

14  
2 ejm



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

## ESTUDIO DE LA IRRADIACION DEL SiO<sub>2</sub> CON Si Y Au Y SUS EFECTOS FOTOLUMINISCENTES Y DE ABSORCION OPTICA

T E S I S  
Que para obtener el titulo de:  
F I S I C O  
p r e s e n t a

RAUL ARTURO ESPEJEL MORALES



FACULTAD DE CIENCIAS  
UNAM

DIRECTOR DE TESIS: DRA. ALICIA OLIVER GUTIERREZ



1998  
FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

267303



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule  
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: "ESTUDIO DE LA IRRADIACION DEL Si O<sub>2</sub> CON Si Y Au Y SUS EFECTOS FOTOLUMINISCENTES Y DE ABSORCION OPTICA"

realizado por RAUL ARTURO ESPEJEL MORALES  
con número de cuenta 8922550-3 , pasante de la carrera de FISICA  
Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis  
Propietario

DRA. ALICIA OLIVER GUTIERREZ

Propietario

DR. ALIPIO GUSTAVO CALLES MARTINEZ

Propietario

DR. DOROTEO MENDOZA LOPEZ

Suplente

DRA. GUILLERMINA BURRILLO AMEZCUA

Suplente

DR. JOSE MANUEL HERNANDEZ ALCANTARA

P. A.

Consejo Departamental de

DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA



FACULTAD DE CIENCIAS  
DEPARTAMENTO DE FISICA

**A mi más firme y constante apoyo: mis Padres.'**

**A la Dra. Alicia Oliver por mostrarme el camino para salir adelante.**

**A Noy, con quien espero compartir mi vida y los frutos de mi trabajo.**

**A la memoria de mi gran amigo, el Dr. Longinos González Ramírez, con quien conté en todo momento.**

**A mis amigos Francisco Rojo, Juan Manuel Salas, Héctor Mariño, Guillermo López Portillo y Gabriela Murguía, de quienes siempre recibí la ayuda y el aliento para seguir adelante.**

## **AGRADECIMIENTOS**

Quisiera agradecer de manera especial a las siguientes personas, ya que su apoyo fue indispensable para el desarrollo del presente trabajo.

Al Sr. Karim López por su excelente labor y dedicación al mantener y operar el acelerador Peletrón del Instituto de Física.

Al Dr. José Manuel Hernández y al Dr. Eduardo Muñoz por sus enseñanzas y su paciencia.

Al Dr. Enrique Cabrera por su aliento y su apoyo incondicional.

Asimismo, este trabajo contó con el apoyo de los proyectos CONACYT F036-E9109 y G0010-E.

## INDICE

<b>INTRODUCCION</b>	2
<b>CAPITULO I</b>	
<i>Mecanismos de interacción de radiación con materia</i>	
Introducción	4
1.1 Sección Eficaz	4
1.2 Cálculo de Potenciales	13
1.3 Ángulo de Dispersión	18
1.4 Potencial de Esferas Duras	21
1.5 Potencial Universal	23
<b>CAPITULO II</b>	
<i>Mecanismos de Pérdida de Energía</i>	
Poder de Frenamiento	25
2.1 Frenamiento Electrónico	27
2.2 Frenamiento Nuclear	33
<b>CAPITULO III</b>	
<i>Implantación de Iones</i>	
3.1 Profundidad de la Implantación	35
3.2 Distribución de la Implantación	37
3.3 Daño por Radiación	40
<b>CAPITULO IV</b>	
El Silicio Poroso y Sus Propiedades Ópticas	47
<b>CAPITULO V</b>	
<i>Desarrollo Experimental</i>	
Introducción	52
5.1 Sistema de Implantación de Iones.	54
Acelerador Pelletrón y Equipo Asociado	
5.2 Absorción Óptica	56
5.3 Fotoluminiscencia	61
5.4 Método Experimental	63
<b>CAPITULO VI</b>	
6.1 Resultados	65
6.2 Discusión	70
<b>APÉNDICE</b>	72

## INTRODUCCIÓN

Desde hace más de seis décadas, la modificación de materiales por medio de haces iónicos ha sido estudiada y aplicada en diferentes campos. Uno de ellos es la inserción de impurezas de germanio en silicio, lo cual dio lugar al descubrimiento del transistor en 1948. Desde entonces, la importancia del silicio dentro del desarrollo de la microelectrónica ha sido notable. Sin embargo, a pesar de que se han desarrollado detectores ópticos sumamente eficientes teniendo como base este elemento, la obtención de emisores luminosos eficientes a partir de silicio no había sido factible hasta el descubrimiento del silicio poroso en 1984, no obstante, dichas propiedades comenzaron a cobrar interés en 1990 con un estudio realizado por Leigh Canham, quien demuestra que la emisión del silicio poroso a temperatura ambiente no solo está en la región visible del espectro electromagnético, sino que además puede sintonizarse la longitud de onda.

La obtención de este material se logra mediante el ataque electroquímico de obleas de silicio, creando una estructura formada por partículas nanométricas de Si aisladas responsables de la fotoluminiscencia, cuyo mecanismo no está totalmente estudiado actualmente. Dadas las características del método de preparación del silicio poroso se presentan dificultades técnicas, como son su fragilidad mecánica y la difícil reproducibilidad de sus propiedades ópticas. Es en este punto donde la interacción de radiación con materia parece estar abriendo un campo de aplicación más al hacer posible la recuperación de las propiedades del silicio poroso al irradiar  $\text{SiO}_2$  con iones de Si formando nanopartículas de este elemento dentro del compuesto antes mencionado. Así pues, puede obtenerse un material fotoluminiscente tan manejable como el cuarzo, cuya emisión puede controlarse mediante la dosis de irradiación, la energía, y la duración y temperatura de un tratamiento térmico posterior.

Es así que la creación de nanoestructuras por implantación de iones ha cobrado en los últimos cinco años gran importancia. El problema que presenta este método es que en muchos casos no es sencillo identificar la fotoluminiscencia proveniente de los daños por radiación en el  $\text{SiO}_2$  de la proveniente de las nanopartículas de hecho en la literatura se han reportado trabajos en los cuales no se hace una distinción de manera cuidadosa. En esta Tesis se ha tratado de aminorar en lo posible los defectos formados por daños por radiación producidos al implantar. Así pues, se expondrán con cierto detalle los mecanismos de implantación de iones en sólidos, así como la caracterización de dicha implantación. También, se describirá la realización de un experimento donde se implanta Si en  $\text{SiO}_2$  obteniendo un material fotoluminiscente caracterizado mediante la obtención de espectros de absorción óptica y de fotoluminiscencia, además de mostrar que la implantación subsecuente de iones de Au favorece la formación de nanopartículas de Si, con lo cual se obtiene una mayor eficiencia en la emisión.

## CAPITULO I

### MECANISMOS DE INTERACCIÓN DE RADIACIÓN CON MATERIA

#### INTRODUCCIÓN

La modificación de materiales por medio de haces iónicos, se relaciona directamente con la interacción de iones energéticos con el sólido a través de fuerzas que pueden describirse mediante el potencial de interacción interatómico entre el proyectil y los átomos del sólido. Estas interacciones son la base del desarrollo de expresiones que describen al alcance del ion y del daño en el sólido.

El ion al atravesar el sólido interactúa tanto con el núcleo como con los electrones de los átomos y esta interacción está determinada por potenciales Coulombianos apantallados. Normalmente se distinguen dos mecanismos para la pérdida de energía del ion incidente en la región de energía de decenas de MeV: el frenamiento nuclear, y el frenamiento electrónico. Para poder describir los fenómenos de la interacción de un haz de partículas con los átomos de un sólido es importante definir un parámetro que describa la probabilidad de dispersión entre el ion incidente y los átomos del blanco. A este parámetro se le llama sección eficaz.

#### 1.1 SECCIÓN EFICAZ

En las interacciones de iones con sólidos, se acostumbra describir el número de partículas dispersadas a través de diferentes ángulos  $\theta_c$  en términos de una cantidad llamada sección eficaz angular diferencial de dispersión.

En un experimento donde un haz incidente es dispersado por una hoja delgada, se tiene un detector de área  $\Delta a$  en una posición angular  $\theta_c$  y hasta  $\theta_c + d\theta_c$  como se muestra en la figura. Cada uno de los iones del haz incidente tienen distintos parámetros de impacto  $p$  y pueden ser dispersados en diferentes ángulos. Se define la cantidad diferencial  $dn/d\theta$  como el

número de iones dispersados registrados por el detector por unidad de tiempo.  $I_0$  se define como el flujo de partículas incidentes en la muestra por unidad de tiempo por unidad de área.

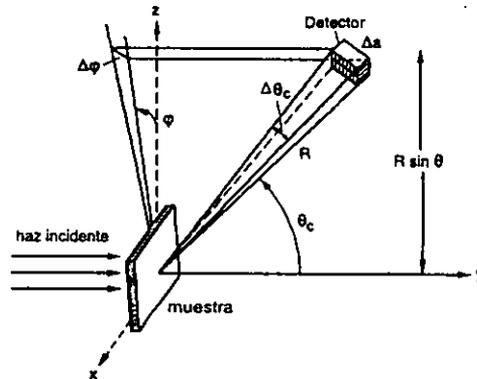


figura 1.1

El ángulo sólido del detector  $\Delta\Omega$  está relacionado con el área del detector y la distancia entre éste y la muestra.

Ahora, se puede definir la sección eficaz diferencial de dispersión como:

$$\frac{d\sigma(\theta_c)}{d\Omega} \equiv \frac{1}{I_0} \frac{dn}{d\Omega} \quad (1.1)$$

[1]

El término de la izquierda, es la sección eficaz diferencial de dispersión por unidad de ángulo sólido, y  $dn/d\Omega$  es el número de partículas dispersadas en el intervalo  $\theta_c$  y  $\theta_c+d\theta_c$  por unidad de ángulo sólido. Dado que las unidades de  $\Omega$  (estereoradián) son adimensionales, la sección eficaz tiene unidades de área.

La sección diferencial es entonces simplemente el área efectiva del blanco presentada por cada centro dispersor (núcleo) al haz incidente, esta idea puede verse con mayor claridad en la figura siguiente.

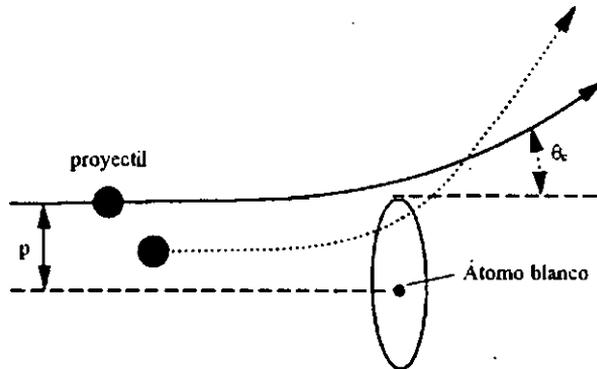


figura 1.2

En la figura 1.2 puede verse que las partículas incidentes con parámetro de impacto  $p$  que tocarían el perímetro del círculo de no existir interacción, son dispersadas en un ángulo  $\theta_c$ , el área de círculo es  $\pi p^2$ , y cualquier partícula cuya trayectoria inicial atraviese el círculo será dispersada en un ángulo mayor, de éste modo, el área definida por el perímetro es llamada sección eficaz total y esta dada por:

$$\sigma(\theta_c) = \pi p^2 \quad (1.2)$$

Para proyectiles con un parámetro de impacto menor, la sección eficaz será menor, pero dadas las fuerzas de interacción, el ángulo de dispersión será mayor, de esta manera  $p$  es proporcional a  $\sigma(\theta_c)$ , mientras que  $I_0$  y  $\sigma(\theta_c)$  son relacionados inversamente con  $\theta_c$ , luego entonces  $p$  será función de  $\theta_c$ .

