation.

E.3.5 DebugFlag

This parameter is only used for academic purposes. Different options can be set:

0 - Normal, no debug.

1 - No interactions between particles: DADOS will not simulate pairing, recombinations, captures, clustering, ... only surface effects will take place.

2 - Intrinsic Fermi level: Silicon will be simulated as an intrinsic material, independently of the dopants. It can be used either for testing or for speeding up simulations where there are no dopants.

3 - Maxwell-Boltzmann statistics instead of Fermi-Dirac: DADOS uses, by default, Fermi-Dirac statistics instead of Maxwell-Boltzmann approximation, because it is more accurate. This parameter should only be set for academic purposes, in order to compare simulation results with analytic solutions using Maxwell Boltzmann approximation. No relevant speeding of the simulation is expected.

4 - Extended defects periodic in YZ plane. By default, the growth of extended defects is constrained by the simulation box walls. This will result in a simulation artifact where no very large lateral (YZ) dimensions are used in cases with planar symmetry. The present option would avoid such an artifact. Notice that this option does not set periodicity for mobile point defects

but only for extended defects (I311, dislocation loops, voids, platelets, . . .). Do not use this option for cases with no planar symmetry.

E.3.6 T-ramps: `dTBase`, `nInit`, `dTLimit`

DADOS implements temperature change by means of a discrete process, i.e., following a set of steps. However, at low temperatures, the number of events (basically jumps), is lower than at high ones. That is why DADOS has implemented a new method: The steps width (in time) depends on the temperature. The figure E.1 shows this.

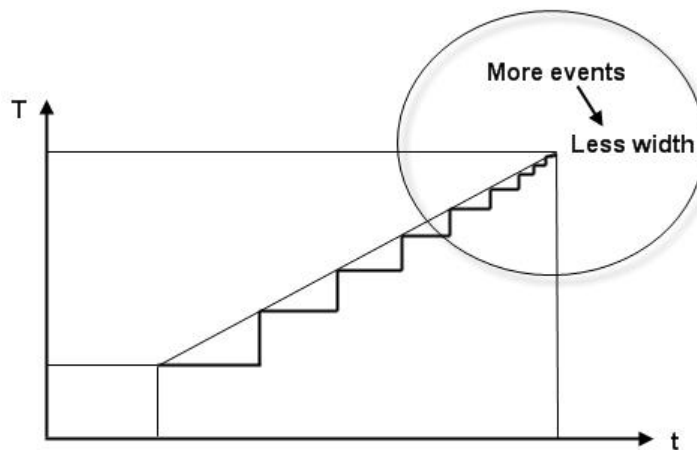


Figure E.1: T-ramps implementation

The algorithm is:

1. We start at the highest temperature, `dTBase`.
2. The time width for following steps is defined by $\Delta t = 2^{n_{\text{Init}}+n}$, where $n = 0, 1, 2, \dots$
3. If the time width is higher than `dTLimit`, we use `dTLimit` as new value.

This way, we approximately guarantee that the number of events occurred in every step is the same.

E.4 Thermal generation

E.4.1 `Eform_?`

Definition

Formation energy in silicon: Energy needed to create a native defect from crystalline silicon.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, $E_{\text{form_I}}$ is the formation energy for interstitials.

Involved particles

Single neutral “native defects”.

Units

Electron-volts (eV).

Related physical magnitudes

- Concentrations. $E_{\text{form_?}}$ is the activation energy of the equilibrium concentration of single neutral native defects from silicon surface and interface.

Related DADOS mechanisms

- Surface emission: $E_{\text{form_?}}$ affects the emission frequency of single neutral native defects from silicon surface and interface.

Comments

1. This formation energy affects also, as a consequence, to the formation energy of charged species and to the formation energy of impurity-“native defect” pairs.
2. Generation of single neutral native defects in the volume is not implemented in DADOS, as its frequency is extremely low.

E.4.2 $C_{0\text{relEq_?}}$

Definition

Prefactor of relative single neutral native defects concentration under equilibrium conditions.

$$C_{0\text{relEq_?}} = \frac{C_{?,0}^*}{C_{Si}} \quad (\text{E.1})$$

Where:

- $C_{?,0}^*$ is the prefactor of neutral interstitials or vacancies concentration in equilibrium conditions.
- See symbols list.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, `C0relEq_I` is used for interstitials.

Involved particles

Single neutral “native defects”.

Units

Dimensionless.

Related physical magnitudes

- Concentrations: `C0relEq_I` is the prefactor of single neutral native defects emission under equilibrium conditions.

Related DADOS mechanisms

- Frank-Turnbull.
- Surface emission.

Comments

1. For these particles, it is usual the use of the product of diffusivity and concentration in equilibrium to indicate the flux: `C0relEq_? · Dm_?`. When one of this parameters is modified, the other should be properly changed in order to maintain the results, at least at annealing temperatures.
2. This prefactor affects also, as a consequence, to the prefactor emission of charged species and to the prefactor emission of impurity-“native defect” pairs.
3. Generation of single neutral native defects in the volume is not implemented in DADOS, as its frequency is extremely low.

E.5 Point defects migration

E.5.1 $Dm_?$

Definition

Prefactor of diffusivity.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, Dm_Ci is the prefactor of migration for interstitial carbon.

Involved particles

Any particle.

Units

Square centimeters per second (cm^2/s).

Related physical magnitudes

- Diffusivities: $Dm_?$ is the prefactor of diffusivity of any particle.

Related DADOS mechanisms

- Particles jumps: $Dm_?$ is proportional to the prefactor of jump frequency of the particle.

Comments

1. For some immobile species, such as B, As, C, ... the diffusivity prefactor is usually set to zero. This is due to the fact that they only diffuse by means of I and V, and do not diffuse only by themselves. See effective diffusivity.
2. For these particles, neutral interstitials and vacancies, it is usual the use of the product of diffusivity and concentration in equilibrium to indicate the flux: $C0relEq_? \cdot Dm_?$. When one of this parameters is modified, the other should be properly changed in order to maintain the results, at least at annealing temperatures.

E.5.2 $E_{m_?}$

Definition

Migration energy.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, E_{b_Ci} is the migration energy for interstitial carbon.

Involved particles

Any particle.

Units

Electron-volts (eV).

Related physical magnitudes

- Diffusivities: $E_{m_?}$ is the activation energy of diffusivity of any particle. If the particle is an impurity-“native defect” pair, it affects to the effective diffusivity of the dopant. However, if the particle is a native defect (either neutral or charged), it affects the self-diffusivity.

Related DADOS mechanisms

- Particles jumps: $E_{m_?}$ affects the Jump frequency of the particle.

E.6 Point defects binding

E.6.1 $Db_?$

Definition

Prefactor of break-up frequency, expressed in diffusivity units.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, Db_Ci is the prefactor of binding for interstitial carbon.

Involved particles

Impurity-“native defect” pairs.

Units

Square centimeters per second (cm^2/s).

Related physical magnitudes

- Effective diffusivity of impurities.
- Long-hop distance of immobile impurities.
- Concentration of trapped native defects.

Related DADOS mechanisms

- Break-up.
- Emission from binary complexes.
- Particle jumps.

Comments

1. This parameter is only used for pairs.
2. When the impurity-“native defect” pair has several possible charge states, DADOS only reads the D_b value of one of them, as the break-up prefactors of the different charge states are related. See break-up of charged pairs. DADOS reads the D_b value of the species with the same charge state as the impurity, e.g., BiM has the charge state “-1”, the same as B.

E.6.2 Eb_?

Definition

Binding energy.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, Eb_Ci is the binding energy for interstitial carbon.

Involved particles

Impurity-“native defect” pairs.

Units

Electron-volts (eV).

Related physical magnitudes

- Effective diffusivity of impurities.
- Long-hop distance of immobile impurities.
- Concentration of trapped native defects.

Related DADOS mechanisms

- Break-up.
- Emission from binary complexes.

Comments

1. This parameter is only used for pairs.

E.7 Electronic levels

E.7.1 $e_{?0}$

Definition

Charge level at 0 K, measured from the valence band edge.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, e_{AsVP0} is the charge level for positive arsenic-vacancy.

- If the particle indicated by interrogation mark (?) is positive, with charge “q”, $e_{?0}$ denotes the charge level (at 0 K) for the transition between charge states “q-1” and “q”, for instance, e_{AsVP0} is the charge level for the transition between AsV and AsV^+ .

- If the particle indicated by interrogation mark (?) is negative, with charge “q”, $e_{?0}$ denotes the charge level (at 0 K) for the transition between charge states “q” and “q+1”, for instance, e_{VMM0} is the charge level for the transition between V^{--} and V^- .

Involved particles

Charged particles with other possible charge state.

Units

Electron-volts (eV).

Related physical magnitudes

- Concentrations.

Related DADOS mechanisms

- Formation energies for charged species.
- Probabilities and charge states.

Comments

1. According to this notation, if the particle is neutral, this parameter is not defined and it would be ignored if found in the DDP file.
2. When the Fermi level, e_F , is at $e(q-1,q)$, the probability of “q-1” and “q” states is the same.
3. $e_{?0}$ sets the relation among the binding energies of different charge states of an impurity-“native defect” pair.

E.8 Band gap

E.8.1 E_{g0}

Definition

Silicon band gap width at 0 K.

Units

Electron-volts (eV).

Related physical magnitudes

- Fermi level.
- Intrinsic density and intrinsic levels.

Related DADOS mechanisms

- Temperature dependance of band structure.

E.8.2 Agap**Definition**

Constant used for band gap width calculation (see temperature dependance of band structure).

Units

Electron-volts per kelvin (eV/K).

Related DADOS mechanisms

- Temperature dependance of band structure.

E.8.3 Bgap**Definition**

Constant used for band gap width calculation (see temperature dependance of band structure).

Units

Kelvin (K).

Related DADOS mechanisms

- Temperature dependance of band structure.

E.8.4 Nc300**Definition**

Effective density of states of the conduction band at 300 K.

Units

States per cubic centimeter (cm^{-3}).

Related physical magnitudes

- Fermi level.
- Intrinsic density and intrinsic levels.

Related DADOS mechanisms

- Temperature dependance of band structure.

E.8.5 Nv300**Definition**

Effective density of states of the valence band at 300 K.

Units

States per cubic centimeter (cm^{-3}).

Related physical magnitudes

- Fermi level.
- Intrinsic density and intrinsic levels.

Related DADOS mechanisms

- Temperature dependance of band structure.

E.8.6 $\exp N_c$ **Definition**

Exponent used to calculate the states density in the conduction band.

Units

Dimensionless.

Related physical magnitudes

- Fermi level.
- Intrinsic density and intrinsic levels.

Related DADOS mechanisms

- Temperature dependance of band structure.

E.8.7 $\exp N_v$ **Definition**

Exponent used to calculate the states density in the conduction band.

Units

Dimensionless.

Related physical magnitudes

- Fermi level.
- Intrinsic density and intrinsic levels.

Related DADOS mechanisms

- Temperature dependance of band structure.

E.8.8 A??1_?

Definition

Parameters used to calculate carrier-related band gap narrowing (see band gap narrowing).

Interrogation marks (?) are used to indicate the use of this set of parameters in different expressions. For instance: **Acp1_3** is used for the conduction band (c) in a p-semiconductor (p); last value (3) is used as a denominator in exponents in the band gap calculation.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Band gap narrowing.

E.9 Amorphization and recrystallization

E.9.1 V_0 recryst

Definition

Prefactor of recrystallization velocity.

Units

Centimeters per second (cm/s).

Related DADOS mechanisms

- Recrystallization.

E.9.2 E_{recryst}

Definition

Activation energy for the recrystallization.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Recrystallization.

E.9.3 $\text{recrysDepositProb}_?$

Definition

Probability that an impurity stays as a substitutional structure in an amorphous box which is going to recrystallize instead of being transferred into another amorphous box following the

direction indicated by the recrystallization front.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, `recrysDepositProb_As` is the probability for arsenic.

Involved particles

Single impurities.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Recrystallization.

E.9.4 `recrysMaxActive_?`

Definition

Maximum concentration of active impurities that can be deposited as complexes in an amorphous box which has recrystallized.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, `recrysMaxActive_As` is the maximum concentration of arsenic.

Involved particles

- Impurities in amorphous regions.
- Single impurities.

Units

Particles per cubic centimeters (cm^{-3}).

Related DADOS mechanisms

- Recrystallization.

E.9.5 maxDepositedCxSize_?

Definition

Maximum number of atoms that can be included in a complex created from impurities deposit in an amorphous box which has recrystallized.

Interrogation mark (?) is used to indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, `maxDepositedCxSize_As` is the maximum number of arsenic atoms in a complex in the recrystallization process.

Involved particles

Single impurities.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Recrystallization.

E.9.6 inRelDamChange

Definition

When the damage profile has been modified in a percentage indicated by this parameter, an update will take place.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Recrystallization.

E.9.7 AmorphizationThreshold**Definition**

Minimum level of interstitials plus vacancies concentration to consider a region to be amorphous. These particles can be point defects or belong to an amorphous pocket.

Units

Particles per cubic centimeter (cm^{-3}).

Related DADOS mechanisms

- Amorphization.

E.9.8 MaxIVStorage**Definition**

Maximum level of interstitial plus vacancy concentration to store each particle's coordinates in memory. From this level, DADOS will only count the number of particles.

Units

Particles per cubic centimeter (cm^{-3}).

Related DADOS mechanisms

- Amorphization.

Comments

1. Obviously, if resources saving is wanted, `MaxIVStorage` must be lower than `AmorphizationThreshold`, due to the fact that over this concentration, silicon is transformed into amorphous silicon and no particles are stored for this material.
2. If the concentration is too low, DADOS will convert it into the minimum value, which is the equivalent to one particle per box size.

E.9.9 LatticeCollapse_nm3

Definition

If a silicon region is surrounded by amorphous silicon and its volume is equal or lower than the one indicated by this parameter, it will amorphize. This avoids to have small non-amorphous regions which are a source of recrystallization.

Units

Cubic nanometers (nm³).

Related DADOS mechanisms

- Amorphization.

E.9.10 ExponentAmorphousPocket

Definition

Exponent used for the activation energy calculation.

Units

Dimensionless

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets implementation.

E.9.11 D0AmorphousPocket

Definition

Proportional to the prefactor of dynamic annealing for amorphous pockets.