Se puede ver más claramente el concepto de sección eficaz diferencial en la figura siguiente:

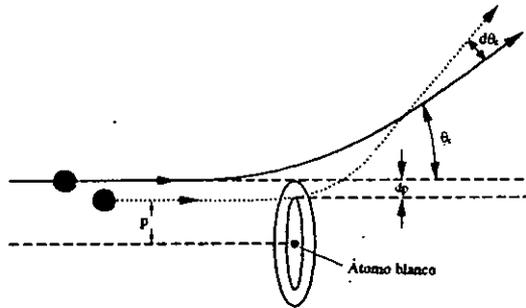


figura 1.3

Aquí, las partículas incidentes con parámetro de impacto entre  $p$  y  $p + dp$  serán dispersadas en un ángulo entre  $\theta_c$  y  $\theta_c + d\theta_c$ , definiendo entonces la sección eficaz diferencial como el área del anillo con radio menor  $p$  y ancho  $dp$ , entonces:

$$d\sigma(\theta_c) = 2\pi p dp \quad (1.3)$$

Se puede ver ahora la relación entre el parámetro de impacto y el ángulo de dispersión escribiendo la ecuación anterior como:

$$d\sigma(\theta_c) = 2\pi p(\theta_c) \left| \frac{dp(\theta_c)}{d\theta_c} \right| d\theta_c \quad (1.4)$$

en el esquema siguiente se muestra la sección anular como sección esférica que representa el ángulo sólido delimitada por los ángulos  $\theta_c$  y  $\theta_c + d\theta_c$ , cuya área está dada por:

$$(2\pi \text{sen } \theta_c)(R d\theta_c) = 2\pi R^2 \text{sen } \theta_c d\theta_c \quad (1.5)$$

pero la definición de ángulo sólido está regida por la esfera unitaria, entonces

$$d\Omega = 2\pi \text{sen } \theta_c d\theta_c \quad (1.6)$$

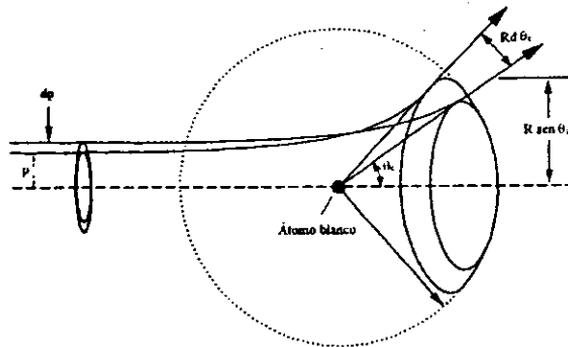


figura 1.4

se puede escribir entonces:

$$\frac{d\sigma(\theta_c)}{d\Omega} = \frac{p}{\text{sen } \theta_c} \left| \frac{dp}{d\theta_c} \right| \quad (1.7)$$

integrando obtenemos:

$$p^2 = 2 \int_{\theta_c}^{\pi} \frac{d\sigma(\theta_c)}{d\Omega} \text{sen } \theta_c d\theta_c \quad (1.8)$$

De manera similar al desarrollo de la sección eficaz diferencial angular, se puede obtener una expresión para la transferencia de energía durante el proceso de dispersión [1]. En la figura siguiente se muestra un esquema donde un flujo de partículas incidentes atraviesan un blanco delgado de espesor  $dx$  y área unitaria, conteniendo un total de  $N$  átomos por unidad de volumen. Cada núcleo de la muestra presenta al proyectil un área dispersora  $s$ , el blanco delgado del esquema contiene entonces un total de  $N dx$  núcleos por unidad de área, el producto  $s N dx$  representa la fracción total de la superficie del blanco que actúa como centro dispersor efectivo de las partículas incidentes.

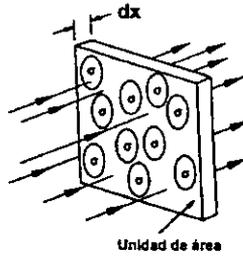


figura 1.5

Se puede definir entonces la probabilidad de que un proyectil con energía  $E$  sea dispersado por un núcleo del blanco al atravesar un espesor  $dx$  como

$$P(E) = N\sigma(E)dx \quad (1.9)$$

Entonces, para conocer la probabilidad de que un proyectil con energía  $E$  transfiera al blanco cierta cantidad de energía en el intervalo  $T$  y  $T + dT$ , se define una sección eficaz diferencial de transferencia de energía;

$$P(E, T)dT \equiv \frac{dP(E)}{dT} dT = N \frac{d\sigma(E)}{dT} dT dx \quad (1.10)$$

lo cual equivale a

$$P(E, T)dT = \frac{1}{\sigma(E)} \frac{d\sigma(E)}{dT} dT \quad (1.11)$$

esto es, la razón entre la sección eficaz diferencial y la sección eficaz total de transferencia de energía. De manera análoga; la probabilidad de que el ion sea deflectado en un ángulo entre  $\theta_c$  y  $\theta_c + d\theta_c$  esta dada por:

$$P(\theta_c)dT = \sigma(\theta_c) N dx \quad (1.12)$$

y la probabilidad de que un ion con energía  $E$  sea dispersado dentro de un ángulo sólido  $d\Omega$  en la región limitada por  $\theta_c$  y  $\theta_c + d\theta_c$  es:

$$P(E, \Omega)d\Omega = \frac{dP(E)}{d\Omega} d\Omega = N \frac{d\sigma(E)}{d\Omega} d\Omega dx \quad (1.13)$$

pero se había mostrado que

$$d\Omega = 2\pi \operatorname{sen} \theta_c d\theta_c \quad (1.14)$$

entonces:

$$P(E, \Omega)d\Omega = 2\pi N dx \frac{d\sigma(E)}{d\Omega} = 2\pi \operatorname{sen} \theta_c N dx \frac{d\sigma(E)}{d\Omega} d\theta_c \quad (1.15)$$

Ahora, dado que  $P(E, T)$  y  $P(E, \Omega)$  obedecen al mismo fenómeno, se puede escribir:

$$P(E, \Omega)d\Omega = P(E, T)dT \quad (1.16)$$

entonces

$$\frac{d\sigma(E)}{dT} dT = 2\pi \operatorname{sen} \theta_c d\theta_c \frac{d\sigma(\theta_c)}{d\Omega} \quad (1.17)$$

o bien

$$\frac{d\sigma(E)}{dT} = 2\pi \operatorname{sen} \theta_c \left| \frac{d\theta_c}{dT} \right| \frac{d\sigma(\theta_c)}{d\Omega} \quad (1.18)$$

Ahora, con el esquema siguiente (fig. 1.6), es posible obtener por la Ley de los Cosenos que:

$$v_2^2 = v_c^2 + [v_c^2 \cos(\pi - \phi_c)] \quad (1.19)$$

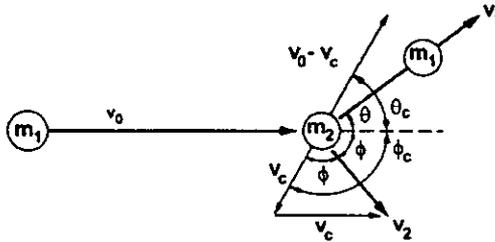


figura 1.6

donde  $v_c$  es la velocidad del centro de masa que se describirá con detalle en la sección 2.2. Mediante un desarrollo donde interviene el uso de algunas identidades trigonométricas y la ecuación 1.37, se llega a:

$$v_2 = 2v_1 \frac{\mu}{m_2} \cos \phi \quad (1.20)$$

donde  $\mu$  es la masa reducida definida en la ecuación 1.36. Por otro lado, es claro que la energía transferida al átomo blanco estará dada por:

$$T = \frac{1}{2} m_2 v_2^2 \quad (1.21)$$

entonces:

$$T = \frac{2}{m_2} \left( v_1 \mu \sin \frac{\theta_c}{2} \right)^2 = \frac{4E_c \mu}{m_1} \sin^2 \frac{\theta_c}{2} \quad (1.22)$$

donde  $E_c$ , coincide con la energía cinética inicial, descrita en la ecuación 1.38, y con la cual se llega a:

$$T = E \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \sin^2\left(\frac{\theta_c}{2}\right) \quad (1.23)$$

o bien

$$T = \frac{1}{2} T_m (1 - \cos \theta_c), \quad (1.24)$$

donde  $T_m$  es la máxima energía transferible que ocurre en el caso de una colisión frontal descrita en la sección 2.2. Derivando implícitamente la ecuación anterior se obtiene:

$$\frac{d\theta_c}{dT} = \frac{2}{T_m \sin \theta_c} \quad (1.25)$$

con este resultado y la ecuación 1.7 es posible escribir la ecuación 1.18 como:

$$\frac{d\sigma}{dT} = \frac{4\pi}{T_m} \frac{d\sigma(\theta_c)}{d\Omega} = \frac{4\pi p}{T_m \sin \theta_c} \left| \frac{dp}{d\theta_c} \right| \quad (1.26)$$

Es claro que la sección eficaz diferencial depende fuertemente de la geometría de la interacción, por lo tanto depende también de la forma del potencial.

## 1.2 CALCULO DE POTENCIALES

La forma cualitativa del potencial de interacción se muestra en la figura 1.7, la cual describe un potencial atractivo para radios grandes (lo cual se debe casi completamente a fuerzas coulombianas para sólidos iónicos, mientras que para sólidos covalentes es resultado de la interacción por intercambio de electrones), y fuertemente repulsivo cerca del origen, esto es debido a las fuerzas electrostáticas generadas por la carga positiva del núcleo apantallada por los electrones [3].

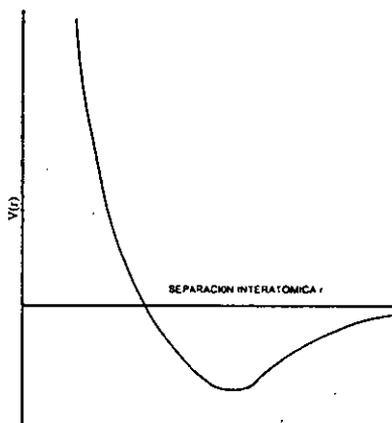


figura 1.7

Dado que la obtención de una expresión analítica válida para cualquier radio de interacción es muy compleja, se han propuesto aproximaciones para algunos intervalos, como la función de Born - Mayer [3]:

$$V(r) = A \exp\left(-\frac{r}{B}\right), \quad (1.27)$$

la cual describe al potencial de manera razonable para valores grandes de  $r$ ,  $A$  y  $B$  son constantes que se derivan del módulo elástico. Sin embargo, esta expresión del potencial tiene problemas para radios pequeños, para los cuales puede usarse la expresión de Bhor del potencial de Coulomb apantallado [4]:

$$V(r) = \left( Z_1 Z_2 \frac{e^2}{r} \right) \exp\left(-\frac{r}{a}\right), \quad (1.28)$$

donde  $Z_1$  y  $Z_2$  son los números atómicos de las partículas que interaccionan,  $a$  es llamada longitud de apantallamiento y esta dada por:

$$a = a_0 \left( Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (1.29)$$

sin embargo, muchas veces el valor de  $a$  se sustituye por valores obtenidos empíricamente.