Units

Square centimeters per second (cm^2/s).

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets implementation.

E.9.12 Eb_AmorphousPocket

Definition

Activation energy for dynamic annealing in amorphous pockets.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets implementation.

E.9.13 Clusters

Both interstitial and vacancy clusters are similarly implemented in DADOS.

Definition

Proportional value to the prefactor of emission for extended defects.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, `DO_ClusterProp I` is the value for interstitials clusters.

Involved particles

Single neutral “native defects”.

Units

Square centimeters per second (cm^2/s).

Related DADOS mechanisms

- Clusters implementation.

E.9.14 `Eb_SmallestCluster ?`

Definition

Limit in binding energy for lowest cluster size (2) when using generic function.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, `Eb_SmallestCluster I` is the lowest limit in binding energy for interstitial clusters.

Involved particles

Single neutral “native defects”.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Clusters implementation.

E.9.15 Eb_LargeCluster ?

Definition

Limit in binding energy for highest cluster size when using generic function.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Eb_LargeCluster I is the highest limit in binding energy for interstitials clusters.

Involved particles

Single neutral “native defects”.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Cluster implementation.

E.9.16 exponent_Cluster ?

Definition

Exponent used for the binding energy calculation when using generic function.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, exponent_Cluster I is the value for interstitial clusters.

Involved particles

Single neutral “native defects”.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Cluster implementation.

Comments

1. This parameter must be lower than 1 and higher or equal to 0, in order to get a convergent function.

E.9.17 Eb_Cluster ?

Definition

Binding energy for clusters when using specific values.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Eb_Cluster I is the binding energy for interstitial clusters.

Involved particles

Single neutral “native defects”.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Cluster implementation.

E.10 I311

E.10.1 MIN311SIZE

Definition

Minimum size for an interstitial cluster to be converted into a I311 (see amorphous pockets to I311 transformation).

Units

Dimensionless (number of particles).

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets to I311 transformation.
- I311 implementation.

Comments

1. This parameter is relevant only at annealing temperatures.

E.10.2 size0_Clusterto311

Definition

Prefactor of threshold in the simulation of I311.

Units

Dimensionless (number of particles).

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets to I311 transformation.
- I311 implementation.

Comments

1. This parameter is relevant only at low temperatures.

E.10.3 EClusterto311**Definition**

Threshold energy in the simulation of I311.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets to I311 transformation.
- I311 implementation.

Comments

1. This parameter is relevant only at low temperatures.

E.11 Dislocation loops**E.11.1 size0_311toDLoop****Definition**

Prefactor of threshold for the transition size model in the simulation of dislocation loops.

Units

Dimensionless (number of particles).

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.
- I311 to dislocation loop transformation.

Comments

1. Set this parameter to negative to deactivate transition size model.

E.11.2 E311toDLoop

Definition

Threshold energy for the transition size model in the simulation of dislocation loops.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.
- I311 to dislocation loop transformation.

E.11.3 R0_311toDL

Definition

Prefactor of transformation rate for the transition rate model in the simulation of dislocation loops.

Units

Seconds⁻¹ (s⁻¹).

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.
- I311 to dislocation loop transformation.

Comments

1. Set this parameter to zero to deactivate transition rate model.

E.11.4 Ebar0_311ToDL

Definition

Limit barrier energy for high structure sizes to be converted into dislocation loops.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.
- I311 to dislocation loop transformation.

E.11.5 Ebar1_311ToDL

Definition

Prefactor used to calculate the barrier energy to create dislocation loops from I311. It defines the growth level in the rate.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.
- I311 to dislocation loop transformation.

E.11.6 expo_311ToDL**Definition**

Exponent used to calculate the barrier energy to create dislocation loops from I311. It defines the growth level in the rate.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.
- I311 to dislocation loop transformation.

E.11.7 D0DLoopProp**Definition**

Proportional value to the prefactor of emission in dislocation loops.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Captures.
- Dislocation loop implementation.
- I311 to dislocation loop transformation.

E.11.8 γ

Definition

Stacking fault energy per unit area used to calculate formation energy of faulted dislocation loops.

Units

Electron-volts per square nanometer (eV/nm^2).

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.

E.11.9 μ

Definition

Shear modulus used to calculate formation energy of faulted dislocation loops.

Units

Electron-volts per cubic nanometer (eV/nm^3).

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.

E.11.10 ν

Definition

Poisson's ratio for dislocation loops.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.

E.11.11 burgVectMod

Definition

Modulus of the Burgers vector for dislocation loops.

Units

Nanometers (nm).

Related DADOS mechanisms

- Dislocation loop implementation.

E.12 Platelets

E.12.1 D0PlateletProp

[TO BE DEVELOPED]

E.13 Voids

Definition

Minimum size for a vacancy cluster to be converted into a void (see amorphous pockets to void transformation)

Units

Dimensionless (number of particles).

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets to voids transformation.
- Void implementation.

Comments

1. This parameter is relevant only at annealing temperatures.

E.13.1 size0_ClustertoVoids**Definition**

Prefactor of threshold in the simulation of voids.

Units

Dimensionless (number of particles).

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets to voids transformation.
- Void implementation.

Comments

1. This parameter is relevant only at low temperatures.

E.13.2 EClustertoVoids

Definition

Threshold energy in the simulation of voids.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Amorphous pockets to voids transformation.
- Void implementation.

Comments

1. This parameter is relevant only at low temperatures.

E.14 Complexes

E.14.1 D0F_ComplexProp ? ?

Definition

Proportional value to the prefactor of impurities emission for complexes. The emitted particle will be:

- A single impurity if it is mobile (F, O, ...).
- An impurity native-defect pair if the single impurity is immobile (As, B, C) and it is emitted as a point defect (AsV, Bi, Ci, ...).

Interrogation marks (?) indicate the particles of the complex for which the parameter is defined, for instance, D0F_ComplexProp I B is used for BnIm complex.

Involved particles

- Single neutral “native defects”.
- Single impurities.

Units

Square centimeters per second (cm^2/s).

Related DADOS mechanisms

- Complex implementation.

Comments

1. The proportional prefactor for emission of single neutral “native defects” is taken to be equal to the one of the corresponding clusters (see `D0_ClusterProp`).

E.14.2 Etotal _Complex ? ?**Definition**

Total energy. Energy to separate all particles from a complex X_mA_n . Formation energies of native defects particles are not included.

Interrogation marks (?) indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, `Etotal_Complex I C` is used for C_nI_m complex.

Involved particles

- Single neutral “native defects”.
- Single impurities.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Complex implementation.

Comments

1. The lower the values, the higher the complex stability.
2. If there is no energy included in the DDP file, DADOS assumes that this configuration is unstable and it gives a value of +5 eV to the potential energy to avoid the creation of this kind of complexes.

E.14.3 EbarrierB _Complex ? ?

Definition

Barrier energy for capture and emission of back particles.

Interrogation marks (?) indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, EbarrierB_Complex I C is used for CnIm complex.

Involved particles

Single neutral “native defects”.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Complex implementation.

Comments

1. This energy is implemented for both emission and capture as the process must be reversible.

E.14.4 EbarrierF_Complex ? ?

Definition

Barrier energy for capture and emission of front particles.

Interrogation marks (?) indicate the particle for which the parameter is defined, for instance, EbarrierF_Complex I C is used for CnIm complex.

Involved particles

Single impurities.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Complex implementation.

Comments

- This energy is implemented for both emission and capture as the process must be reversible.

E.15 Interfaces

E.15.1 Csol0_?

Definition

Prefactor of solubility.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Csol0_As is used for calculate solubility in arsenic.

Involved particles

- Single impurities.
- Impurities-"native defect" pairs.
- Impurities in other structures.

Units

Particles per square centimeter (cm^{-2}).

Related physical magnitudes

- Solubility.

Related DADOS mechanisms

- Emission from surface.
- Trapping.

Comments

1. We only consider electrical (substitutional) solubility.
2. Set this parameter to its negative value to simulate impurity in-diffusion into the silicon side.

E.15.2 Esol_?**Definition**

Solubility energy.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Esol_As is used for calculate solubility in arsenic.

Involved particles

- Single impurities.

- Impurities-"native defect" pairs.
- Impurities in other structures.

Units

Electron-volts (eV).

Related physical magnitudes

- Solubility.

Related DADOS mechanisms

- Emission from surface.
- Trapping.

Comments

1. We only consider electrical (substitutional) solubility.

E.15.3 Surf_h0_?

Definition

Prefactor of coefficient “h”, which is related to the trapping.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Surf_h0_B is used for boron.

Involved particles

- Single impurities.
- Impurities-"native defect" pairs.
- Impurities in other structures.

Units

Centimeters per second (cm/s).

Related DADOS mechanisms

- Emission from surface.
- Trapping.

Comments

1. Set this parameter to zero to simulate impurity mirror interface.

E.15.4 Surf_Eh_?

Definition

Energy of coefficient “h”, which is related to the trapping.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Surf_Eh_B is used for boron.

Involved particles

- Single impurities.
- Impurities-"native defect" pairs.
- Impurities in other structures.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Emission from surface.
- Trapping.

E.15.5 Surf_e_a0_?

Definition

Prefactor of the ratio of emission to absorption probabilities for the interface.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Surf_e_a0_B is used for boron.

Involved particles

- Single impurities.
- Impurities-"native defect" pairs.
- Impurities in other structures.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Emission from surface.
- Trapping.

E.15.6 Surf_Ee_a_?

Definition

Energy of the relation between emission and absorption probabilities for the interface.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Surf_Ee_a_B is used for boron.

Involved particles

- Single impurities.
- Impurities-"native defect" pairs.

- Impurities in other structures.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Emission from surface.
- Trapping.

E.15.7 SurfMaxTrap_?

Definition

Maximum concentration of trapped particles allowed at the interface side indicated by "?", for instance, SurfMaxTrap_B is used for boron.

Involved particles

- Single impurities.
- Impurities-"native defect" pairs.
- Impurities in other structures.

Units

Particles per square centimeter (cm⁻²).

Related DADOS mechanisms

- Emission from surface.
- Trapping.

E.15.8 Segreg_pref_?

Definition

Prefactor of the segregation coefficient.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Segreg_pref_BOxide is used for boron in oxide silicon.

Involved particles

- Single impurities.
- Impurities-"native defect" pairs.
- Impurities in other structures.

Units

Dimensionless.

Related DADOS mechanisms

- Segregation.
- Trapping.

Comments

E.15.9 Segreg_eV_?

Definition

Segregation energy.

Interrogation mark (?) indicates the particle for which the parameter is defined, for instance, Segreg_eV_BOxide is used for boron in oxide silicon.

Involved particles

- Single impurities.

- Impurities-"native defect" pairs.
- Impurities in other structures.

Units

Electron-volts (eV).

Related DADOS mechanisms

- Segregation.
- Trapping.

Comments

E.15.10 RecLnm_?

Definition

Recombination length for the interface shown in “?”, for instance, RecLnm_IOxide is used for interstitials in oxide silicon.

Involved particles

Single neutral native defects.

Units

Nanometers (nm).

Related physical magnitudes

- Recombination length.

Related DADOS mechanisms

- Surface recombination.

Comments

1. Recombination of single neutral native defects in the volume is not implemented in UVAS, as its frequency is extremely low.

E.15.11 SuperSat_?**Definition**

Interstitial or vacancy supersaturation in the material indicated by “?”. For example: `SuperSat_V` is the vacancy supersaturation in oxide silicon.

Involved particles

Single neutral native defects.

Units

Dimensionless.

Related physical magnitudes

- Supersaturation.

Comments

1. This value is used by DADOS to initialize, as it will change during the simulation.

UVAS Help (VI): Physical magnitudes

In this chapter, we will explain several magnitudes which are directly related to the mechanisms that we will describe afterwards.

F.1 Break-up of charged impurity-"native defect" pairs

F.1.1 Boron

The pairing, break-up and charge reactions related to B_i are represented by the reactions below (figure F.1).

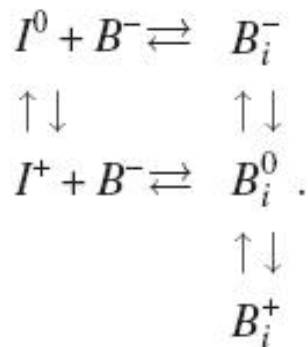


Figure F.1: Boron break-up

Comments

- Substitutional boron is always immobile and ionized (B^-).
- Horizontal reactions (pairing and break-up) conserve the charge while vertical reactions establish the electrical equilibrium.

- The rate of the horizontal reactions will not depend on Fermi level.
- Direct break-up of B_i^+ is not included because I^{++} is not implemented.
- The activation energy for B_i^- break-up will be $E_b(B_i^-) + E_m(I^0)$ (see figure F.2), where E_b is the binding energy and E_m is the migration energy.

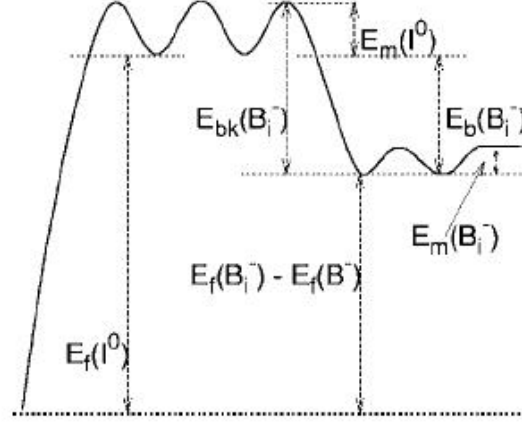


Figure F.2: Boron energies

- Considering energy conservation, we can conclude: $E_b(B_i^0) = E_b(B_i^-) + e_{B_i}(0, -) - e_I(+, 0)$, where $e(j, j - 1)$ is the electronic level for species at temperature T. Electronic levels scale with gap energy, introducing a slight temperature dependance in binding energy for B_i^0 .
- The number of broken B_i^- per unit of volume and time will be $C_{B_i} \nu_{bk}(B_i^-)$ and the number of new formed $C_B - C_{I0} \nu_m(I^0) \nu_{capt}$, where ν_{capt} is the effective capture volume for pairing reaction. Consequently, in local equilibrium conditions:

$$\frac{C_{B_i^-}}{C_{B_i}} = C_{I0} \frac{\nu_m(I^0)}{\nu_{bk}(B_i^0)} \nu_{capt} \quad (\text{F.1})$$

- And, from equilibrium conditions it can be also derived that the break-up prefactors, $\nu_{bk,0}$ must fulfill:

$$\frac{\nu_{bk,0}(B_i^0)}{\nu_{bk,0}(B_i^-)} = \frac{\nu_{m,0}(I^+)}{\nu_{m,0}(I^0)} \quad (\text{F.2})$$

F.1.2 Long-hop distance

After B_i formation, this point defect migrates through the material an average distance, Λ (long-hop distance) until it breaks up.

The long-hop distance can be expressed as:

$$\Lambda = \sqrt{\frac{\lambda^2 \nu_{m,B_i}}{6 \nu_{bk,B_i}}} \quad (\text{F.3})$$

The energy associated to this process can be calculated as follows:

$$E_{\Lambda} = -\frac{E_{m,B_i} - E_{b,B_i} - E_{mI}}{2} \approx -0,6 \text{ eV} \quad (\text{F.4})$$

F.2 Concentration ratio of charged species

The relative concentration between the of charged species is:

$$\frac{C_{X^{j-1}}}{C_{X^j}} = \frac{g^{j-1}}{g^j} \exp\left(\frac{e_F - e(j, j-1)}{kT}\right) \quad (\text{F.5})$$

Where:

- C_{X^j} is the concentration of “X” with charge “q”.
- g_j is the degeneracy factor. We assume it to be the same for all charge states, i.e. there is no entropy change associated to charge transitions.
- e_F is the Fermi level.
- $e(j, j-1)$ is the electronic level for species “X” at temperature T. In the DDP file, this parameter is defined but for T = 0 K.
- See symbol list.

According to the equation, the following expressions are valid:

$$\begin{aligned} \frac{C_{X^-}}{C_{X^0}} &= \exp\left(\frac{e_F - e(0, -)}{kT}\right) \\ \frac{C_{X^{--}}}{C_{X^0}} &= \exp\left(\frac{2e_F - e(0, -) - e(-, --)}{kT}\right) \\ \frac{C_{X^+}}{C_{X^0}} &= \exp\left(\frac{e(+, 0) - e_F}{kT}\right) \\ \frac{C_{X^{++}}}{C_{X^0}} &= \exp\left(\frac{e(+++, +) + e(+, 0) - 2e_F}{kT}\right) \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

F.3 Equilibrium concentrations

The concentration of single neutral native defects under equilibrium conditions is determined by:

$$C^* = C_0^* \exp\left(-\frac{E_f}{kT}\right) \quad (\text{F.7})$$

Where:

- C_0 is the prefactor, related to DADOS parameter C_{0relEq} ? under equilibrium conditions as follows:

$$C_0^* = C_{Si} \cdot C_{0relEq} \quad (\text{F.8})$$

- E_f is the formation energy, that is equal to the input parameter E_{form} ?
- See symbols list.

F.3.1 Diffusivities

Diffusivity is calculated by DADOS depending on the type of particle.

F.3.2 Direct diffusivity of single impurities

For single impurities non assisted by interstitials or vacancies (e.g. F, H,...):

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right) \quad (\text{F.9})$$

Where:

- D_0 is the prefactor of diffusivity.
- E_m is the migration energy.
- See symbols list.

F.3.3 Effective diffusivity of native defect

For I or V, the relevant magnitude is the DC product. Thus, the effective diffusivity of I or V can be defined as:

$$D^{eff} = \frac{DC}{C_{Si}} \quad (\text{F.10})$$

Where:

- D is the prefactor of diffusivity.
- C_{Si} is the atomic density in crystalline silicon.

Thus:

$$D^{eff*} = \frac{DC^*}{C_{Si}} \quad (F.11)$$

The activation energy of D^{eff*} is:

$$E_{dif} = E_f + E_m \quad (F.12)$$

- E_f is the formation energy.
- E_m is the migration energy.

F.3.4 Silicon self-diffusion

The diffusivity of silicon in silicon (self-diffusion) is given by:

$$D_{Si} = \sum_x f_x \sum_j D_{Xj} C_{rel,Xj} \quad (F.13)$$

Where f_x is taken to be 0.72 for interstitials and 0.5 for vacancies.

F.3.5 Effective diffusivity of dopants

For immobile impurities, diffusivity through mobile pairs, AX:

$$D_A^{eff} C_A = \sum_x \sum_j D_{AXj} C_{AXj} \quad (F.14)$$

Let's use the boron (negative ion is substitutional positions).

$$D_B^{eff} = D_{B_i^-} \frac{C_{B_i^-}}{C_{B^-}} + D_{B_i^0} \frac{C_{B_i^0}}{C_{B^-}} + D_{B_i^+} \frac{C_{B_i^+}}{C_{B^-}} \quad (F.15)$$

Where:

- D^{eff} is the effective diffusivity.

- C_X is the concentration of X.
- e_X is the energy level of X.
- e_F is the Fermi level.
- p is the holes concentration.
- n_i is the holes or electrons intrinsic concentration.
- See symbols list.

Let's take the equation (F.15). The first item does not depend on Fermi level, the second one does and is proportional to $\frac{p}{n_i}$ and the last one is proportional to $\left(\frac{p}{n_i}\right)^2$. These proportionalities are valid only within the Maxwell-Boltzmann approximation (non-degenerated material).

The activation energies of the terms in the previous equation (diffusion energies, E_{dif}) are represented in the figure below. The diffusion energy value for boron under intrinsic conditions in the figure F.3 (E_{dif}^{int}) will be similar to the activation energy of the Arrhenius plot of equilibrium boron diffusivity in intrinsic condition. In the figure, it can be seen that B_i^0 is a metastable state but is the main contributor for boron diffusion in a wide range of Fermi levels. All the three terms of the equation are proportional to:

$$\frac{C_{B_i^-}}{C_B} = \frac{6v_{capt}}{\lambda^2} \frac{D_I C_I}{\nu_{bk, B_i^-}} \tag{F.16}$$

Note that $D_I C_I$ is the DC product of neutral interstitials. Thus, boron diffusion does not depend on the charge states of I, but on those of B_i .

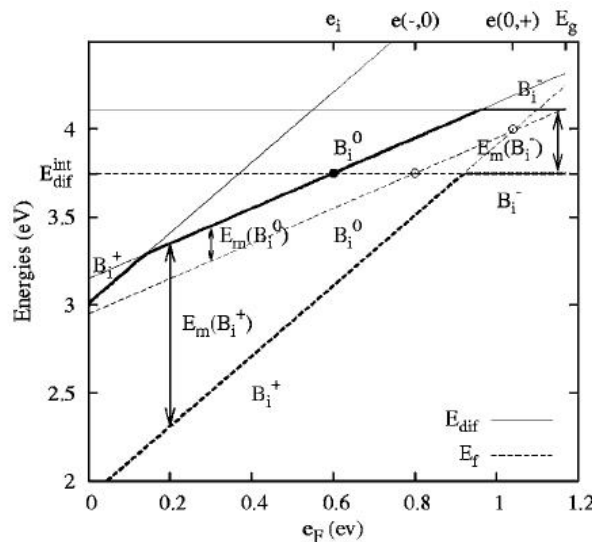


Figure F.3: Boron energies

F.4 Electric drift

The figure below shows electric drift as a natural consequence of the local dependance of the formation energies of charged particles. See figure F.4.

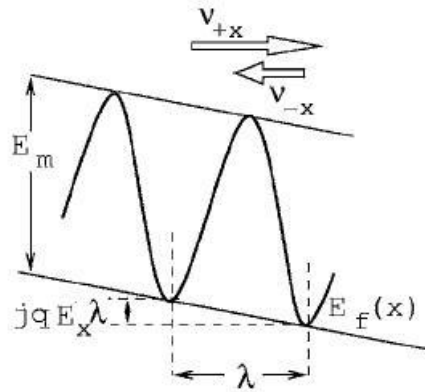


Figure F.4: Electric drift

The relation between the migration frequency in the positive and negative directions along the x axis for a point defect with charge “ jq ” is (assuming constant band gap):

$$\frac{\nu_{m,+x}}{\nu_{m,-x}} = \exp\left(-\frac{\lambda}{kT} \frac{dE_f}{dx}\right) = \exp\left(\frac{jqE_x\lambda}{kT}\right) \quad (\text{F.17})$$

Where:

- E_x is the electric field in “ x ” direction.
- λ is the capture distance.
- E_f is the formation energy.
- See symbol list.

F.5 Carriers and Fermi levels

Usually, the Fermi level, e_F , is calculated from the majority-carrier concentration. The process is explained in the Mechanisms section. But, also, the minority-carrier concentration can be found from Fermi level:

$$\begin{aligned} n &= N_c \cdot \mathcal{F}_{1/2}\left(\frac{e_F - E_c}{kT}\right) \\ p &= N_v \cdot \mathcal{F}_{1/2}\left(\frac{E_v - e_F}{kT}\right) \end{aligned} \quad (\text{F.18})$$

Where:

- N_c is the effective density of states in the conduction band.
- N_v is the effective density of states in the valence band.
- $\mathcal{F}_{1/2}$ is the inverse Fermi-Dirac function:

$$\mathcal{F}_{1/2}(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta^{1/2}}{1+\xi-\eta} d\xi \quad (\text{F.19})$$

- See symbol list.

F.6 Formation energies for charged species

The formation energy for a species “X” with charge “j” is given by:

$$E_f(X^j) = E_f(X^{j-1}) + e_F - e(j, j-1) \quad (\text{F.20})$$

Where:

- e_F is the Fermi level.
- $e(j, j-1)$ is the electronic level for species “X” at temperature T. In the DDP file, this parameter is defined but for T = 0 K.

Formation energy for vacancies is plotted in dashed lines in the figure F.5. The total effective formation is the lowest one. That is given by:

$$E_{dif}(X^j) = E_f(X^j) + E_m(X^j) \quad (\text{F.21})$$

Where:

- E_f is the formation energy.
- E_m is the migration energy, assumed to be independent on the Fermi level.

Solid lines in figure F.5 represent the activation energy of DC^* product of charged species.

The situation for interstitials is analog. See figure F.6.

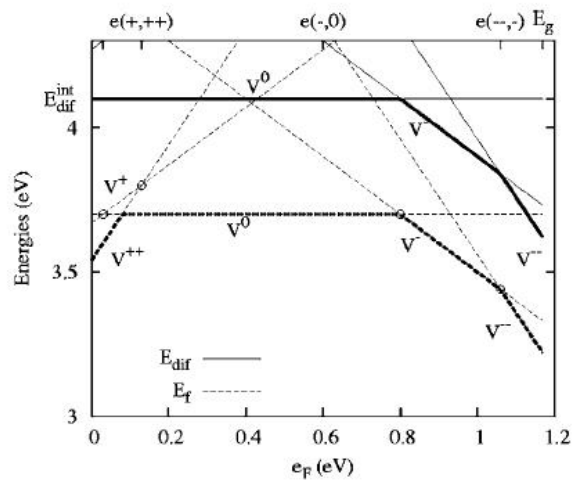


Figure F.5: Energies for vacancies

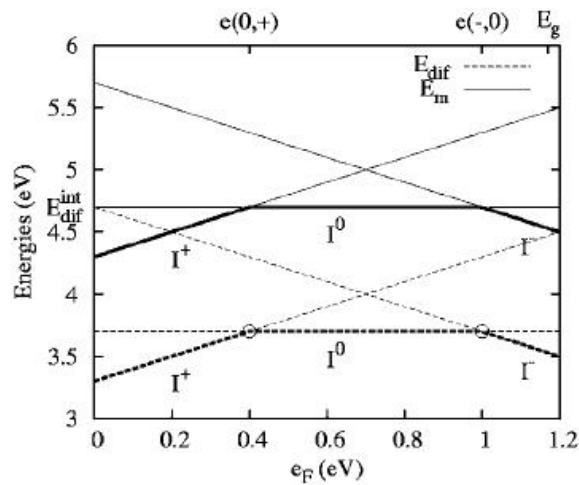


Figure F.6: Energies for interstitials

F.7 Intrinsic carrier concentration and intrinsic level

Intrinsic carrier concentration is defined as follows:

$$n_i(T) = \sqrt{(N_c N_v)} \exp\left(-\frac{E_g(T)}{2kT}\right) \quad (\text{F.22})$$

Where:

- N_c is the density of states in the conduction band.
- N_v is the density of states in the valence band.
- E_g is the band gap width.

- See symbol list.

Intrinsic electronic level is defined as follow:

$$e_i(T) = \frac{E_g(T)}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_c}{N_v} \right) \quad (\text{F.23})$$

Where:

- N_c is the density of states in the conduction band.
- N_v is the density of states in the valence band.
- E_g is the band gap width.
- See symbol list.

F.8 Probabilities and charge states

DADOS implements two parameters depending on the charge:

- Diffusivities. Each species has its own migration energy and prefactor, that is assumed to be independent on the Fermi level.
- Proportion of concentrations. Probability of a particle “X” with charge “j” to be in a charge state. It can be calculated as follows:

$$P_{X^j}^j = \frac{C_{X^j}}{\sum_j C_{X^j}} \quad (\text{F.24})$$

Where C_{X^j} is the concentration of particle “X” with charge “j”.

This probability is calculated using the expresions shown in the concentration ratio of charged species section.

F.9 Recombination length

Recombination length is defined as:

$$L = \frac{\lambda}{P} \quad (\text{F.25})$$

Where:

- λ is the jump distance.
- P is the probability of being captured in the surface.

The probability affects emission frequency of single neutral native defects. Thus, the recombination length does not affect the equilibrium concentration, C^* .

$$C_{surf} = C^* + L \frac{\partial C}{\partial x} \tag{F.26}$$

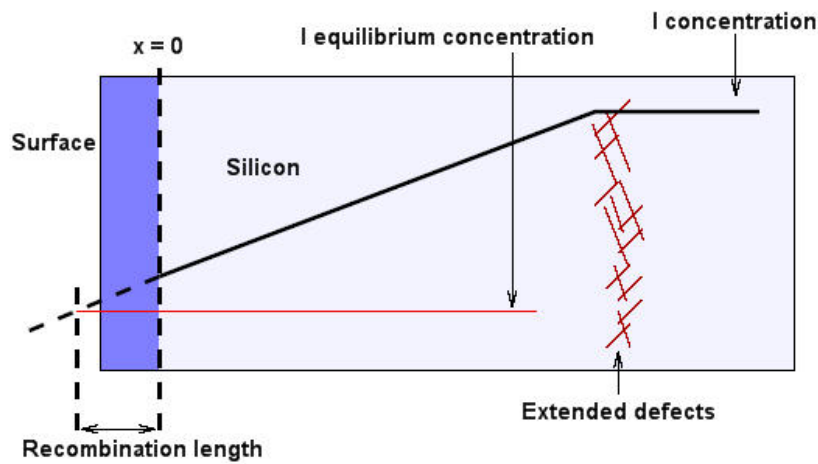


Figure F.7: Recombination length

F.10 Sheet resistance

Let's suppose the structure shown in the figure F.8.