Ahora, en rangos de  $r$  intermedios, estas aproximaciones no son confiables, en este caso, usando el modelo atómico de Thomas - Fermi y considerando que el potencial Coulombiano debido al núcleo es apantallado por los electrones podemos considerar la siguiente expresión:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi_{TF} \left( \frac{r}{a} \right), \quad (1.30)$$

donde  $\phi_{TF}$  es la función de apantallamiento de Thomas - Fermi, calculada numéricamente y tabulada por Gombas en 1956 [5]. Esta función, está definida como el cociente del potencial "real" entre el potencial Coulombiano, valuados ambos en algún radio  $r$ . De manera ideal, esta función tiende a cero para valores grandes de  $r$  y a la unidad cuando  $r$  se aproxima a cero.

Lindhard obtuvo una expresión aproximada para  $\phi_{TF}$  en 1965 [6]:

$$\phi_{TF}\left(\frac{r}{a}\right) \approx \frac{r}{a \left( \left(\frac{r}{a}\right)^2 + c^2 \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (1.31)$$

con  $C$  un parámetro de ajuste, un valor razonable para esta constante puede ser  $3^h$ . De modo que con estas dos últimas expresiones, es posible obtener una expresión razonable para el potencial válida para radios intermedios.

También, se han dado algunas expresiones empíricas para este intervalo de validez, como la de Brinkman [7]:

$$V(r) = \frac{AZ_1Z_2e^2 \exp(-Br)}{1 - \exp(-Ar)}, \quad (1.32)$$

donde  $A$  y  $B$  son parámetros de ajuste. Puede verse que para radios suficientemente pequeños, este potencial tiende al de Coulomb, mientras que para radios grandes, la expresión toma la forma de la ecuación dada por Born - Mayer.

Ahora bien, para calcular la pérdida de energía debida a las colisiones nucleares, esto es, el frenamiento nuclear, es conveniente ver la cinemática del problema desde un sistema de referencia cuyo origen coincide en todo momento con el centro de masa.

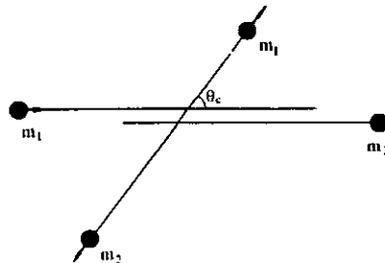


figura 1.8

También, es conveniente introducir el parámetro  $u = r'$ , el cual toma valores desde cero hasta  $u_{max}$ , al cual corresponde el radio de máxima aproximación. Para obtener la energía total de la colisión, se considera la energía inicial del proyectil, dado que el átomo blanco permanece en reposo respecto al sistema del laboratorio, entonces:

$$E = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 \quad (1.33)$$

Es claro que el átomo blanco, en el nuevo sistema de referencias, no estará en reposo inicialmente, sino que se moverá con una velocidad igual a la del centro de masas en el sistema original, entonces, la energía será:

$$E_{CM} = \frac{1}{2} [m_1 (v_1 - v_c)^2 + m_2 v_c^2] \quad (1.34)$$

Una propiedad importante del sistema de centro de masas, es que la cantidad de movimiento total de un sistema de partículas, es igual al producto de la suma de las masas por la velocidad del centro de masa, y por la conservación del momento:

$$m_1 v_1 = (m_1 + m_2) v_c \quad (1.35)$$

Ahora, si se define la masa reducida  $\mu$  como:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (1.36)$$

se obtienen las velocidades de la siguiente manera:

$$v_c = \frac{m_1 v_1}{m_1 + m_2} = \frac{\mu}{m_2} v_1 \quad (1.37)$$

De modo que  $E_{CM}$  queda expresada como:

$$E_{CM} = \frac{1}{2} v_1^2 \mu^2 \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) = \frac{1}{2} v_1^2 \mu = E \frac{\mu}{m_1} \quad (1.38)$$

Con este resultado y tomando en cuenta la conservación del momento angular, el cual, cuando el ion está a la distancia de máxima aproximación, puede expresarse como [8]:

$$|\vec{J}| = m_1 r_{min} v_1 \quad (1.39)$$

En la figura 1.9, puede verse un esquema de la colisión, donde es claro que se puede aproximar  $r_{min}$  a  $p$ , con lo cual:

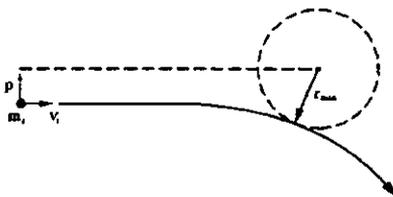


figura 1.9

$$J = m_1 p v_1 = p \sqrt{2Em_1} \quad (1.40)$$

Ahora, la energía total del sistema tomando en cuenta la presencia del potencial, es:

$$E_{cm} = V(u_{max}) + \frac{J^2 u_{max}^2}{2m_1}, \quad (1.41)$$

el último término de la suma es llamado energía centrífuga, puede verse como la energía cinética expresada en términos del momento angular [8]. Entonces, sustituyendo  $J$  se tiene:

$$V(u_{max}) = E_{cm} (1 - p^2 u_{max}^2) \quad (1.42)$$

De este modo, es claro que la distancia de máxima aproximación depende de la forma del potencial interatómico, así pues si se conoce  $V(r)$  se puede encontrar  $r_{min}$ . Por ejemplo, para un potencial coulombiano y una colisión frontal:

$$r_{min} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_{cm}} \quad (1.43)$$

En estas condiciones (con  $p = 0$ ),  $r_{min}$  toma el nombre de diámetro de la colisión.

### 1.3 ANGULO DE DISPERSIÓN

Para estudiar los ángulos de dispersión en una colisión elástica, es útil ver el problema en coordenadas polares, sin perder de vista que se está trabajando en el sistema de centro de masa. A continuación se muestra un esquema para mayor claridad:

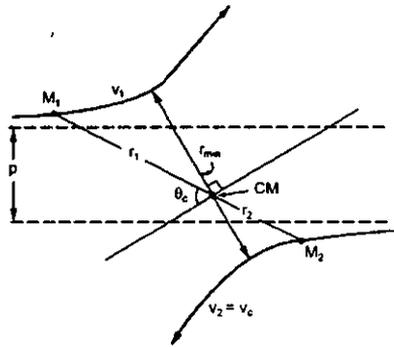


figura 1.10

Así pues, en coordenadas polares el módulo de la velocidad está dado por:

$$v_1^2 = \dot{r}^2 + r^2 + \dot{\theta}_c^2 \quad (1.44)$$

entonces, la energía queda expresada como:

$$E_{CM} = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}_c^2) + V(r) \quad (1.45)$$

y el momento angular:

$$J = (v_1 - v_c) r_1 m_1 + v_c r_2 m_2 = \mu p v_1 \quad (1.46)$$

con lo cual se tiene:

$$r^2 \dot{\theta}_c = v_1 p \quad (1.47)$$

De este modo, se puede obtener la derivada de  $\theta$  con respecto al tiempo y sustituirla en la expresión para la energía  $E_{CM}$  y tener una expresión para  $dr/dt$ :

$$\dot{r} = v_1 \left( 1 - \frac{V(r)}{E_c} - \left( \frac{p}{r} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.48)$$

Ahora,

$$\frac{d\theta_c}{dr} = \frac{d\theta_c}{dt} \cdot \frac{dt}{dr} = \frac{p}{r^2 \left[ 1 - \frac{V(r)}{E_c} - \left( \frac{p}{r} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (1.49)$$

Con este resultado e integrando desde  $r_{min}$  hasta infinito, se puede obtener el ángulo de dispersión referido al centro de masa  $\theta_c$  [8], el cual es indispensable en los desarrollos que siguen.

#### 1.4 POTENCIAL DE ESFERAS DURAS

Para algunos cálculos se puede considerar un potencial simple llamado de esferas duras, en el cual se consideran colisiones con parámetro de impacto tendiendo a cero y ángulos de dispersión cercanos a  $\pi$ . La expresión para este potencial es la siguiente [2]:

$$V(r) = \infty \text{ para } r < \Gamma r \quad (1.50)$$

$$V(r) = 0 \text{ para } r > \Gamma r$$

donde  $\Gamma r$  representa la suma de los radios del proyectil y el blanco.

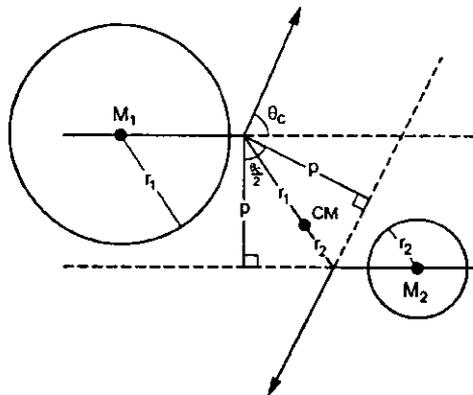


figura 1.11

En la figura puede verse una colisión de esferas duras en el sistema de centro de masas, donde es claro que la distancia de máxima aproximación será

$$r_{min} = r_1 + r_2 \quad (1.51)$$

y su relación con el parámetro de impacto:

$$p = r_{min} \cos\left(\frac{\theta c}{2}\right) \quad (1.52)$$

Ya que la energía potencial de interacción sólo se aplica cuando las esferas hacen contacto, esta será simplemente la energía cinética en el sistema del centro de masas:

$$V(r_{min}) = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_0 \quad (1.53)$$

Se puede obtener la sección eficaz diferenciando esta expresión y empleando la ecuación para la sección eficaz, se llega a:

$$d\sigma(\theta c) = \pi r_{min}^2 \sin\frac{\theta c}{2} \cos\frac{\theta c}{2} d\theta \quad (1.54)$$

y la sección eficaz diferencial de transferencia de energía es, como se mencionó anteriormente:

$$\sigma(E) \approx \pi r_{min}^2 \quad (1.55)$$

Entonces, con este resultado y la ecuación (1.26), se puede calcular la probabilidad de que una partícula con energía  $E$  transfiera una energía entre  $T$  y  $T+dT$  [1]

$$P(E, T)dT = \frac{1}{\sigma(E)} \frac{d\sigma(E)}{dT} dT \approx \frac{dT}{T_m} \quad (1.56)$$

## 1.5 POTENCIAL UNIVERSAL

Un desarrollo muy útil es el de Ziegler, Bierzack y Littmark, el cual propone un ajuste a un número representativo de funciones de apantallamiento interatómico conocidas (cada una válida para un par proyectil-blanco específico) para obtener una expresión que describa al potencial de manera general mediante la expresión que los relaciona mencionada anteriormente.