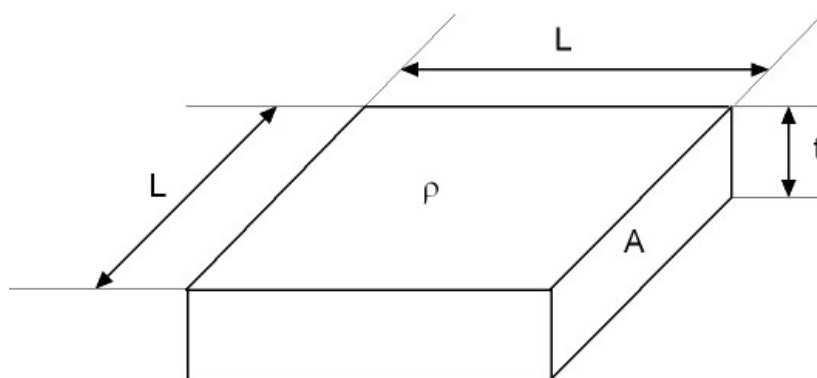


Figure F.8: Sheet resistance

As its top surface is square, we can define the sheet resistance as follows:

$$R_{\square} = \rho \frac{L}{tL} = \frac{\rho}{t} \tag{F.27}$$

Where:

- ρ is the resistivity.
- L and t are the box dimensions (see figure F.8).

In an electronic device, under extrinsic conditions, the sheet resistance can be approximated by:

$$R_{\square} = \frac{1}{\int_0^{x_j} q\mu N(x) dx} \quad (\text{F.28})$$

Where:

- x_j is the junction depth.
- μ is the majority-carrier mobility.
- $N(x)$ is the net impurity concentration.
- See symbol list.

For a given diffusion profile, sheet resistance is uniquely related to the surface concentration of the diffused layer and the background concentration of the wafer.

F.11 Solubility

Solubility is implemented in DADOS by means of C_{max} , which is the maximum solid solubility of dopant in the material, obtained with $C_{sol0_?}$ and $E_{sol_0_?}$ with an Arrhenius plot:

- For the silicon side:

$$C_{max} = C_{sol0_?} \exp\left(-\frac{E_{sol_0_?}}{kT}\right) \quad (\text{F.29})$$

- For the non-silicon side (using segregation):

$$C_{max} = \text{Segregation} \cdot C_{sol0_?} \exp\left(-\frac{E_{sol_0_?}}{kT}\right) \quad (\text{F.30})$$

F.11.1 Solubility dependence on Fermi level

Let's assume a negative dopant, A^- . Its solubility in intrinsic conditions ($e_F = e_i$) is given as:

$$[A^-]_{max}(T) = \frac{([A]_{max}^{extrinsic})^2}{n_i} \exp\left(\frac{e_F - e_i}{kT}\right) \quad (\text{F.31})$$

Where:

- $[A]_{max}^{extrinsic}$ is the maximum concentration for extrinsic conditions, that can be measured as shown in the figure F.9.

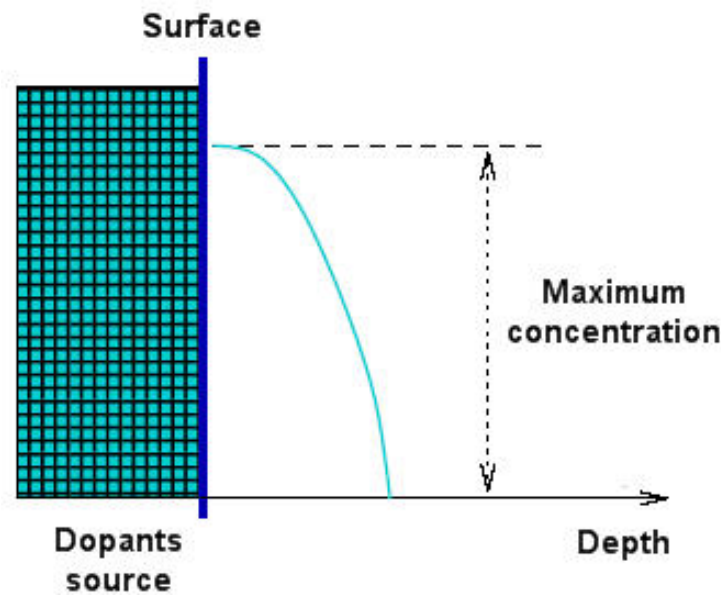


Figure F.9: Extrinsic solubility

- e_F is the Fermi level.
- e_i is the intrinsic level.
- See symbol list.

F.12 Supersaturation

Supersaturation is defined for both interstitials and vacancies as the ration between its concentration and the equilibrium one.

$$S_X = \frac{C_{Xj}}{C_{Xj}^*} = \frac{C_{X0}}{C_{X0}^*} = \frac{C_X}{C_X^*} \quad (\text{F.32})$$

Supersaturation does not depend on the charge state. This is because the rations C^{j-1}/C^j do not depend on the excess of defects, but only on e_F .

F.13 List of symbols

Table F.1: List of symbols

| Symbol | Name | Value | Units |
|----------|---|------------------------|------------------|
| a | Lattice parameter | 0.543 | nm |
| C_{Si} | Intrinsic atomic concentration in silicon | $5 \cdot 10^{22}$ | cm^{-3} |
| k | Boltzmann constant | $8.6174 \cdot 10^{-5}$ | eV/K |
| T | Temperature | - | J |
| q | Absolute value of the electron charge | $1.6 \cdot 10^{-19}$ | C |

UVAS Help (VII): DADOS mechanisms

DADOS mechanisms are the ways used by the simulator to implement physical models. In this chapter we will briefly explain them.

G.1 Amorphous implementation

G.1.1 Amorphization

DADOS uses `AmorphizationThreshold` to change the box state into amorphous [16]. In this state, DADOS only counts the number of particles instead of store full data.

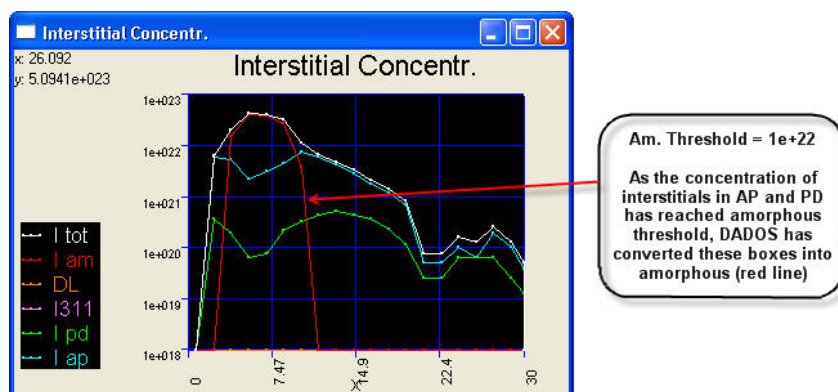


Figure G.1: Amorphization in DADOS

Amorphous boxes properties:

- When an interstitial or vacancy comes into an amorphous region, it is deleted. DADOS only counts the amount the difference, I-V.
- Impurities coming into an amorphous region are also deleted.

When a concentration is higher than `MaxIVStorage`, DADOS will only count the number of particles instead of store full data. With this algorithm, a lot of memory can be saved and the computerization needs cut down drastically [36].

DADOS convert into amorphous a region whose size is lower than the value indicated by `LatticeCollapse_nm3` if it is surrounded by an amorphous structure [34]. Sometimes, a box should become amorphous but there are not enough particles and it does not because of probabilities aspects related to simulation techniques. This could also be an important drawback as this non amorphous regions would be an important source of errors in recrystallization processes. In order to prevent from physically incorrect effects, DADOS also smooth amorphous regions with sizes higher than `LatticeCollapse_nm3` by homogeneously distributing the concentrations.

Information about these parameters can be found in the messages window at the beginning of a simulation (see figure G.2).

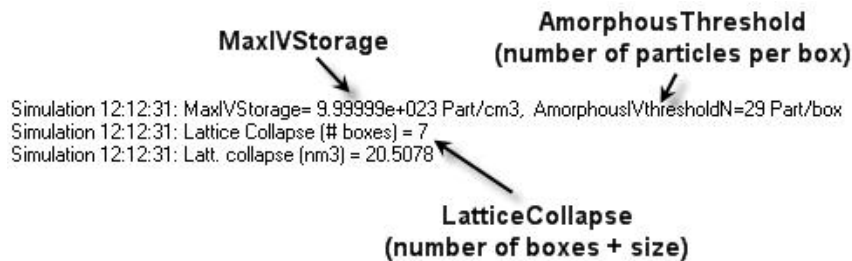


Figure G.2: Related to amorphization data in the messages window

G.1.2 Recrystallization

Recrystallization occurs at high temperature and only in the amorphous-crystalline interfaces, according to research, following a direction called “recrystallization front”, towards the amorphous side. The velocity of recrystallization is defined by means of an Arrhenius plot:

$$v = v_{0\text{recryst}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\text{recryst}}}{kT}\right) \quad (\text{G.1})$$

Where:

- $v_{0\text{recryst}}$ is the prefactor of recrystallization velocity
- E_{recryst} is the recrystallization velocity energy.
- See symbol list.

Recrystallization is implemented by recombining interstitials with vacancies, but the number of these particles in an amorphous box which is going to recrystallize do not have to be the same. Thus, the box will have extra interstitials or vacancies. DADOS will transfer these particles into the next amorphous box, following the direction indicated by the recrystallization front (see

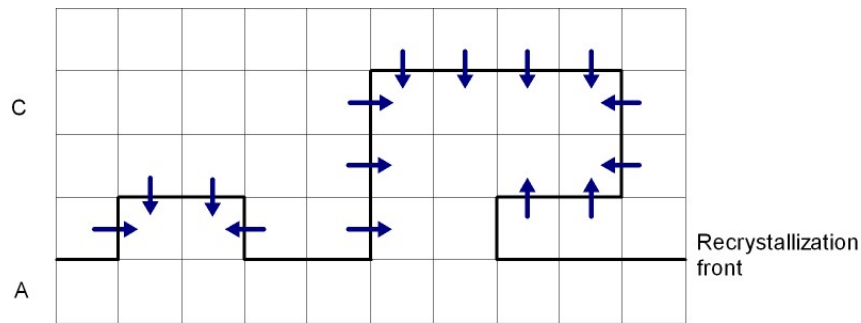


Figure G.3: Related to amorphization data in the messages window

figure G.3). If this front finds a surface, interstitials and vacancies will be eliminated there. If not, they will form clusters that, after annealing will evolve towards extended defects.

In an amorphous box which is going to recrystallize, there can be impurities. These ones can stay in the box as substitutional structures or be transferred into the next amorphous box following the direction indicated by the recrystallization front. In order to choose what to do, DADOS uses a probability, `recrysDepositProb_?`. But the maximum number of impurities particles that can be deposited in the box is limited by `recrysMaxActive_?`. The excess is deposited as complexes, with a maximum number of impurities in them defined by `maxDepositedCxSize_?`.

G.2 Amorphous pocket implementation

Amorphous pockets are implemented as irregular shapes containing single neutral “native defects”.

G.2.1 Emission

Once all the IV pairs have been recombined, the amorphous pockets tries to be dissolved. The particles not recombined wait for a dissolution event, calculated with the frequency:

$$\nu_{dissol} = \frac{6}{\lambda^2} \cdot \text{D0AmorphousPocket} \cdot \exp\left(-\frac{E_{dissol}}{kT}\right) \quad (\text{G.2})$$

Where:

- λ is the jump distance.
- `D0AmorphousPocket` is a prefactor in diffusivity units.
- E_{dissol} is the activation energy.
- See symbols list.

G.2.2 Growth

When a mobile particle is near enough to the amorphous pocket (closer than the capture distance), it is captured by it and is inserted into it. See amorphous pockets interactions for further information.



If the amorphous pocket has a large size (higher than a threshold), DADOS only counts the number of particles being captured by it (hidden particles), in order to save memory [36]. An impurity can also be captured by the amorphous pocket:

- If it is a single impurity, it doesn't affect the amorphous pocket size.
- If it is an impurity-“native defect” pair, DADOS splits it into a single impurity, which doesn't affect the size, and a single neutral “native defect”, which does.

G.2.3 Shrinkage

Interstitials and vacancies can be recombined inside the structure. This is called dynamic annealing or shrinkage. This process is energetically more favorable than emission. The frequency associated to this event is given as follows:

$$\nu_s = \frac{6}{\lambda^2} \cdot \text{D0AmorphousPocket} \cdot \min(m, n)^{\text{ExponentAmorphousPocket}} \cdot \exp\left(-\frac{\text{Eb_AmorphousPocket} \left(\frac{m+n}{2}\right)}{kT}\right) \quad (\text{G.4})$$

Where:

- λ is the jump distance.
- `D0AmorphousPocket` is a prefactor in diffusivity units.
- m is the number of interstitials in the amorphous pocket.
- n is the number of vacancies in the amorphous pocket.
- `ExponentAmorphousPocket` is an exponent.
- `Eb_AmorphousPocket` is the activation energy.
- See symbols list.

G.3 Charge model implementation

Simulated particles can have different charge states. As other parameters such as diffusion depend on the charge, DADOS implement charged particles as different species as shown in the table G.1

Table G.1: Charged particles in DADOS

| Physical particle | Implemented species | Particle types names |
|-------------------|---------------------|----------------------|
| I | I^+ | IP |
| | I^0 | I |
| | I^- | IM |
| V | V^{++} | VPP |
| | V^+ | VP |
| | V^0 | V |
| | V^- | VM |
| | V^{--} | VMM |
| As | As^+ | As |
| Asi | Asi^+ | AsiP |
| | Asi^0 | Asi |
| AsV | As^+ | AsVP |
| | As^0 | AsV |
| | As^- | AsVM |
| B | B^- | B |
| Bi | Bi^+ | BiP |
| | Bi^0 | Bi |
| | Bi^- | BiM |
| C | C^0 | C |
| Ci | Ci^0 | Ci |
| In | In^- | In |
| InV | InV^0 | InV |
| | InV^- | InVM |
| Ini | Ini^0 | Ini |
| | Ini^- | IniM |
| P | Pi^0 | Phi |
| | Pi^+ | PhiP |
| Pi | Pi^0 | Phi |
| | Pi^+ | PhiP |
| PV | PV^+ | PhVP |
| | PV^0 | PhV |
| | PV^- | PhVM |

DADOS assumes some hypotheses:

- Temperature dependance of charge levels and gap narrowing of charge levels dependance is the same as for the band gap.
- Charge is adapted and updated instantaneously, as charge reactions are much faster than structural ones.

- Substitutional dopants are always ionized and in the same charge state.

G.3.1 Band gap narrowing

Shifts of the minimum value of conduction band and maximum value of valence band are calculated by DADOS using the following expressions, according to Jain Roulston model [37]:

- For n-semiconductors:

$$\Delta E_c = A_{cn1_4} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/4} + A_{cn1_3} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/3} + A_{cn1_2} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/2} \quad (G.5)$$

$$\Delta E_v = A_{vn1_4} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/4} + A_{vn1_3} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/3} + A_{vn1_2} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/2} \quad (G.6)$$

- For p-semiconductors:

$$\Delta E_c = A_{cp1_4} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/4} + A_{cp1_3} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/3} + A_{cp1_2} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/2} \quad (G.7)$$

$$\Delta E_v = A_{vp1_4} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/4} + A_{vp1_3} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/3} + A_{vp1_2} \left| \frac{N}{10^{18}} \right|^{1/2} \quad (G.8)$$

Where:

- N is the effective concentration of active dopants (with sign): $N = N^+ - N^-$, where N^+ is the active donor concentration and N^- is the active acceptor concentration.
- $A_{??1_?}$ are constants.

In every charge update, ΔE_c and ΔE_v are calculated.

For the rest of the electronic levels, DADOS assumes a proportional variation with the band gap narrowing as given by the expression:

$$\Delta e_{-?} = \frac{E_c - e_{-?}}{E_c - E_v} \Delta E_v + \frac{e_{-?} - E_v}{E_c - E_v} \Delta E_c \quad (G.9)$$

Where:

- E_c is the conduction band energy.
- E_v is the valence band energy.
- $e_{-?}$ is a generic energy charge level.

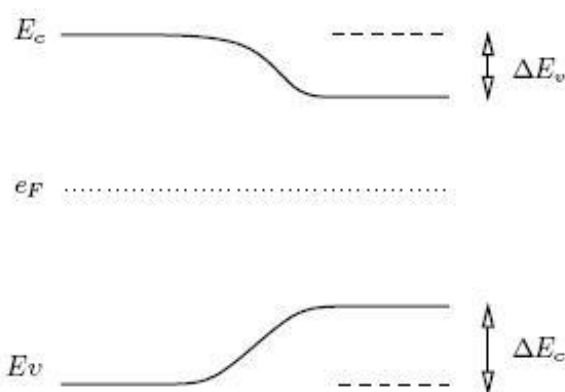


Figure G.4: Band gap narrowing

G.3.2 Charge attractions and repulsions

DADOS implements electrostatic interactions in both short and long range:

- For **short range**, repulsions are implemented by forbidding the interaction among charged particles (not neutral) with the same charge.
- For **long range**, electrostatic interactions (attractions and repulsions) are automatically included due to the electric drift in the migration (this process depends on the Fermi level).

G.3.3 Charge update

There are two mechanisms to control the charge states probabilities:

Dynamic update. The charge state is updated whenever the particle jumps, in order to follow the probabilities of charged species in each box. These probabilities have been previously calculated as a function of the Fermi level during the static update. This is suitable for particles jumping at low frequencies.

Static update. The charge state is updated every some time.

DADOS uses a counter to simulate charge update and calculate Fermi level in all boxes. Every time an electrically active dopant is created or destroyed, the counter increases. When the counter value is higher than a threshold, DADOS updates the charge state for all particles.

The threshold changes during the simulation, according the charge variations. With the parameter `ChargeVarPercent`, this mechanism can be controlled. This parameter indicates the maximum relative error allowed in Fermi level updates. The higher `ChargeVarPercent` is, the less updates are done. It is NOT recommended changing this parameter because DADOS is very sensitive to variations in this value. Modifications of this parameter should be allowed only for advanced users because:

- If `ChargeVarPercent` is very low, calculations will be made very frequently, and the simulation will become slower.
- If `ChargeVarPercent` is very high, updates will not be frequent enough, and physically incorrect values might be obtained.

G.3.4 Electric drift implementation

As the formation energy of charged species depends on the Fermi level, mobile charged point defects are going to find an energy barrier to jump into boxes in which the formation energy is higher. Electric drift is implemented in DADOS as a discrete process, setting a constant Fermi level for each box (see figure G.5).

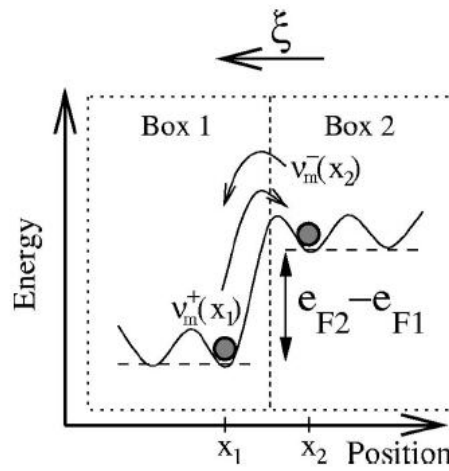


Figure G.5: Electric drift implementation

G.3.5 Fermi level calculation

DADOS calculates the Fermi level in each box using its smoothed dopant concentration, N_{sm} :

- If $N_{sm} > 0$ (n-type boxes):

$$n = \frac{1}{2}N_{sm} + \sqrt{\frac{1}{4}N_{sm}^2 + n_i^2} \quad (G.10)$$

$$e_F = E_c + kT \cdot \mathcal{F}_{1/2}^{-1} \left(\frac{n}{N_c} \right)$$

- If $N_{sm} < 0$ (p-type boxes):

$$p = -\frac{1}{2}N_{sm} + \sqrt{\frac{1}{4}N_{sm}^2 + n_i^2} \quad (G.11)$$

$$e_F = E_v - kT \cdot \mathcal{F}_{1/2}^{-1} \left(\frac{p}{N_v} \right)$$

Where:

- E_c is the conduction band energy.
- E_v is the valence band energy.
- $\mathcal{F}_{1/2}$ is the Fermi-Dirac function and $\mathcal{F}_{1/2}^{-1}$ is its inverse. Those functions, when required, are calculated with analytical approximations.
- n_i is the carrier concentration.
- See symbol list.

G.3.6 Smoothing the dopant distribution

DADOS checks all the boxes and stores the dopants per box. After that, DADOS smoothes the dopant concentration using a locally-dependent radius equal to the Debye length [38]:

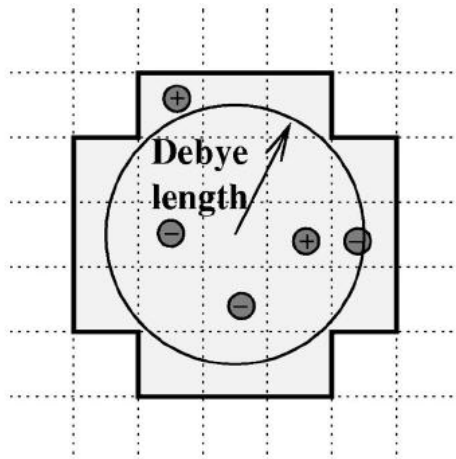


Figure G.6: Debye radius

$$r_d = \sqrt{\frac{T}{4\pi q^2 |N|}} \quad (\text{G.12})$$

Where:

- N is the effective concentration of active dopants (with sign): $N = N^+ - N^-$, where N^+ is the active donors concentration and N^- is the active acceptors concentration.
- See symbol list.

In order to avoid excessive calculation time, the maximum number of boxes for Debye length is set to 7 [38].

The smoothed dopant concentration, N_{sm} , will be used in the Fermi level calculation of each box using the neutrality approximation. This smoothed neutrality approximation is a computer-efficient method with intermediate precision between the simple local neutrality approximation and the time consuming solution of Poisson equation.

G.3.7 Temperature dependance of band structure

Band gap width

The band gap width depends on the temperature, T , following the expression:

$$E_g(T) = E_{g0} - \frac{A_{gap}^2}{B_{gap} + T} \quad (G.13)$$

Where:

- E_{g0} is the band gap width at 0 K.
- A_{gap} and B_{gap} are constant parameters.
- See symbol list.

Charge levels

We denote by $e_{-?}$ the charge level associated to a charged particle, $?$, at the current temperature, T . $e_{-?}$ is measured from the valence band edge. DADOS assumes that all charge levels temperature dependance is the same as band gap width one, thus:

$$e_{-?} = e_{-?0} \frac{E_g(T)}{E_g(0)} \quad (G.14)$$

Where:

- $e_{-?0}$ is the charge level at 0 K.
- $E_g(T)$ is the band gap width at temperature T .

Related physical magnitudes

- Equilibrium concentration of charged species.
- Formation energies of charged species.

Effective density of states

DADOS implements the density of states in both conduction and valence band as follows:

$$\begin{aligned} N_c(T) &= N_{c300} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{expNc}} \\ N_v(T) &= N_{v300} \left(\frac{T}{300} \right)^{\text{expNv}} \end{aligned} \quad (\text{G.15})$$

Where:

- N_{c300} and N_{v300} are the effective densities of states in the conduction and valence band respectively at 300 K.
- expNc and expNv are exponents to calculate the density of states in the conduction and valence band respectively.
- See symbol list.

G.4 Cluster implementation

Clusters are implemented as a special type of amorphous pockets with only one particle type, interstitials or vacancies.

G.4.1 Emission

Clusters emit particles releasing them as a point defect:



The emission frequency is given by the expression:

$$\nu_{em} = \frac{6}{\lambda^2} \cdot \text{DOClusterProp} \cdot n \cdot \exp\left(-\frac{E_b + E_m}{kT}\right) \quad (\text{G.17})$$

Where:

- λ is the jump distance.
- DOClusterProp is proportional to the prefactor.
- n is the cluster size.

- E_b is the binding energy.
- E_m is the migration energy of the released point defect.
- See symbol list.

G.4.2 Growth

When a mobile particle of the same type (X , interstitial or vacancy) that those of the cluster is near enough to the cluster (closer than the capture distance), it is captured and is inserted into it.



The energies associated to the emission and growth are plotted in the figure G.7.

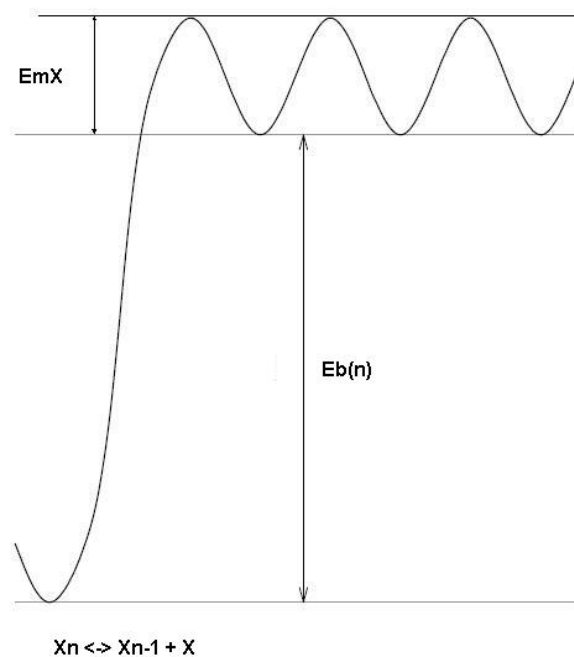


Figure G.7: Binding energy for cluster growth

G.4.3 Binding energy

Examples of the binding energy for clusters are represented in the figures G.8 and G.9.

According to experimental measurements and to calculation results, for high size values, the binding energies are fitted by a potential function. However, for low size values, the energies are irregular. DADOS implements a technique which allows insert values for specific sizes and a generic function for other sizes.

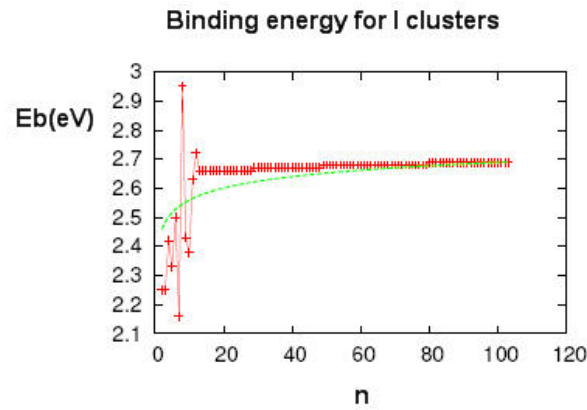


Figure G.8: Binding energy for I clusters

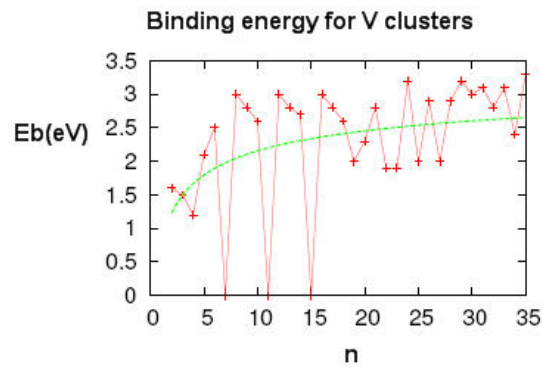


Figure G.9: Binding energy for V clusters

Specific values

They can be inserted by means of `Eb_Cluster ?`, with the DADOS data file format.