Cada función de apantallamiento fue ajustada por una serie de tres exponenciales, esto es:

$$\phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^3 a_i \exp\left(-b_i \frac{r}{a}\right) \quad (1.57)$$

con  $a_i$  y  $b_i$  como parámetros de ajuste, con la siguiente restricción:

$$\sum_{i=1}^3 a_i = 1 \quad (1.58)$$

de modo que para  $r=0$ ,  $\phi=1$ . Entonces, haciendo un ajuste sobre las funciones obtenidas, se llega a la función de apantallamiento universal [9]:

$$\phi_U = \sum_{i=1}^4 A_i \exp\left(-B_i \frac{r}{a}\right) \quad (1.59)$$

con

$$A_1 = 0.1818 \quad B_1 = 3.2000$$

$$A_2 = 0.5099 \quad B_2 = 0.9423$$

$$A_3 = 0.2802 \quad B_3 = 0.4028$$

$$A_4 = 0.0281 \quad B_4 = 0.2016$$

## Referencias

- [1] Nastas, Mayer and Hirvonen. Ion Solids Interactions. Cambridge Solid State Science Series. New York 1997. Cap. 4
- [2] Nastas, Mayer and Hirvonen. Ion Solids Interactions. Cambridge Solid State Science Series. New York 1997. Cap. 2
- [3] G. Dearnaley, Freeman, J.H. et al. Ion implantation North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1973. cap. 2
- [4] Bhor, N. 1948, kgl. Danske Vid Selsk, Matt. Fys, Medd, **18**, No. 8
- [5] Gombas, P. 1956, Handbuch der Physik **36**, 09 (springer, Berlin)
- [6] Lindhard, J., 1965, kgl. Danske Vid Selsk, Matt. Fys, Medd, **34**, No. 14
- [7] Brinkman, J.A., 1954, J. Appl Phys. **25**, 961
- [8] Nastas, Mayer and Hirvonen. Ion Solids Interactions. Cambridge Solid State Science Series. New York 1997. Cap. 3
- [9] Ziegler, J.F., Biersack, J.P., Littmark, V The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon, New York, 1985 cap. 2

## CAPITULO II

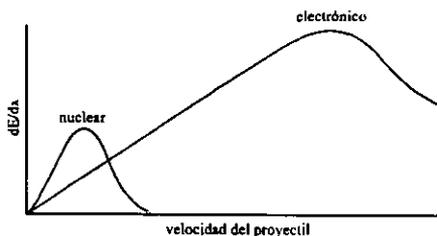
### MECANISMOS DE PÉRDIDA DE ENERGÍA.

#### PODER DE FRENAMIENTO

La cantidad de energía por unidad de longitud que pierde un ion al introducirse en un sólido, se llama poder de frenamiento, y se denota como  $-dE/dx$  [1], donde E es la energía del ion incidente y x la distancia recorrida a lo largo de su trayectoria. Existen dos procesos fundamentales que contribuyen a esta pérdida de energía por frenamiento: las interacciones elásticas coulombianas entre las cargas nucleares apantalladas del ion incidente y del blanco, y las interacciones inelásticas del ion con los electrones del blanco. Tal apantallamiento se debe a que el núcleo cargado positivamente está rodeado por una nube de electrones, entonces, al aproximarse el ion, éste experimenta una fuerza repulsiva que altera su trayectoria. De modo que podemos hablar de frenamiento electrónico y nuclear, así:

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \quad (2.1)$$

La contribución de la parte nuclear es dominante en la región de baja energía, mientras que a altas energías, la contribución es mayor por parte del frenamiento electrónico, como puede verse en la figura 2.1 [2]. En el caso de que la velocidad del ion es mayor que la velocidad orbital de sus electrones, se tiene una alta probabilidad de ser despojado de ellos y el núcleo cargado positivamente penetra en el material, este sufre colisiones Coulombianas con los electrones del blanco y pierde energía gradualmente, por tanto, es susceptible de capturar un electrón quedando así con carga  $(Z-1)e$ . Así, el ion incidente va perdiendo energía y eventualmente llega al reposo habiendo recuperado sus electrones, formando un átomo intersticial.



*figura 2.1*

Existen ciertas consideraciones que debemos enfatizar al plantear un modelo para las colisiones electrónicas, una de ellas es que al hacer consideraciones sobre la energía, en realidad se hacen sobre la velocidad, ya que la masa de la partícula no interviene en los cálculos. También debe considerarse, que la carga de la partícula incidente no es una función estricta de la velocidad, esto es, existe la probabilidad de que el ion incidente pierda el electrón que ganó (del blanco), de este modo, solo el promedio de la carga dependerá de la velocidad del proyectil. Asimismo, las colisiones electrónicas, no son el único mecanismo de pérdida de energía, también debe considerarse que existe un intercambio de electrones entre el proyectil y el blanco. Por lo anterior debe considerarse que la teoría aplicable al problema del poder de frenamiento, tiene un intervalo de validez y algunas restricciones.

Como se mencionó anteriormente, la pérdida de energía a altas velocidades es prácticamente debida en su totalidad a los procesos electrónicos. A bajas velocidades, el apantallamiento del núcleo del átomo incidente por los electrones capturados, es importante. Este efecto puede tratarse considerando un potencial central repulsivo.

El frenamiento debido a las colisiones nucleares, a diferencia del resultante de las interacciones electrónicas, depende de la energía cinética del proyectil más que de su velocidad, así pues la pérdida de energía por colisiones es comparable con su energía cinética. También debe considerarse que debido a que la transferencia de momento en estas colisiones es grande, el cambio en la trayectoria del proyectil es importante, y dependerá del cociente de las masas del proyectil y de los átomos del blanco.

## 2.1 FRENAMIENTO ELECTRÓNICO

Este fenómeno, como su nombre lo indica, se debe a la interacción del proyectil con los electrones del blanco, estas interacciones son inelásticas, y además la transferencia de energía en cada colisión es pequeña, por lo cual el frenado por este mecanismo se puede considerar como una función continua[3].

Se puede hablar de cuatro intervalos de velocidades del ion para los cuales se han postulado teorías que describen el frenamiento electrónico, como puede verse en la figura 2.2. En la región I, se consideran velocidades del proyectil mucho menores que la velocidad de los electrones del blanco, esto puede verse como  $v_1 \ll Z_2 v_B$ , con  $Z_2$  el número atómico del blanco y  $v_B$  la velocidad del electrón en la primera órbita del átomo de hidrógeno. Como es de esperarse, la región II comprende el intervalo de velocidades que son del orden de la de los electrones del blanco, así pues, en la región III se consideran las velocidades del proyectil mucho mayores que la de los electrones en el blanco, sin llegar a aquellas en las que se presentan efectos relativistas, ya que estos casos necesitan una corrección especial que se considera al estudiar la región IV [3].

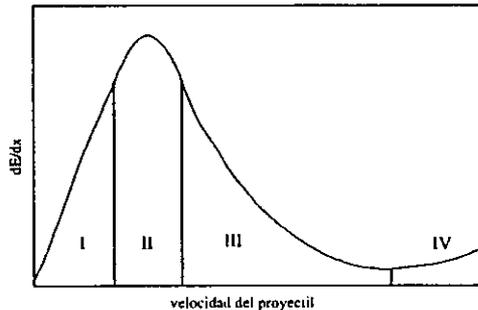


figura 2.2

En la región III, el comportamiento del frenamiento electrónico se puede describir con mayor facilidad, ya que en esta región, pueden considerarse a los electrones del material en reposo respecto al proyectil, también, debido a que su velocidad de desplazamiento es mayor a velocidad orbital de sus electrones, éste se presenta totalmente ionizado ya que ha perdido todos sus electrones. El primero en postular una expresión para el poder de frenamiento electrónico en esta región, fue Bohr en 1913 [4].

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4 N}{mv^2} B, \quad (2.2)$$

donde  $N$  es la densidad atómica del blanco,  $Z_1$  el número atómico del proyectil y  $B$  es un número adimensional llamado *número de frenado*, el cual está dado por:

$$B = Z_2 \ln\left(\frac{p_{max}}{p_{min}}\right) \quad (2.3)$$

Con  $Z_2$ , el número atómico del blanco,  $p_{max}$  y  $p_{min}$  se refieren a los límites del parámetro de impacto.

Bethe, en 1930 [5], hizo una corrección al número de frenado considerando interacciones del proyectil con un átomo formado por osciladores armónicos, para lo cual usa la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. Esta corrección es válida en la región donde la energía potencial es menor que la energía cinética del movimiento relativo ion-electrón, esto es, la onda incidente solo es ligeramente perturbada por la presencia del potencial de interacción y su expresión es la siguiente:

$$B = Z_2 \ln\left(\frac{2mv^2}{I}\right), \quad (2.4)$$

donde  $I$  es el promedio de la energía de excitación de los electrones del blanco. Para velocidades del ion cercanas a la región II, Walske, en 1952 y Bichsel en 1963 [7], dieron una corrección tomando en cuenta que la velocidad de los electrones en las capas atómicas internas que tienen una velocidad mayor a los de las capas externas, por tanto, los primeros contribuyen al frenado en menor medida. Estas correcciones al número de frenado quedan expresadas como  $C_K, C_L, \dots, C_i$ , entonces:

$$B = Z_2 \ln\left(\frac{2mv^2}{I}\right) - \sum_i C_i \quad (2.5)$$

La teoría de frenado electrónico expuesta por Lindhard en 1954 [8], trata el problema del cambio de momento de una partícula cargada moviéndose a través de un gas de electrones, de este modo obtuvo la expresión para el número de frenado:

$$B_L = \frac{i}{\pi\omega_0^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_{-kv_1}^{kv_1} \omega d\omega \left( \frac{1}{\epsilon_l(k, \omega)} - 1 \right) \quad (2.6)$$

Donde  $\epsilon_l(k, \omega)$  es la constante dieléctrica longitudinal, y  $\omega_0$  es la frecuencia de plasma del gas de electrones. Este cálculo fue usado en el desarrollo del programa TRIM por Ziegler, Biersack y Littmark [9] para calcular el frenado de electrones en sólidos, usando la aproximación de densidad local, en la cual se considera que la densidad electrónica del blanco depende de la posición, de este modo, se calcula la sección de frenado con:

$$S_e = \int I(v_1, \rho) Z_1^2 \rho dV, \quad (2.7)$$

donde  $I$  es la función de interacción dada por:

$$I = \frac{4\pi e^4}{m_e v_1^2} B_L \quad (2.8)$$

En la región I, la velocidad del proyectil es menor que la velocidad de los electrones del blanco, estos no pueden absorber energía directamente de las colisiones con el proyectil como sucede a velocidades mayores. Para este caso, Firsov plantea un modelo donde las colisiones entre el proyectil y el átomo blanco pueden verse como una interacción entre dos átomos Thomas - Fermi, dicha interacción, se describe como la formación de una cuasi - partícula durante el tiempo que duraría la colisión [10]. Durante este tiempo, los electrones del blanco y del proyectil, pueden intercambiarse, de modo que los electrones que pasan del blanco al proyectil, son acelerados a la velocidad de este último, absorbiendo así una pequeña cantidad de momento  $m_e v$  la cual contribuye al proceso de frenado. Cuando los electrones son transferidos del proyectil al blanco, también existe una transferencia de momento, pero esta no favorece al frenamiento. De este modo, estudiando la transferencia de energía dentro de la cuasi - molécula, con la elección adecuada de un potencial interatómico, se llega a la siguiente expresión [3]:

$$Se = 0.2347\pi^2 e^2 a_0 \frac{v_1}{v_B} (Z_1 + Z_2), \quad (2.9)$$

donde podemos ver que el poder de frenamiento es proporcional a la velocidad del proyectil, de este modo, se han encontrado varias expresiones, una de ellas, propuesta por Lindhard [3] es la siguiente:

$$Se = Z_1^{1/6} 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1 Z_2 v_1}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}) v_B}, \quad (2.10)$$

se llega a esta ecuación mediante un modelo similar al descrito anteriormente, con una elección diferente del potencial interatómico.

Montenegro, Cruz y Vargas, desarrollaron una fórmula universal que describe en forma continua las tres regiones de energía, la cual puede fácilmente introducirse en un programa para cálculos de frenamiento electrónico y puede verse en el apéndice.

Cabe mencionar que esta ecuación, no se deriva del cálculo de primeros principios, sino de un análisis semifenomenológico de los diferentes mecanismos que participan en el proceso de frenado, como son la ionización, el intercambio de carga, la excitación, etc., tomando en cuenta que estos contribuyen en mayor o menor medida en cada intervalo de velocidades.

Para velocidades relativistas, se puede hacer una corrección a la teoría de Bethe [3], de modo que esta sea válida en la región IV, esto es:

$$B = Z_2 \left[ \ln \left( \frac{2mv^2}{I} \right) - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 \right], \quad (2.11)$$

con  $\beta = v/c$ .

Cabe mencionar que, dentro de la región III, el poder de frenamiento se puede escalar, esto es, conociendo el poder de frenado de protones en un blanco dado, es posible calcular el frenamiento de otros proyectiles puntuales en el mismo blanco, teniendo en cuenta que este se puede expresar como:

$$-\frac{dE}{dx} = Z_1^2 f(v_1^2) \quad (2.12)$$

De este modo, si el valor de  $E/m$  es el mismo para dos tipos de partículas, también lo será  $\nu_l^2$ , entonces aplicando la expresión anterior, se tendrá el poder de frenamiento para partículas con igual relación energía-masa, haciendo la corrección por la relación carga-energía, por ejemplo protones de 1 MeV y alfas de 4 MeV; en este caso se tiene que el frenamiento de las alfas es cuatro veces el de los protones [3].

## 2.2 FRENAMIENTO NUCLEAR

El frenado nuclear es debido a los choques del proyectil con los átomos completos del material, toma importancia cuando la velocidad del ion incidente es baja, (región I) como se mencionó anteriormente, en estas circunstancias, el proyectil recaptura electrones del blanco [1]. De este modo, la interacción con el material, se puede ver como una serie de colisiones entre pares de átomos, de modo que las trayectorias son quebradas debido a que el ángulo de dispersión en cada colisión puede ser grande como consecuencia de una fuerte interacción coulombiana.

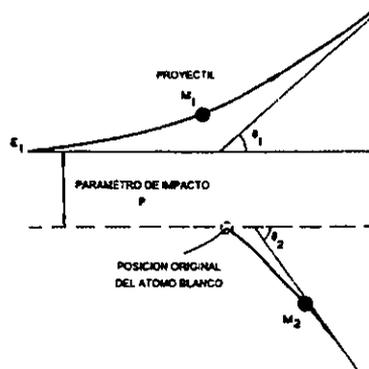


figura 2.3

En la figura 2.3 se muestra una colisión típica entre un ion y un átomo con un cierto parámetro de impacto  $p$ , el ion es desviado en un ángulo  $\theta_1$ , respecto a su dirección original, y el átomo blanco es desplazado sobre una línea que forma un ángulo  $\theta_2$ . La energía transferida a éste durante la colisión depende de la energía inicial del proyectil, y del parámetro de impacto, es claro que para  $p$  tendiendo a infinito, la energía transferida es cero, y tiene un máximo en el caso de una colisión frontal, esto es cuando  $p = 0$ , en este caso, para una energía del proyectil  $E_1$  se tiene una energía transferida  $T_m$  dada por:

$$T_m = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_1 \quad (2.13)$$

De tal manera que la transferencia máxima de energía se lleva a cabo cuando las masas son iguales. La pérdida de energía de un ion que atraviesa una sección de material de espesor  $\Delta x$ , se obtiene integrando sobre todos los parámetros de impacto [2], de modo que:

$$\Delta E = -N\Delta x \int_0^{\infty} T(E,p) 2\pi p dp \quad (2.14)$$

y por lo tanto, de acuerdo con la definición de poder de frenamiento:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = N \int_0^{\infty} T(E,p) 2\pi p dp \quad (2.15)$$

la forma de la expresión de  $T(E,p)$  dependerá del potencial de interacción  $V(r)$  entre las dos partículas, para el cual no existe una expresión analítica que sea válida para cualquier radio de interacción, por lo cual se pueden dar muchas aproximaciones, las cuales son útiles para diferentes intervalos de validez [2].

## Referencias

- [1] Richards, J. Notas del Curso "Interacción de Radiación con Materia" Cap. 16
- [2] G. Dearnaley, Freeman, J.H. et al. Ion implantation North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1973 Cap. 2
- [3] Richards, J. Notas del Curso "Interacción de Radiación con Materia" Cap. 17
- [4] Bohr, N. 1913, Phil Mag, **25**, 10
- [5] Bethe, H.A. 1930, Ann Physik **5**, 325
- [6] Walske, M.C., 1952, Phys. Rev. **88**, 1283
- [7] Bichsel, H. 1963, Handbook of Physics, Sección 8C (McGraw-Hill, N.Y.).
- [8] Lindhard J., 1954, kgl. Danske Vid Selsk., Matt Fys, Medd. **28**, No. 8
- [9] Ziegler, J.F., Biersack, J.P., Littmark, V. cap. 3
- [10] Firsov, O.B., 1954, Sov. Phys. J.E.T.P. **9**, 1076
- [11] Montenegro, E.C., S.A. Cruz and Vargas-Aburto, C. Physics Letters **92A** 195-202 (1982)

## CAPITULO III

### IMPLANTACIÓN DE IONES

#### 3.1 PROFUNDIDAD

#### DE LA IMPLANTACIÓN

Durante la implantación de iones, las colisiones electrónicas y nucleares del ión incidente con la estructura interna del blanco ocasiona que la trayectoria del proyectil dentro del material no sea una línea recta, sino que presente desviaciones estocásticas desde que penetra al material hasta que queda en reposo. Debido a esto, el proyectil recorre una distancia mayor que la que representa la profundidad de la implantación.

En la figura 3.1 puede verse un esquema de la trayectoria que sigue un proyectil en una implantación, en este esquema el proyectil entra al sólido en el punto que representa el origen ( $O$ ) y a un ángulo  $\alpha$  con respecto a la normal, y se detiene en el punto  $P (x_f, y_f, z_f)$ .

A la distancia que recorre el proyectil (sobre su trayectoria) se le llama alcance ( $R$ ) y a la proyección de este sobre el vector de la trayectoria del ion incidente se le llama alcance proyectado ( $R_p$ ), el alcance radial ( $R_r$ ) es la distancia  $OP$ , el alcance de expansión  $R_s$  es la proyección de  $R_r$  sobre la superficie del sólido.

El alcance transversal proyectado  $R_p^t$  es la distancia perpendicular del punto  $P$  a la línea definida por el alcance proyectado.

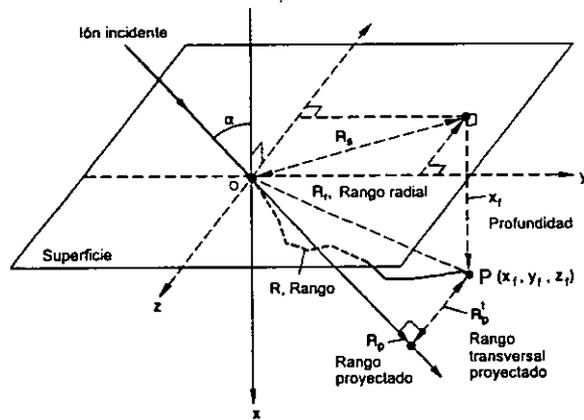


figura 3.1

Las relaciones entre las distancias definidas son las siguientes [1]:

$$R_i = (y_f^2 + z_f^2)^{\frac{1}{2}} \quad (3.1)$$

$$R_r = (x_f^2 + y_f^2 + z_f^2)^{\frac{1}{2}} \quad (3.2)$$

$$R'_p = \left[ (x_f \sin \alpha - y_f \cos \alpha)^2 + z_f^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.3)$$

$$R_p = \left[ R_r^2 + (R'_p)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.4)$$

### 3.2 DISTRIBUCIÓN DE LA IMPLANTACIÓN

Debido a la naturaleza estocástica de los choques que alteran la trayectoria de los proyectiles, estos aún con las mismas características e incidiendo sobre el mismo material, recorrerán caminos distintos, lo cual hace que la profundidad de la implantación no sea necesariamente la misma para cada ion incidente, de modo que cuando se estudia un gran número de partículas implantadas se debe hablar de una distribución de alcances (definidos por la cantidad  $x_j$ ) ó profundidades.

Una distribución puede caracterizarse por sus momentos estadísticos, el primer momento es el valor promedio de una distribución, en este caso continua, cuya definición es la siguiente:

$$\mu = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx \quad (3.5)$$

donde  $f(x)$  es la función de probabilidad para la variable aleatoria que se estudia. El segundo momento es la varianza ( $\sigma^2$ ) definida como:

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 f(x)dx \quad (3.6)$$

La desviación estandard de la distribución es simplemente la raíz cuadrada de la varianza; ( $\sigma^2$ )<sup>1/2</sup>. A bajas dosis de implantación sobre materiales amorfos (como es el cuarzo fundido) la distribución de alcances se aproxima a una gaussiana, para la cual la función de probabilidad es:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right] \quad (3.7)$$

Ahora, dado que  $f(x)$  es la probabilidad de que un ion quede en reposo a una distancia  $x$  de la superficie del material, entonces se puede ver que la densidad atómica de la implantación es:

$$N(x) = \phi f(x), \quad (3.8)$$

donde  $\phi$  es la dosis de implantación. Con ayuda de la figura siguiente, se puede identificar  $\mu$  con  $R_p$  y  $\sigma$  con  $\Delta R_p$ , de modo que:

$$N(x) = \frac{\phi}{\Delta R_p(2\pi)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-R_p}{\Delta R_p}\right)^2\right] \quad (3.9)$$

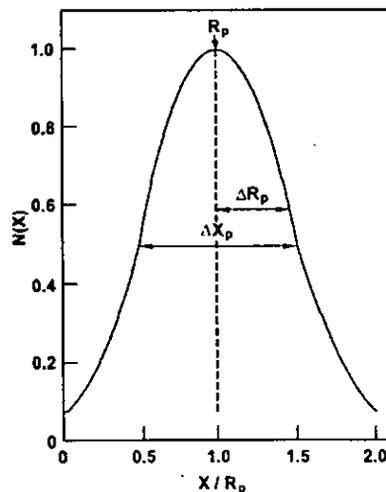


figura 3.2

Entonces, la máxima densidad atómica se obtendrá igualando  $x$  a  $R_p$ , entonces:

$$N(R_p) = N_p = \frac{\phi}{\Delta R_p (2\pi)^{1/2}} \approx \frac{0.4\phi}{\Delta R_p}, \quad (3.10)$$

donde  $N_p$  tiene unidades de  $\text{átomos/cm}^3$  para  $\phi$  en  $\text{átomos/cm}^2$  y  $\Delta R_p$  en  $\text{cm}$ .

Es claro que las cantidades fundamentales para caracterizar la implantación son  $R_p$  y  $\Delta R_p$  las cuales están relacionadas con el alcance mediante las aproximaciones dadas por Lindhard [2]:

$$R_p \approx \frac{R}{1 + (M_2/3M_1)} \quad (3.11)$$

$$\Delta R \approx \frac{R_p}{2.5} \quad (3.12)$$

Ésta última aproximación es válida cuando el frenamiento electrónico es despreciable y  $M_1 > M_2$ , esto es, cuando el ángulo de dispersión es pequeño..