Generic function

The exponential function is implemented as follows:

$$E_b(?n) = Eb_LargeCluster ? - (Eb_LargeCluster ? - Eb_SmallestCluster ?) \cdot \frac{(n^{\text{exponent_Cluster ?}}) - (n - 1)^{\text{exponent_Cluster ?}}}{2^{\text{exponent_Cluster ?}} - 1} \quad (\text{G.19})$$

Where:

- $E_b(?n)$ is the binding energy for an interstitials or vacancies cluster (?) of size n.
- `Eb_LargeCluster ?` is the limit in binding energy for highest cluster size.

- `Eb_SmallestCluster` ? is the limit in binding energy for lowest cluster size (2).
- n is the cluster size.
- `exponent_Cluster` ? is an exponent.

This expression comes from assuming that the total binding energy of the cluster of size n depends on n .

G.4.4 Shrinkage

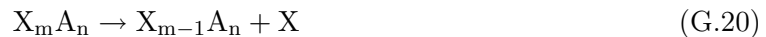
When a mobile particle of complementary type (vacancy or interstitial) of those of the cluster is near enough to the cluster (closer than the capture distance), it is recombined (with an opposite particle). When only one particle is remaining, the cluster is transformed into a point defect.

G.5 Complex implementation

$X_m A_n$ complex is a defect with n atoms of B, As, C, F, O or P (called **front particles**), and m I or V (called **back particles**). DADOS does not take into account the different possible microscopic configurations of $X_m A_n$ and uses effective numbers for each combination. I and V can be single neutral native defects or associated with the other atoms, for instance, boron in interstitial position.

G.5.1 Back particle emission

Back particles are emitted as follows:



The emission frequency is calculated by DADOS as follows:

$$\nu_{em,B}(n, m) = \frac{6}{\lambda^2} \cdot m \cdot \min(n, m) \cdot \text{DOF_ComplexProp} \cdot \exp\left(-\frac{\text{Em}(X) + \max(0, \text{Ebarr}(m-1, n)) + \max(0, \text{Eb}(B))}{kT}\right) \quad (\text{G.21})$$

Where:

- B is the back particle.
- λ is the jump distance.

- DOF_ComplexProp is a prefactor in diffusivities units.
- E_m is the migration energy.
- E_{barr} is an optional energetic barrier.
- E_b is the binding energy of the back particle, calculated as follows:

$$E_b(m, n) = E_{\text{total}}(m - 1, n) - E_{\text{total}}(m, n) \quad (\text{G.22})$$

- See symbols list.

After emission, if only one particle (or two particles that can form a pair) is remaining, the complex is transformed into a point defect. The energies associated to this process are plotted in the figure G.10.

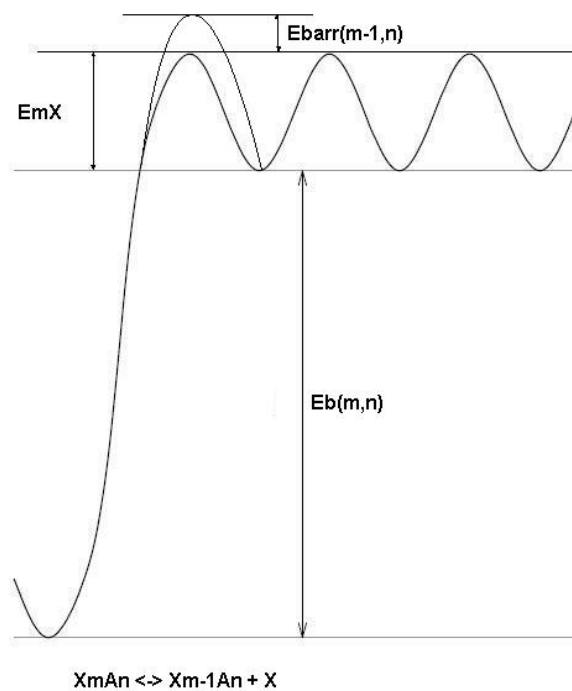


Figure G.10: Back particle emission. Associated energies

G.5.2 Front particle emission

Front particles are emitted depending whether they are mobile or immobile.

Mobile single impurity (F, O, . . .)



The emission frequency is calculated by DADOS as follows:

$$\nu_{em,F}(n, m) = \frac{6}{\lambda^2} \cdot n \cdot \text{DOF_ComplexProp} \cdot \exp\left(-\frac{\text{Em}(A) + \max(0, \text{Ebarr}(m, n-1)) + \max(0, \text{Eb}(m, n))}{kT}\right) \quad (\text{G.24})$$

Where:

- F is the front particle.
- λ is the jump distance.
- DOF_ComplexProp is a prefactor in diffusivity units.
- Em is the migration energy.
- Ebarr is an optional energetic barrier.
- Eb is the binding energy of the front particle, calculated as follows:

$$E_b(m, n) = E_{total}(m, n-1) - E_{total}(m, n) \quad (\text{G.25})$$

- See symbols list.

After emission, if only one particle (or two particles that can form a pair) is remaining, the complex is transformed into a point defect. The energies associated to this process are plotted in the figure G.11.

Immobile single impurity (B, As, C, . . .)

It is emitted within a mobile pair:



The emission frequency is calculated by DADOS as follows:

$$\nu_{em,B}(n, m) = \frac{6}{\lambda^2} \cdot \min(m, n) \cdot \text{DOF_ComplexProp} \cdot \exp\left(-\frac{\text{Em}(A) + \max(0, \text{Ebarr}(m-1, n-1)) + \max(0, \text{Eb}(m, n))}{kT}\right) \quad (\text{G.27})$$

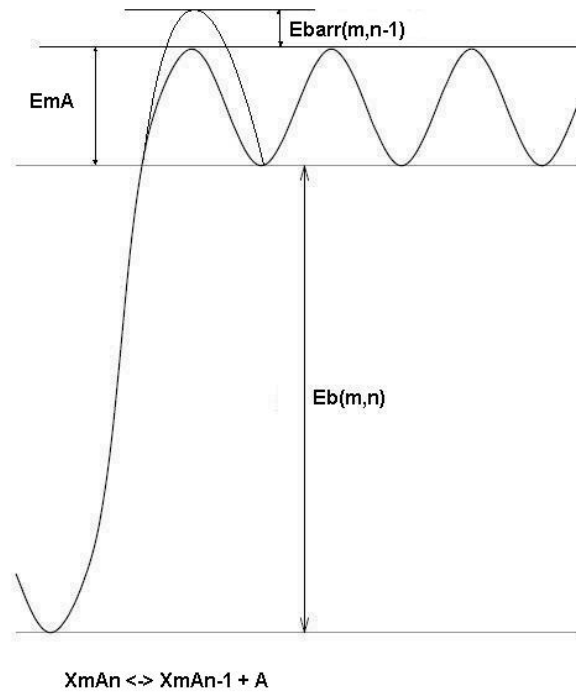


Figure G.11: Front particle emission (I). Associated energies

Where:

- F is the front particle.
- λ is the jump distance.
- $DOF_ComplexProp$ is a prefactor in diffusivities units.
- E_m is the migration energy.
- E_{barr} is an optional energetic barrier.
- E_b is the binding energy of the front particle, calculated as follows:

$$E_b(m, n) = E_{total}(m - 1, n - 1) - E_{bXA} - E_{total}(m, n) \quad (G.28)$$

- See symbols list.

After emission, if only one particle (or two particles that can form a pair) is remaining, the complex is transformed into a point defect. The energies associated to this process are plotted in the figure G.12.

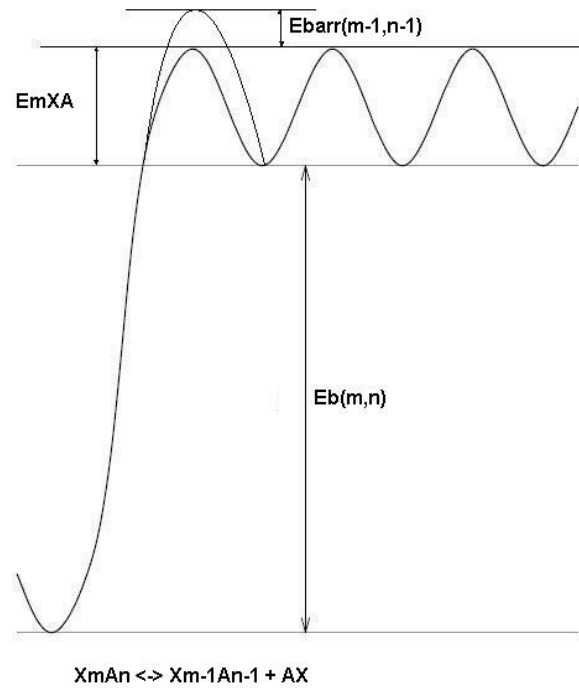


Figure G.12: Front particle emission (II). Associated energies

G.5.3 Back particle capture

Complexes can capture single neutral “native defects”.



These captures are not automatic, because of the associated energies. DADOS uses a capture probability defined as follows:

$$P_{\text{capt},B}(m, n) = \exp\left(-\frac{\max(0, E_{\text{barr}}(m, n)) + \max(0, -E_b(m+1, n))}{kT}\right) \quad (\text{G.30})$$

Where:

- B is the back particle.
- E_{barr} is an optional energetic barrier.
- E_b is the binding energy of the back particle, calculated as follows:

$$E_b(m, n) = E_{\text{total}}(m, n) - E_{\text{total}}(m+1, n) \quad (\text{G.31})$$

If there is no energy included in the DDP file, DADOS assumes that this configuration is unstable and it gives a value of +5 eV to the potential energy to avoid the creation of this kind of complexes.

- See symbols list.

The energies associated to this process are plotted in the figure G.13.

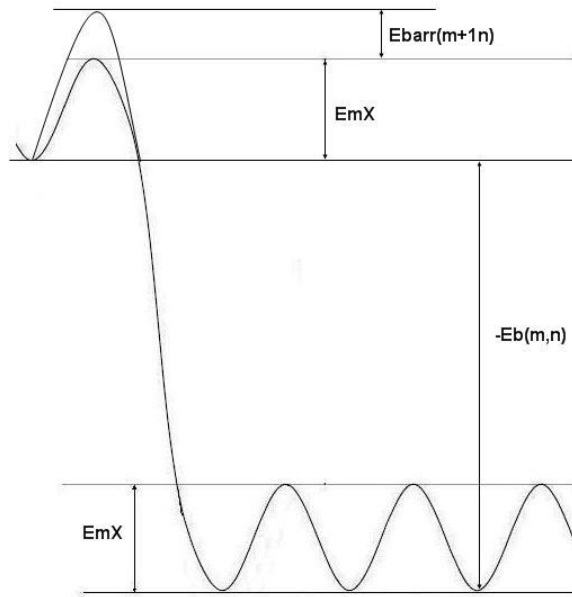


Figure G.13: Back particle capture. Associated energies

G.5.4 Front particle capture

Complexes can capture single impurities.

Mobile single impurity (F, O, ...)



These captures are not automatic, because of the associated energies. DADOS uses a capture probability defined as follows:

$$P_{capt,F}(m, n) = \exp\left(-\frac{\max(0, E_{barr}(m, n)) + \max(0, -E_b(m, n + 1))}{kT}\right) \quad (G.33)$$

Where:

- F is the front particle.
- E_{barr} is an optional energetic barrier.
- E_b is the binding energy of the back particle, calculated as follows:

$$E_b(m, n) = E_{total}(m, n) - E_{total}(m, n + 1) \quad (G.34)$$

- See symbols list.

The energies associated to this process are plotted in the figure G.14.

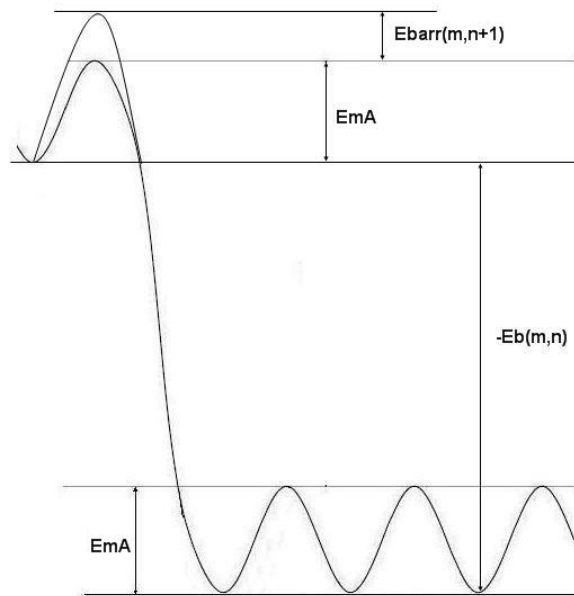


Figure G.14: Front particle capture (I). Associated energies

Immobile single impurity (B, As, C, ...)



These captures are not automatic, because of the associated energies. DADOS uses a capture probability defined as follows:

$$P_{capt,F}(m, n) = \exp\left(-\frac{\max(0, E_{barr}(m, n)) + \max(0, -E_b(m + 1, n + 1))}{kT}\right) \quad (G.36)$$

Where:

- F is the front particle.

- E_{barr} is an optional energetic barrier.
- E_b is the binding energy of the back particle, calculated as follows:

$$E_b(m, n) = E_{\text{total}}(m, n) - E_{\text{total}}(m + 1, n + 1) \quad (\text{G.37})$$

- See symbols list.

The energies associated to this process are plotted in the figure G.15.