Debido a que la dependencia de estas cantidades con  $dE/dx$  implica una relación con la velocidad del proyectil en cada punto de su trayectoria, el uso de los programas de cómputo para la obtención de estas cantidades mediante la simulación es muy conveniente. Como se mencionó anteriormente, con el propósito de caracterizar las implantaciones que dan lugar al presente trabajo, se empleó el programa *TRIM* (*Transport of ions in matter*) el cual realiza cálculos de poder de frenamiento y secciones eficaces y, a partir de ellos simula una cascada de colisiones con parámetros aleatorios (como parámetro de imparto y ángulos de incidencia) para dar una aproximación de la geometría de la implantación.

### 3.3 DAÑO POR RADIACIÓN

#### DESPLAZAMIENTOS PRODUCIDOS POR UN CHOQUE PRIMARIO

Las teorías de daño por radiación se basan en la suposición de que cuando durante el choque inicial de una partícula acelerada con un átomo del material, existe una cierta energía mínima transferida para trasladar permanentemente al átomo de su lugar original. Dicha energía se le llama energía de desplazamiento  $E_d$  [3].

Como se muestra en la figura, el primer desplazamiento se produce cuando el ion choca con el átomo y le transfiere a éste una energía mayor que  $E_d$ , por lo cual el átomo desplazado colisionará con alguno en su entorno creando así desplazamientos secundarios, los cuales en su momento pueden desplazar átomos adicionales.

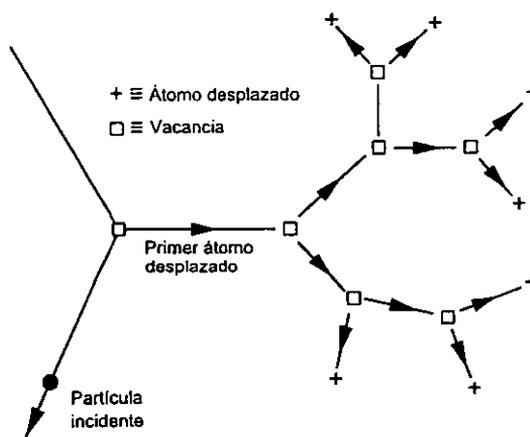


figura 3.3

De este modo, cada evento puede dar lugar a varios desplazamientos en la proximidad de cada uno, a esta secuencia de desplazamientos múltiples se le conoce como cascada. El número promedio de átomos desplazados por el choque inicial del ion incidente de energía  $E$  con el material se denota  $\langle Nd(E) \rangle$ . El cálculo más simple de esta función de daño por desplazamiento se basa en el modelo de Kinchin y Pease, el cual utiliza el potencial de esferas duras, de modo que sólo contempla colisiones elásticas binarias.

Ahora, si un átomo del material recibe una energía menor a  $Ed$ , sólo produce en éste vibraciones de modo que la energía transferida se disipa como calor, por otro lado, si un átomo blanco recibe cierta cantidad de energía entre  $Ed$  y  $2Ed$ , será desplazado, pero no producirá desplazamientos secundarios, esto es:

$$\langle Nd(E) \rangle = 0 \quad \text{Para } E < Ed \quad (3.13)$$

$$\langle Nd(E) \rangle = 1 \quad \text{Para } Ed \leq E \leq 2Ed \quad (3.14)$$

En este segundo caso, puede suceder que debido a que la energía transferida en la colisión es mayor que  $Ed$  y menor que  $2Ed$ , el átomo blanco se desplazará, pero el incidente continuará su trayectoria con energía cinética menor que  $Ed$  sustituyéndolo y disipando su energía cinética restante como calor. Otra posibilidad es que el átomo incidente transfiera una energía menor que  $Ed$  al átomo blanco, con lo cual éste no se desplazará, dejando al ion incidente como única partícula desplazada sin suficiente energía para contribuir con la cascada, de este modo el átomo incidente representa el único desplazamiento.

Ahora, para el caso en que la energía del ion incidente  $E$  sea mayor a  $2Ed$ , es posible considerar que el número de desplazamientos producidos por este sea igual al número de desplazamientos formados por los dos átomos puestos en movimiento con la primera colisión como se muestra en la figura:

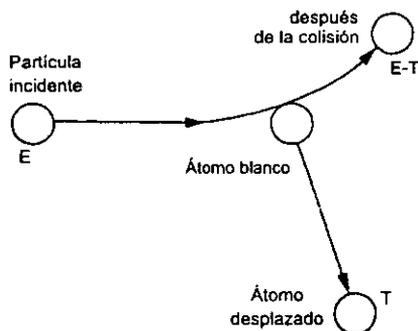


figura 3.4

En la primera colisión, el proyectil transfiere una energía  $T$  al blanco y es dispersado con una energía  $E-T$ , y por tanto:

$$\langle Nd(E) \rangle = \langle Nd(E-T) \rangle + \langle Nd(T) \rangle \quad (3.15)$$

Con la suposición de que estas colisiones se dan entre átomos iguales, es claro que  $T$  puede tomar cualquier valor entre  $0$  y  $E$ , sin embargo, se calculó anteriormente la sección eficaz para el potencial de esferas duras, con lo cual se conoce la probabilidad de que se transfiera una cierta cantidad de energía entre  $T$  y  $T+dT$ , la cual está dada por:

$$P(E, T)dT = \frac{dT}{E} \quad (3.16)$$

y entonces, el promedio del número de desplazamientos:

$$\langle Nd(E) \rangle = \int_0^E Nd(E)P(E, T)dT = \int_0^E \frac{Nd(E)}{E} dT \quad (3.17)$$

entonces podemos escribir:

$$\langle Nd(E) \rangle = \frac{1}{E} \left[ \int_0^E Nd(E-T)dT + \int_0^E Nd(T)dT \right] \quad (3.18)$$

Ahora, con la condición de que  $E \geq T$ , es posible establecer el cambio de variable en la primera integral  $T' = E-T$  e invertir los límites de integración, con lo cual ambas integrales son iguales y entonces:

$$\langle Nd(E) \rangle = \frac{2}{E} \int_0^E Nd(T)dT \quad (3.19)$$

Es posible ahora expandir la integral en tres partes para aprovechar los intervalos de energía en los cuales el número de desplazamientos es conocido:

$$\frac{2}{E} \int_0^E Nd(T)dT = \frac{2}{E} \left[ \int_0^{Ed} Nd(T)dT + \int_{Ed}^{2Ed} Nd(T)dT + \int_{2Ed}^E Nd(T)dT \right] \quad (3.20)$$

Es claro de las suposiciones anteriores que la primera integral del lado derecho es nula, ya que la energía considerada en el intervalo de integración es menor que  $Ed$ , y que el integrando de la segunda es uno, entonces:

$$E \langle Nd(E) \rangle = 2Ed + 2 \int_{2Ed}^E Nd(T)dT \quad (3.21)$$

Diferenciando con respecto a  $E$  queda el siguiente resultado:

$$\langle Nd(E) \rangle + E \frac{d \langle Nd(E) \rangle}{dE} = 2 \frac{d}{dE} \left( \int_{2Ed}^E Nd(T)dT \right) \quad (3.22)$$

lo cual, da como resultado la ecuación diferencial [3]:

$$\frac{d\langle Nd(E) \rangle}{dE} = \frac{\langle Nd(E) \rangle}{E} \quad (3.23)$$

cuya solución es:

$$\langle Nd(E) \rangle = CE \quad (3.24)$$

Tomando como condición inicial en hecho de que en el intervalo de energías  $Ed$  y  $2Ed$  el número de desplazamientos es uno, es claro que

$$C = \frac{1}{2Ed} \quad (3.25)$$

De modo que

$$\langle Nd(E) \rangle = \frac{E}{2Ed} \quad \text{Para } 2Ed < E < Ec \quad (3.26)$$

El límite superior de validez  $Ec$  en el resultado anterior, es una energía de corte impuesta por Kinchin y Pease para ajustar las pérdidas de energías del proyectil debidas al frenamiento electrónico a altas energías. El valor para  $Ec$  es tomado como  $M_2 \text{ KeV}$  [3], entonces  $Ec(\text{Si}) = 28 \text{ KeV}$ .

Ahora, podemos calcular el valor promedio de la energía transferida al átomo blanco en la colisión inicial, de manera similar al cálculo realizado anteriormente:

$$\langle T \rangle = \int_0^{T_M} TP(E, T) dT = \frac{1}{T_M} \int_0^{T_M} T dT = \frac{E}{2} \quad (3.27)$$

y dado que la energía mínima para producir un desplazamiento es  $E_d$ , entonces el número de desplazamientos producidos por la primera colisión será

$$\langle Nd(E) \rangle = \frac{E}{2E_d} \quad (3.28)$$

o bien

$$\langle Nd(E) \rangle = \frac{\langle T \rangle}{E_d} \quad (3.29)$$

Entonces:

$$\langle Nd(E) \rangle = \frac{E_c}{2E_d} \quad \text{Para } E > E_c \quad (3.30)$$

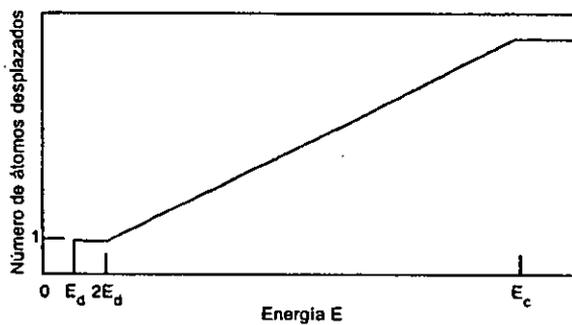


figura 3.5

**Referencias**

- [1] Collins, R.T., Fauchet P.M., Tischler M.A. *Physics Today* 50, 25, 1997
- [2] Uhlir, *Bell System Tech. J.* 35, 333 (1956)
- [3] Pickering, C., Beale, M.I.J., Robbins, D.J., Peerson P.J., Greet, R. *J Phys.* C17, 6535 (1984)
- [4] Canham, L.T. *Appl. Phys Lett.* 57, 1046 (1990)
- [5] Alonso, M., Finn, E.J. *Fundamentos Cuánticos y Estadísticos*, Addison-Wesley Iberoamericana, México, 1990.

## CAPITULO IV

### EL SILICIO POROSO Y SUS PROPIEDADES ÓPTICAS

Como es bien sabido, el silicio es el elemento mas importante para la electrónica actual, ya que sus propiedades semiconductoras han permitido integrar miles de dispositivos electrónicos en áreas cada vez más pequeñas. De hecho, siendo que actualmente se fabrican detectores ópticos en silicio, lo que completaría la integración de la opto-eletrónica serían emisores de silicio. No obstante, en esta aplicación, este elemento ha sido sustituido por otros materiales debido a su baja eficiencia, por lo que se utilizan compuestos de alta eficiencia óptica como el GaAs, sin embargo, éstos presentan serias dificultades para integrarse en un microcircuito de silicio [1].

La emisión de luz en un semiconductor, involucra la excitación de un electrón de una banda de valencia llena a una banda de conducción vacía y la recombinación posterior del electrón con el estado vacío al regresar a la banda de valencia, este proceso es llamado *desexcitación*. La emisión luminosa tiene lugar cuando la energía involucrada en los procesos anteriores da lugar a la creación de un fotón con lo cual se cumple el principio de conservación, no obstante de forma general, este mecanismo de excitación - desexcitación requiere de la conservación simultánea de momento y energía.