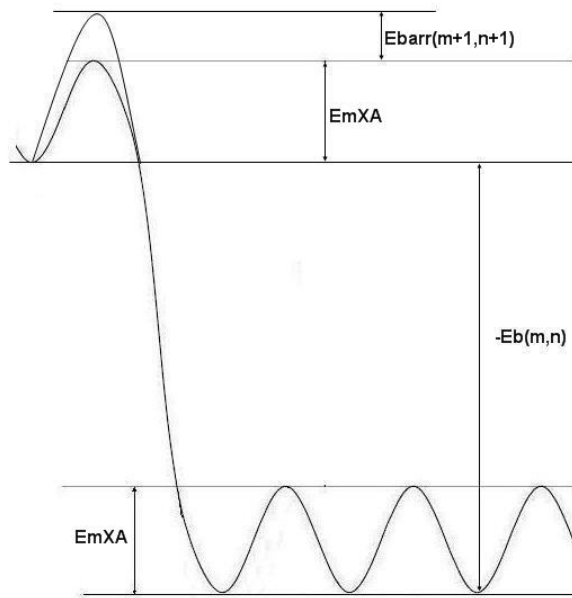


Figure G.15: Front particle capture (II). Associated energies

G.5.5 Shrinkage

Complexes can capture interstitials or vacancies that are recombined with complementary particles. For instance, let's call X' to the complementary particle to X , i. e., interstitials for vacancies and vice versa:



The capture probability is calculated as follows:

$$P_{\text{capt},CP}(m, n) = \exp\left(-\frac{\min(0, E_{\text{rec}}(m, n))}{kT}\right) \quad (\text{G.39})$$

Where:

- Erec is:

$$\begin{aligned} E_{rec}(m, n) &= E_{form_I} + E_{form_V} - (E_{total}(m-1, n) - E_{total}(m, n)) \\ &= E_{form_I} + E_{form_V} - E_{bB}(m, n) \end{aligned} \quad (G.40)$$

- $E_{bB}(m, n)$ is the binding energy for the back particle.
- $E_{bB}(m, n)$ is the binding energy for the back particle.
- E_{form_I} is the formation energy of interstitial.
- E_{form_V} is the formation energy of vacancy.
- See symbols list.

The energies associated to this process are plotted in the figure G.16.

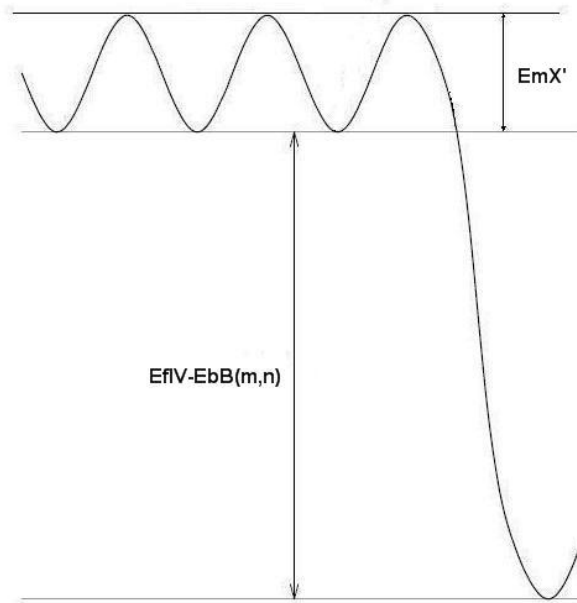


Figure G.16: Shrinkage. Associated energies

G.5.6 Complementary emission

Some impurities can diffuse by means of both interstitials and vacancies, for example, arsenic. In this case, complexes can emit not only interstitials and vacancies but also point defects, with complementary particles, i.e., a $As_n V_m$ complex can emit As_i .



The emission frequency is given as follows (the same for AV):

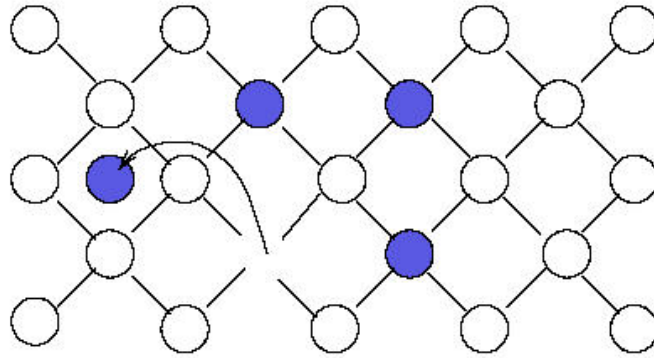


Figure G.17: Complementary emission

$$\nu_{em,CP}(n, m) = \frac{6}{\lambda^2} \cdot \min(m, n) \cdot \text{DOF_ComplexProp} \cdot \exp\left(-\frac{\text{Em}(X'A) + \max(0, \text{Ebarr}(m+1, n-1)) + \max(0, \text{Eb}(m, n))}{kT}\right) \quad (\text{G.42})$$

Where:

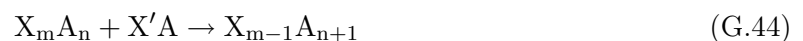
- λ is the jump distance.
- DOF_ComplexProp is a prefactor in diffusivity units.
- Em is the migration energy.
- Ebarr is an optional energetic barrier.
- Eb is the binding energy of the front particle, calculated as follows:

$$E_b(m, n) = E_{total}(m+1, n-1) - E_{total}(m, n) \quad (\text{G.43})$$

- See symbols list.

G.5.7 Complementary recombination

Some impurities can diffuse by means of both interstitials and vacancies, for example, arsenic. In this case, complexes can recombine not only interstitials and vacancies but also point defects:



The capture probability is calculated as follows:

$$P_{capt}(X'A) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{E_{capt}(X'A)}{kT}\right), & E_{capt}(X'A) > 0 \\ 1, & E_{capt}(X'A) \leq 0 \end{cases} \quad (\text{G.45})$$

Where:

- E_{capt} is the capture energy.
- See symbols list.

And the recombination energy is calculated with the total energies:

$$E_{recomb}(X'A) = \begin{cases} E_{total}(X_{m-1}A_{n+1}) - E_{total}(X_mA_n) - E_{form_V} - E_{form_I} - E_{total}(X'A), & m > 0 \\ E_{total}(X_mA_{n+1}) - E_{total}(X_mA_n) - E_{total}(X'A) + E_{m_I} - E_{m_X'A}, & m = 0, n > 1 \\ E_{X'A \rightarrow A}, & m = 0, n = 1 \end{cases} \quad (\text{G.46})$$

Where:

- E_{form} is the formation energy.
- E_m is the migration energy.
- $E_{X'A \rightarrow A}$ is an internal, fixed parameter.

G.6 Dislocation loops implementation

Faulted dislocation loops are implemented in DADOS as round-shaped structures of immobile interstitials, oriented in one of the four 111 planes. The orientation is randomly taken (from these four) when the dislocation loop is created. The density of atoms in the dislocation loop is given by this expression:

$$\rho = \frac{8}{a^2\sqrt{3}} = 15.66 \text{ nm}^{-2} \quad (\text{G.47})$$

By simplicity, DADOS implements the dislocation loop using a square in-plane lattice with planar density ρ .

In consequence, the distance between consecutive atoms is:

$$d = \frac{1}{\sqrt{\rho}} = 0.2527 \text{ nm} \quad (\text{G.48})$$

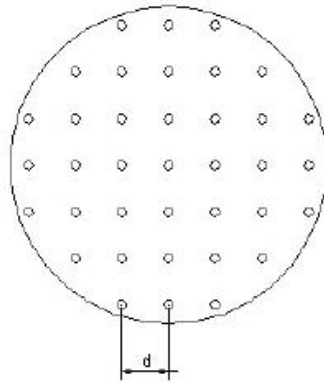


Figure G.18: Dislocation loop structure implementation

And the radius can be calculated by:

$$r = \sqrt{\frac{N}{\pi\rho}} \quad (\text{G.49})$$

G.6.1 Emission

Dislocation loops emit interstitials from their edge end and they release them as a point defect from a randomly chosen orientation of its surface. The emission frequency is given by the expression:

$$\nu_{em}(n) = \frac{6}{\lambda^2} \cdot n\text{DODLoopProp} \cdot \exp\left(-\frac{\text{Eb}(n) + \text{Em}}{kT}\right) \quad (\text{G.50})$$

Where:

- λ is the jump distance.
- DODLoopProp is proportional to the prefactor.
- n is the dislocation loop size.
- Eb is the binding energy.
- Em is the migration energy of the released point defect.
- See symbol list.

G.6.2 Growth

When a mobile neutral interstitial is near enough to the dislocation loop (closer than the capture distance), it is captured by it and inserted into the edge.

G.6.3 Formation energy

Formation energy for faulted dislocation loops as a function of the radius is:

$$E_{FDL} = \pi r^2 \gamma + \frac{\mu r}{4} \left(\frac{2a^2}{3(1-\nu)} \right) \ln \left(\frac{2r}{r_0} \right) \quad (\text{G.51})$$

Where:

- r is the radius of the defect.
- γ is the stacking fault energy per unit area.
- μ is the shear modulus.
- ν is the Poisson's ratio.
- r_0 is the dislocation core radius, where b is the modulus of the Burgers vector.
- See symbol list.

G.6.4 Shrinkage

As dislocation loops are relevant near equilibrium conditions (low supersaturation), the following process is not implemented:



G.6.5 Complementary emission

Vacancy emission from dislocation loop (generation of a vacancy and a bound interstitial) is not currently implemented because it is not likely to occur.

G.7 I311 implementation

I311 are implemented in DADOS as planar defects in 311 orientations, formed by interstitials arranged in parallel rows along $\langle 0\bar{1}1 \rangle$ directions. When a I311 is formed, its orientation is randomly chosen from the 12 equivalent 311 orientations. The distance between rows is:

$$dW = \frac{\sqrt{22}}{4} a = 0.637 \text{ nm} \quad (\text{G.53})$$

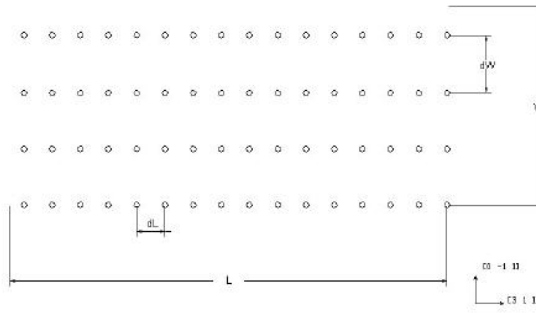


Figure G.19: I311 structure implementation

I311 are supposed to have an areal density of $\rho = 5$ interstitials/nm².

The distance between consecutive interstitials in the I311 is theoretically given theoretically by:

$$\frac{a}{2\sqrt{2}} = 0.192 \text{ nm} \quad (\text{G.54})$$

But, as it is experimentally known, only a 61% of the rows are occupied. DADOS uses a higher value of dL in order to maintain the correct areal density keeping all the positions occupied. Thus, the distance between consecutive interstitials (in a row) is taken to be:

$$dL = \frac{1}{0.61} \frac{a}{2\sqrt{2}} = 0.314 \text{ nm} \quad (\text{G.55})$$

The total number of interstitials in the structure is $n = n_L \cdot n_W$, where n_L is the number of interstitials per row and n_W is the number of rows.

$$\begin{aligned} \text{I311 length} \quad L &= n_L \cdot dL \\ \text{I311 width} \quad W &= n_W \cdot dW \end{aligned}$$

The relation between width and length is assumed to be $W = \sqrt{0.5 \text{ nm} \cdot L}$. Taking into account above expressions, the number of rows of a given number of interstitials n will be:

$$n_W = \left(\frac{0.5 \text{ nm} \cdot dL}{dW^2} \right)^{1/3} \cdot n^{1/3} \quad (\text{G.56})$$

What DADOS does is to establish a threshold in the middle between two consecutive values for n_W . However, the values around this threshold are complicated to handle because small changes can yield a lot of changes in n_W . That is why DADOS implements a hysteresis cycle, as shown in the figure G.20.

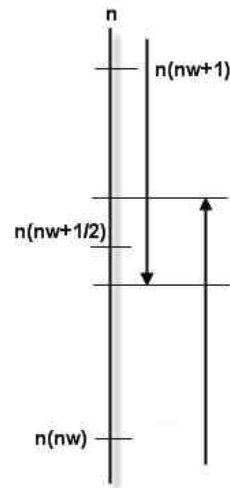


Figure G.20: I311 hysteresis

G.7.1 Emission

I311s emit interstitials by taking one from the end of the row and releasing as a point defect it at any point randomly chosen in the surface. The emission rate is the same to the one described for clusters, and with the same binding energy:

$$\nu_{em}(n) = \frac{6}{\lambda^2} \cdot nDODClusterProp \cdot \exp\left(-\frac{E_b + E_m}{kT}\right) \quad (G.57)$$

Where:

- λ is the jump distance.
- $DODClusterProp$ is proportional to the prefactor.
- n is the dislocation loop size.
- E_b is the binding energy.
- E_m is the migration energy of the released point defect.
- See symbol list.

G.7.2 Growth

When a mobile interstitial is near enough to the I311 (closer than the capture distance), it is captured by it and is inserted into one of the ends of the defect (the closest one to the particle position). The number of interstitials captures depends on the width: when the number of rows is reduced, then the structure gets a bigger length, and therefore, more captures will take place.

G.7.3 Shrinkage

When a mobile vacancy is near enough the I311 (closer than the capture distance), it is captured by it and it is recombined with an interstitial. When only one interstitial is remaining, the I311 is transformed into a point defect.

G.8 Interface implementation

G.8.1 Interface geometry

The figure shows a DADOS interface implementation example. As the program makes a box division, the interface will be simulated as the interface among boxes of different materials. See figure G.21.

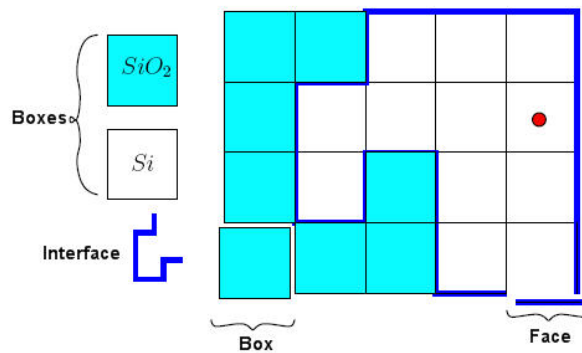


Figure G.21: Interface implementation

G.8.2 Native defect recombination length

The probability of recombination of single neutral native defects on the interface is:

$$p = \frac{\lambda}{L} \quad (\text{G.58})$$

Where:

- λ is the capture distance.
- L is the recombination length, `RecLnm_?`.

As probabilities must be less or equal than 1:

- If $\text{RecLnm}_? < \lambda$, DADOS makes $\text{RecLnm}_? = \lambda$ and the interface will become a perfect sink for the selected particle.
- If $\text{RecLnm}_? = -1$, DADOS automatically makes that interface neither emit or capture particles.

DADOS captures single neutral native defects with the probability explained above.

G.8.3 Native defect generation at the interface

Interface emission is much more frequent than emission in the bulk. Actually, DADOS doesn't implement emission in the bulk, as its frequency is extremely low. Interface emission is only allowed for single neutral native defects. Frequency of surface emission per unit area is implemented following the expression below:

$$\nu_{em} = \frac{2}{a^2} \cdot p \cdot \frac{6}{\lambda^2} \cdot \text{C0relEq}_? \cdot \text{Dm}_? \cdot \exp\left(-\frac{\text{Eform}_? + \text{Em}_?}{kT}\right) \quad (\text{G.59})$$

Where:

- “?” stands for interstitials or vacancies.
- p is the probability of recombination of single neutral native defects on the surface.
- λ is the jump distance.
- $\text{C0relEq}_?$ is the relative single neutral native defects concentration under equilibrium conditions.
- $\text{Dm}_?$ is the prefactor of diffusivity.
- $\text{Eform}_?$ is the formation energy.
- $\text{Em}_?$ is the migration energy.
- See symbols list.

For dopants, please see trapping mechanism.

G.8.4 Segregation

Dopants have preferences for being emitted to one side from the interface. DADOS uses a coefficient to indicate the concentration of a dopant in the non-silicon side of the interface relative to the one in the silicon side. For calculating that, DADOS uses an Arrhenius plot:

$$\text{Segregation} = \frac{C_{non-Si}}{C_{Si}} = \text{Segreg_pref}_? \cdot \exp\left(-\frac{\text{Segreg_eV}_?}{kT}\right) \quad (\text{G.60})$$

Where:

- `Segreg_pref_?` is the prefactor of segregation.
- `Segreg_eV_?` is the segregation energy.
- See symbol list.

G.8.5 Trapping and detrapping

Interfaces in DADOS trap neutral mobile dopants. The flux of these phenomena has been implemented following the Oh-Ward model [39]. Net flux can be calculated as the difference between trapping rate and detrapping rate: $F = T - D$.

Trapping rate is defined as the attempted frequency for the process multiplied by the capture probability; this yields (Oh-Ward):

$$T = hC_s \left(1 - \sum_{\substack{\text{all} \\ \text{species}}} \frac{\sigma_F}{\sigma_{max}} + \frac{e}{a} \frac{\sigma_F}{\sigma_{max}} \right) \quad (\text{G.61})$$

And **detrapping rate** can be calculated following the expression below:

$$D = h \frac{e}{a} \frac{\sigma_F}{\sigma_{max}} C_{max} \quad (\text{G.62})$$

Where:

- “h” is a coefficient obtained with parameters `Surf_h0_?` and `Surf_Eh_?`:

$$h = \text{Surf_h0_?} \cdot \exp \left(-\frac{\text{Surf_Eh_?}}{kT} \right) \quad (\text{G.63})$$

- “Cs” is the volume concentration of dopants at the interface on the material side.
- σ_F is the current trapped dopants at the interface.
- σ_{max} is the maximum concentration of trapped particles allowed in the interface, `SurfMaxTrap_?`.
- $\frac{e}{a}$ is the relation between emission and absorption probabilities for the interface. It can be calculated using `Surf_e_a0_?` and `Surf_Ee_a_?`:

$$\frac{e}{a} = \text{Surf_e_a0_?} \cdot \exp \left(-\frac{\text{Surf_Ee_a_?}}{kT} \right) \quad (\text{G.64})$$

- C_{max} is the maximum solid solubility of dopant in the material. See solubility for further information.
- Addition in trapping rate is calculated for all species present at the simulation.

G.8.6 Dopant diffusion at interfaces

Boron, arsenic and phosphorous are implemented in DADOS to diffuse through interfaces and go into other materials. As the properties here are quite unknown, DADOS only implements the diffusion for oxides and nitrides (neither extended defects formation nor interactions). DADOS doesn't implement single neutral native defects for other materials different from crystalline silicon.

G.9 Point defect implementation

Point defects can be:

- Native defects, such as interstitials, vacancies, neutral (I, V) or charged (IP, IM, VM, VMM, VP, VPP).
- Substitutional dopants pairs, such as Bi (boron + interstitial), AsV (arsenic + vacancy), etc.

G.9.1 Break-up

Break-up is a mechanism for splitting a point defect: $A_i \rightarrow A + I$ or $AV \rightarrow A + V$. The break-up frequency is calculated by DADOS with an Arrhenius plot:

$$\nu = \frac{6}{\lambda^2} \cdot D_{0,bk} \cdot \exp\left(-\frac{E_{b_?} + E_{m_?}}{kT}\right) \quad (\text{G.65})$$

Where:

- $D_{0,bk}$ is the prefactor of break-up in diffusivity units for point defect A_i .
- λ is the jump distance.
- $E_{b_?}$ is the binding energy for for point defect A_i .
- $E_{m_?}$ is the migration energy for I or V.
- See symbols list.

G.9.2 Captures

A capture can occur when a particle or defect is sufficiently near to another particle or defect and the capture is allowed. DADOS uses a capture distance called λ . If the particle arrives in a

very populated area, where more than one interaction is possible, DADOS randomly selects one. A capture is always associated to an interaction.

For extended defects, such as amorphous pockets, I311, dislocation loops or voids, the captures depend on the surface, because it is there where the interaction occurs. Therefore, the larger the surface is, the capture will happen more frequently.

G.9.3 Jumps

Mobile particles in DADOS jump at a rate that is determined by both energy and temperature. The implemented jumping directions are six: $+x$, $-x$, $+y$, $-y$, $+z$, $-z$.

Jump distance is called λ . We take it also to be equal to the capture distance. Its value is 0.384 nm, corresponding to the second neighbors distance in the silicon lattice. It is involved into the relation between the migration rate and the diffusivity:

$$D = \frac{\lambda^2}{6} \nu \quad (\text{G.66})$$

Jump frequency is calculated by using $\text{Em}_?$ and $\text{Dm}_?$:

$$\nu_{bk} = \frac{6}{\lambda^2} \cdot \text{Dm}_? \cdot \exp\left(-\frac{\text{Em}_?}{kT}\right) \quad (\text{G.67})$$

Where:

- $\text{Dm}_?$ is the prefactor of diffusivity for particle “?”.
- λ is the jump distance.
- $\text{Em}_?$ is the migration energy for particle “?”.
- See symbols list.

G.9.4 Pile-up

When a mobile dopant meets an amorphous pocket or a cluster (I311 or void), the interstitial or vacancy is included into the extended defect whereas the dopant keeps very near to the defect but not included in it. It is, then, simulated as a point defect.

G.10 Simulation box

DADOS divides the simulation box into smaller boxes. In each direction, x , y or z , it takes a number of divisions that is a power of two in order to assign an optimum number of bits. The

- `MINvoidsSIZE` is the minimum size of a vacancies cluster to be converted into a void.
- n is the cluster size.
- `Eb` is the binding energy.
- `Em` is the migration energy of the released point defect.
- See symbol list.

G.11.2 Growth

When a mobile vacancy is near enough the void (closer than the capture distance), it is captured by it and is inserted into the edge of the structure.

G.11.3 Shrinkage

When a mobile interstitial is near enough the void, it is captured by it and it is recombined with a vacancy. When only one particle is remaining, the void is transformed into a point defect.

G.12 Extended defect transformations

G.12.1 Amorphous pockets to I311

DADOS implements a model which assumes that when the number of interstitials in an amorphous pocket is higher than a threshold, then the structure is automatically transformed into a I311. The threshold in number of interstitials is given by:

$$N_{th} = \text{size0_Clusterto311} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\text{Clusterto311}}}{kT}\right) \quad (\text{G.69})$$

Where:

- `size0_Clusterto311` is the prefactor.
- `EClusterto311` is the activation energy with changed sign.
- See symbol list.

However, there is a minimum size to create a I311, specified by parameter `MIN311SIZE`. Therefore, if the threshold is smaller than it, DADOS will discard it and use `MIN311SIZE`. See figure G.23.

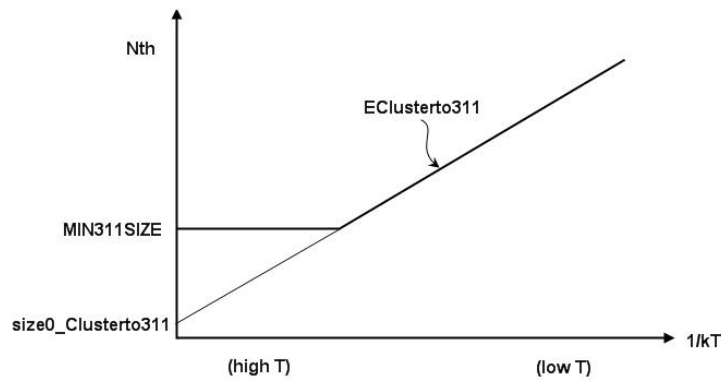


Figure G.23: Amorphous pockets to I311 transformation

G.12.2 Amorphous pockets to voids

DADOS implements a model which assumes that when the number of vacancies in an amorphous pocket is higher than a threshold, then the structure is automatically transformed into a void. The threshold in number of vacancies is given by:

$$N_{th} = \text{size0_ClustertoVoids} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\text{ClustertoVoids}}}{kT}\right) \quad (\text{G.70})$$

- `size0_ClustertoVoids` is the prefactor.
- `EClustertoVoids` is the activation energy with changed sign.
- See symbol list.

However, there is a minimum size to create a Void, specified by parameter `MINVoidSIZE`. Therefore, if the threshold is smaller than it, DADOS will discard it and use `MINVoidSIZE`. See figure G.24.

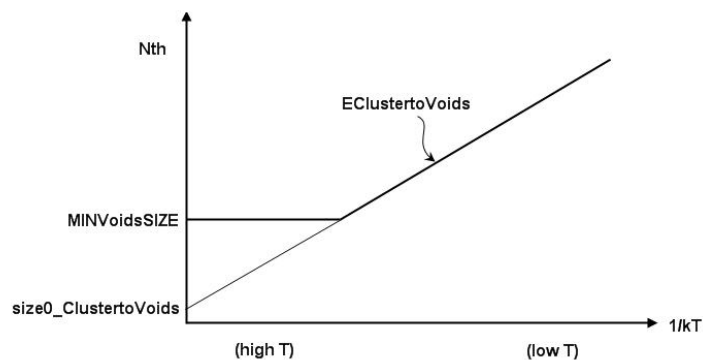


Figure G.24: Amorphous pockets to void transformation

G.12.3 I311 to dislocation loops

Two models (transition size and transition rate) are implemented in DADOS to simulate the creation of dislocation loops from I311. It is highly recommended to have only one of them active:

- To deactivate transition size model, please set `size0_311toDLoop` to negative.
- To activate this model, please set `R0_311ToDL` to zero.

Transition size model

This model assumes that when the number of particles is higher than a threshold, then the structure is automatically transformed into a dislocation loop (see figure G.25).

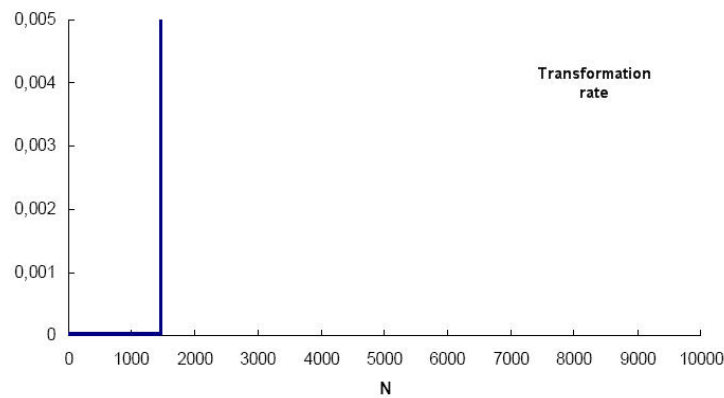


Figure G.25: I311 to dislocation loops to void transformation. Transition size model

The threshold in number of interstitials is given by:

$$N_{th} = \text{size0_311toDLoop} \cdot \exp\left(-\frac{E_{311toDLoop}}{kT}\right) \quad (\text{G.71})$$

- `size0_311toDLoop` is the prefactor.
- `E311toDLoop` is the activation energy with changed sign.
- See symbol list.

Transition size model

This model says that the transformation rate follows an Arrhenius plot from a value, as shown in the figure G.26.

The barrier energy to create dislocation loops is dependent on the number of interstitials as follows:

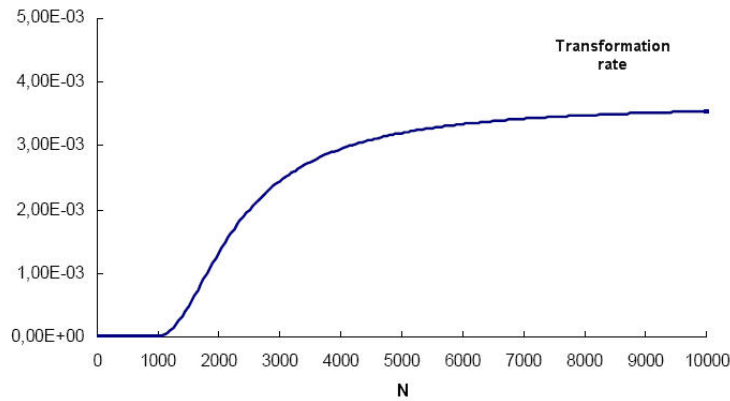


Figure G.26: I311 to dislocation loops to void transformation. Transition rate model

$$E_{barr} = Ebar0_311ToDL + \frac{Ebar1_311ToDL}{\left(\frac{N}{N_0} - 1\right)^{expo_311ToDL}} \quad (G.72)$$

Where:

- $Ebar0_311ToDL$ is a constant energy. It is the limit barrier energy for high structure sizes.
- $Ebar1_311ToDL$ is a prefactor used to define the growth level in the rate.
- N is the number of interstitials in the structure.
- N_0 is a fixed value. It is the number of interstitials for which the formation energy for I311 and dislocation loops is the same.
- $expo_311ToDL$ is an exponent used to define the growth level in the rate.

The transformation rate is then given by:

$$R = R0_311toDLoop \cdot \exp\left(-\frac{E_{barr}}{kT}\right) \quad (G.73)$$

Where:

- $R0_311toDLoop$ is the prefactor.
- E_{barr} is the barrier energy calculated before.
- See symbol list.