En la figura 4.1 se muestra un esquema de la estructura de las bandas del GaAs y del Si, donde puede verse la energía del electrón como función del momento  $\hbar v$ . En el caso del arseniuro de galio, el máximo de la banda de valencia coincide, en momento, con el mínimo de la banda de conducción, por lo cual cuando el electrón se recombina con un estado vacío, el momento se conserva naturalmente. de igual modo, la energía se conserva con la emisión de un fotón. Este tipo de materiales son llamados de brecha directa.

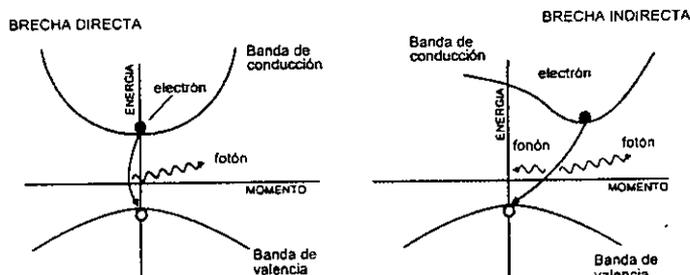


figura 4.1

En el caso del silicio, siendo éste un material de brecha indirecta, el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción ocurren para diferentes valores de  $\hbar v$ , con lo cual la conservación del momento se da con la emisión de un fonón simultáneamente con el fotón [1]. No obstante, este proceso es de segundo orden y por lo tanto mucho menos probable que la recombinación en un material de brecha directa, y como consecuencia la emisión es mucho más débil, siendo su eficiencia menor al 0.001%

Entonces, el problema radica en obtener materiales compatibles con el silicio con una alta eficiencia óptica, o bien incrementar de alguna manera la eficiencia del silicio. Para este fin, últimamente se ha prestado atención al silicio poroso, el cual fue descubierto en 1956 durante un estudio de métodos de electropulido por A. Uhler [2], no obstante, no fue sino hasta el año de 1984 cuando C. Pickering reportó por primera vez la fotoluminiscencia del silicio poroso en energías superiores a la brecha energética del silicio empleando bajas temperaturas [3]. Seis años después, en 1990, Leigh Canham reporta la obtención de fotoluminiscencia en la parte visible del espectro lejos de la brecha del silicio a temperatura ambiente y demuestra que, variando las condiciones de preparación del material, puede elegirse la longitud de onda de la luz emitida dentro de un rango considerable, lo cual resulta importante para la tecnología de pantallas de video, las cuales generan una amplia gama de colores mediante la mezcla de luz roja, verde y azul [4]. En este estudio se menciona también que la eficiencia del silicio poroso como emisor es comparable con la de los compuestos usados actualmente como emisores de luz.

Gran parte de los estudios subsecuentes se han enfocado en explicar los mecanismos de emisión del silicio poroso, lo cual no sólo es interesante desde el punto de vista de la investigación básica, sino que esta información permitiría optimizar las propiedades fotoluminiscentes. El reporte de Canham sugiere que las porosidades del silicio lo dividen en regiones cristalinas nanométricas y la brecha energética aumentó como resultado del confinamiento cuántico, lo cual puede verse de manera simple aplicando el modelo del pozo de potencial [1] identificando las barreras de éste con las superficies del nanocrystal, donde la brecha energética es inversamente proporcional al cuadrado de la dimensión de la región confinada, esto es, de manera simplificada:

$$\Delta E_c = \Delta E_v + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2} \left( \frac{1}{a_x^2} + \frac{1}{a_y^2} + \frac{1}{a_z^2} \right) \left( \frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*} \right) \quad (4.1)$$

donde  $E_v$  es la brecha energética del silicio "grueso" (es decir con un tamaño tal que no intervienen fenómenos de confinamiento),  $a_x$ ,  $a_y$ ,  $a_z$  son las dimensiones de la caja sobre cada uno de los ejes, y  $m_c^*$  y  $m_v^*$  son las masas efectivas de los electrones en las bandas de conducción y valencia respectivamente. La masa efectiva suele definirse en base a una analogía con la Ley de Newton teniendo en cuenta las fuerzas que actúan sobre el electrón, esto es clásicamente:

$$m^* = \frac{F}{a} \quad (4.2)$$

donde  $F$  es la fuerza externa aplicada al electrón y  $a$  la aceleración real debida a  $F$  y a la interacción con la red, de modo que  $m^*$  es una función donde intervienen los parámetros de la red y el momento del electrón en la misma [5]. De una manera más formal, la masa efectiva se define en función de la energía  $E$  y el número de onda  $k$  como [6]:

$$m^* = \hbar \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \quad (4.3)$$

En la figura 4.2, se muestra el cálculo de la banda óptica como función del tamaño característico de las nanoestructuras de silicio empleando el modelo tridimensional del pozo, donde se observa sobre la línea punteada, una energía de transición cerca de los 2 eV en la parte roja del espectro para una partícula de alrededor de 3 nm, sin embargo este modelo es muy simplificado. Los resultados de cálculos mucho más complejos se muestran en la región oscura de la gráfica, donde se observa que la energía de transición a 2 eV probablemente sea para partículas de al rededor de 2.0 a 2.5 nm.

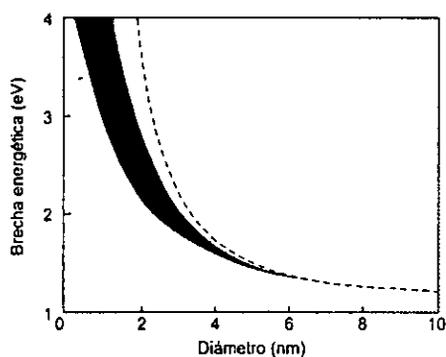
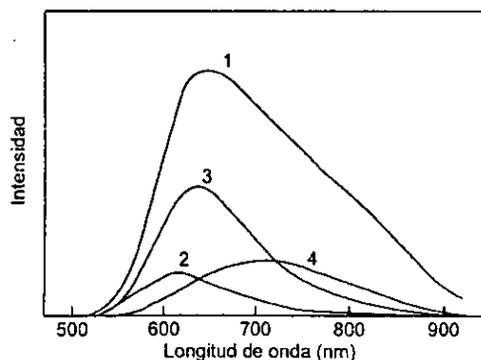


figura 4.2

Estas consideraciones teóricas, han podido comprobarse cualitativamente con la posibilidad de separar por tamaño a los nanocristales de silicio mediante técnicas de cromatografía. En la figura 4.3, se muestran cuatro espectros de fotoluminiscencia:



*figura 4.3*

El espectro 1 corresponde a una distribución de nanocristales de diferentes tamaños, los espectros del 2 al 4 corresponden a nanocristales de tamaño seleccionado el cual decrece al pasar del 4 al 3 y del 3 al 2. En éstos últimos puede notarse que la banda de fotoluminiscencia se tiene para longitudes de onda que decrecen con el tamaño de los cristales, de modo que hay un claro aumento de la brecha energética al disminuir el tamaño de los cúmulos [1].

**Referencias**

- [1] Collins, R.T., Fauchet P.M., Tischler M.A. *Physics Today* **50**, 25, 1997
- [2] Uhlir, Bell System Tech. J. **35**, 333 (1956)
- [3] Pickering, C., Beale, M.I.J., Robbins, D.J., Peerson P.J., Greet, R. *J Phys.* **C17**, 6535 (1984)
- [4] Canham, L.T. *Appl. Phys Lett.* **57**, 1046 (1990)
- [5] Alonso, M., Finn, E.J. *Fundamentos Cuánticos y Estadísticos*. Addison-Wesley Iberoamericana, México, 1990.
- [6] Mc Gervey, J.D., *Introducción a la Física Moderna*. Trillas, México; 1975.

## CAPÍTULO V

### DESARROLLO EXPERIMENTAL

#### INTRODUCCIÓN

Como se mencionó anteriormente, el silicio poroso es muy prometedor en cuanto a la integración de emisores de luz en microcircuitos de silicio, sin embargo aparecen otros problemas en cuanto al manejo del silicio poroso obtenido mediante procesos químicos, como son su fragilidad mecánica y la fuerte dependencia de la emisión con las condiciones de preparación. Un método alternativo para producir nanoestructuras de silicio es mediante la implantación de átomos de éste elemento en  $\text{SiO}_2$ . Se ha reportado que para dosis mayores a  $1 \times 10^{17}$  átomos/cm<sup>2</sup> a energías por debajo de 1 MeV y con tratamientos térmicos posteriores a la implantación del orden de 1000° C se forman dichas estructuras las cuales presentan propiedades ópticas equivalentes a las del silicio poroso [1].

La formación de nanopartículas de silicio dentro de  $\text{SiO}_2$  se debe a la acumulación de los átomos aislados implantados que al calentar la muestra aumenta su movilidad dentro del material y por lo tanto la probabilidad de que se unan unos con otros formando una estructura cristalina. Ahora bien, de la literatura consultada se sabe que la movilidad de Si dentro de  $\text{SiO}_2$  está dada por el coeficiente de difusión (con unidades de cm<sup>2</sup>/s), es extremadamente pequeña [2], sin embargo, se espera que debido al daño por radiación, la movilidad aumente considerablemente. Ahora bien, si a este daño por radiación debido a la implantación de Si, se aumenta por la implantación de algún elemento pesado cuyas propiedades ópticas no interfieran con las que se desea estudiar y además que sea químicamente inerte, la formación de cúmulos de silicio puede verse favorecida. Para este efecto, se eligió el oro para una implantación subsecuente, el cual además tiene la propiedad de reducir al  $\text{SiO}_2$  modificando la matriz de modo que al descomponerse la molécula, deja libres los átomos de silicio.

Las propiedades ópticas de las muestras obtenidas, se caracterizan mediante los espectros de absorción y emisión óptica, los primeros mostrarán la región en longitud de onda para la cual la muestra absorbe energía luminosa. Esta energía absorbida puede producir un efecto de fotoluminiscencia, esto es, la muestra absorbe luz de una cierta longitud de onda y emite en otra. Para analizar este efecto, se realiza entonces un espectro de emisión, el cual dará información de la longitud de onda a la cual emite la muestra al ser excitada con cierta longitud de onda, la cual en este caso se elige en base a los picos del espectro de absorción. En la sección 5.2 y 5.3 se describen los dispositivos experimentales para la obtención de dichos espectros.

## 5.1 SISTEMA DE IMPLANTACIÓN DE IONES. ACELERADOR PELETRÓN Y EQUIPO ASOCIADO

Para la implantación de iones en las obleas de  $\text{SiO}_2$  se empleó el acelerador tipo *Peletrón* modelo 9SDH-2 del Instituto de Física de la UNAM. A continuación se incluye una breve y sencilla descripción del mismo:

El acelerador cuenta con dos fuentes de iones negativos; una llamada *SNICS* (*secondary negative ions by cesium sputtering*) (en la figura 5.1 aparece señalada como 1) para acelerar iones de sólidos, y una fuente de radio frecuencia llamada *Alphatross* para gases (2). Ambas fuentes están a  $30^\circ$  respecto al eje del acelerador. En este caso se empleó la primera, a partir de la cual se hace la descripción.

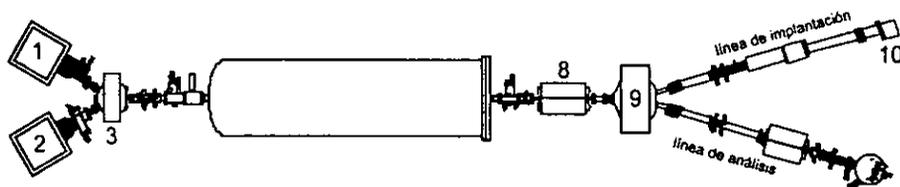


figura 5.1

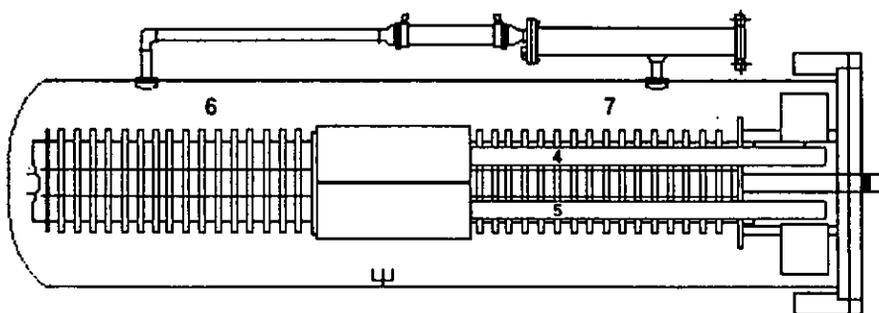
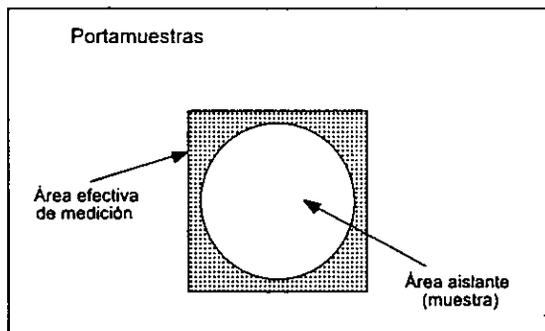


figura 5.2

El material del cual se obtendrán los iones a implantar es colocado a manera de cátodo al cual se le aplica un potencial, éste se encuentra bajo una atmósfera de vapor de cesio, el cual, bajo la influencia del potencial produce erosión iónica en el cátodo, desprendiendo sus átomos que al intercambiar carga con el cesio se convierten en iones negativos y son repelidos por el cátodo hacia una etapa de preaceleración por medio de campos eléctricos formados por una serie de anillos que hacen una diferencia de potencial entre ellos, posteriormente, un electroimán llamado inyector (3) desvía el haz de partículas hacia la etapa de aceleración de alta energía (figura 5.2).

Dos cadenas (4, 5) de eslabones conductores unidos entre si con elementos aislantes transportan carga inducida y la depositan en la terminal que se encuentra al centro del tándem, a partir de ésta terminal y hacia ambos extremos se encuentra una serie de anillos conductores (6, 7) interconectados por resistencias, de modo que el potencial va aumentando en cada anillo hasta llegar a la terminal, así pues, los iones desviados por el imán inyector son acelerados por los anillos de la izquierda (6) hacia la terminal de alto voltaje donde, mediante una atmósfera de nitrógeno son despojados de sus electrones cambiando de carga negativa a carga positiva, por lo cual son repelidos hacia el lado derecho del tándem y expulsados hacia un cuadrupolo magnético (8) usado para enfocar el haz que pasa entonces por el imán selector (9), donde es desviado de acuerdo a su carga y a su masa por la línea de implantación para incidir finalmente en la muestra, la cual dentro de la cámara de implantación (10) está montada sobre un disco conductor conectado a un integrador de corriente que permite medir la dosis de implantación en base al área afectada y a la carga de los iones [3].

Ya que el  $\text{SiO}_2$  es un aislante, el integrador de corriente sólo recibe información de la carga acumulada sobre la parte del área de implantación que sobresale de disco de  $\text{SiO}_2$  hacia el portamuestras, de modo que el área efectiva de medición de la dosis no es el área barrida por el haz, sino que a ésta debe restarse el área cubierta por la muestra.



*figura 5.3*

En el último trayecto (del imán selector a la cámara de implantación), el haz pasa entre un campo eléctrico formado por dos placas que permiten cambiar la dirección del haz para eliminar los neutros, y por un sistema de placas (dos verticales y dos horizontales) que producen un campo eléctrico variable para realizar un barrido sobre la muestra y obtener una implantación homogénea.

## 5.2 ABSORCIÓN ÓPTICA

Los espectros de absorción óptica se obtuvieron a temperatura ambiente mediante un espectrofotómetro de doble haz *Perkin-Elmer 330*, el cual tiene el siguiente principio de funcionamiento:

La luz emitida por la lámpara seleccionada (de deuterio o tungsteno, según la región a analizar) es difractada por un sistema de rejillas (en el esquema siguiente  $G_1$  y  $G_2$ ) para seleccionar una región de longitudes de onda mediante una rendija ( $S_1$  y  $S_2$ ) de la cual puede seleccionarse la abertura para delimitar un ancho de banda. El haz monocromado pasa entonces a un disco que presenta orificios y espejos ( $E$ ) que envía alternadamente el haz a través de cada uno de los dos portamuestras y finalmente al detector; en uno de ellos se coloca la muestra a analizar y en el otro, que es usado como referencia puede colocarse una muestra de control a la que será referida el espectro, o bien dejarla libre y entonces el haz pasará directamente al fotomultiplicador que es usado como detector [4].

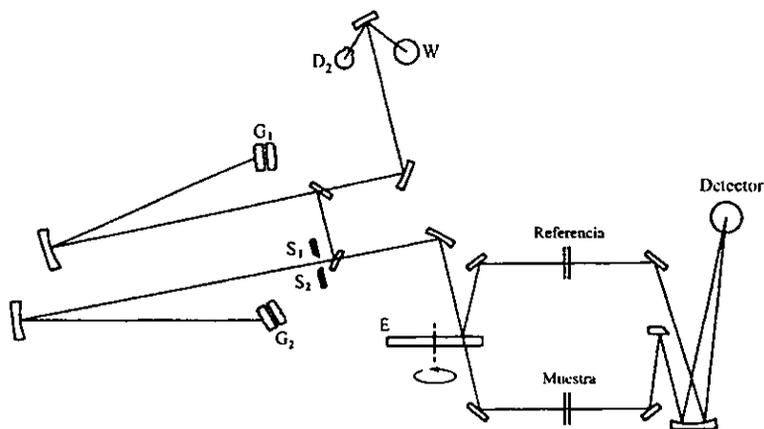


figura 5.4

Así pues éste recibe la luz que pasa a través de la muestra y de la referencia alternadamente; de éste modo se garantiza tener un mismo tipo de respuesta en ambos

canales, lo cual es una ventaja respecto a otro tipo de equipo, en el cual se usa un detector independiente para cada canal y ambos deben calibrarse para tener una lectura confiable.

La electrónica asociada a nuestro equipo es capaz de resolver ambas señales (la generada por la muestra y por la referencia) y dar la lectura de *densidad óptica*, la cual es una cantidad adimensional y está dada por:

$$DO = \log_{10} \frac{I_0}{I_T} \quad (5.1)$$

donde  $I_0$  e  $I_T$  son las intensidades del haz que pasa a través de la referencia y a través de la muestra respectivamente. Es claro que ambas cantidades son dependientes de la longitud de onda del haz, ya que tanto la referencia como la muestra pueden ser más o menos "transparentes" para el haz a una cierta longitud de onda que a otra y son estas diferencias las que forman un espectro de absorción al registrar la densidad óptica mientras se barre un intervalo de longitudes de onda, obteniendo así una gráfica como la siguiente:

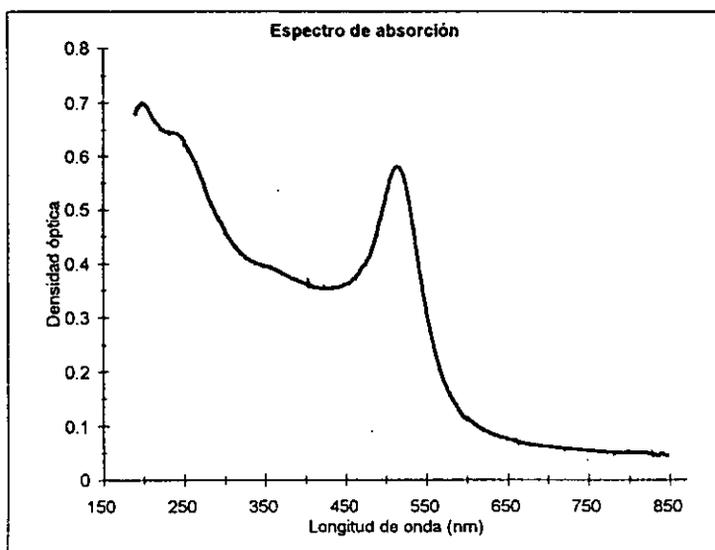


figura 5.5

En este espectro puede verse que para longitudes de ondas mayores a los  $700 \text{ nm}$ , la muestra prácticamente no absorbe, esto puede interpretarse con mayor claridad si se define una cantidad adimensional llamada *transmitancia* como:

$$T = \frac{I_T}{I_0}, \quad (5.2)$$

y entonces:

$$DO = \log_{10} \frac{1}{T} \quad (5.3)$$

con lo cual

$$T = 10^{-DO}, \quad (5.4)$$

de modo que si para la región a partir de los  $700 \text{ nm}$  se tiene que  $DO \approx 0.05$ , entonces  $T \approx 0.89$ , y de la definición podemos obtener que  $I_T \approx 0.89 I_0$ , sin embargo para  $\lambda \approx 500 \text{ nm}$ ,  $DO \approx 0.6$ , lo cual corresponde a  $I_T \approx 0.25 I_0$ , esto es, la muestra absorbe del orden del 75% de la luz incidente.

Cabe mencionar que  $DO$  es una función donde intervienen tanto la longitud de onda como el grosor de la muestra por lo que se acostumbra realizar una normalización sobre el espesor y reportar las mediciones de absorción óptica mediante el coeficiente de absorción  $\alpha$  dado por:

$$\alpha = \frac{2.303 \cdot DO}{\Delta e} \quad (5.5)$$

donde  $\Delta e$  es el espesor de la muestra dado en centímetros, por lo que  $\alpha$  tendrá unidades de  $l/cm$ .

Con esta cantidad se pueden recuperar las intensidades  $I_0$  e  $I_T$  mediante la siguiente expresión:

$$I_T = I_0 e^{-\alpha \Delta e} \quad (5.6)$$

Es importante mencionar que el equipo realiza una corrección sobre las variaciones de la eficiencia de la lámpara al emitir en diferentes longitudes de onda, esto es, dada la naturaleza de la lámpara, el haz monocromado en una cierta longitud de onda puede variar en intensidad respecto a otra. Así mismo es corregida la respuesta del detector en el intervalo de longitudes de onda que se empleó en el espectro, de modo que al dejar libres ambos haces, el espectro deberá ser plano y localizado en  $DO = 0$ .

### 5.3 FOTOLUMINISCENCIA

La fotoluminiscencia se refiere a la emisión de luz debida a un sistema excitado por una cierta fuente luminosa de la cual absorbe energía, esto es, se excita al sistema con luz a una cierta longitud de onda  $\lambda_e$  y éste responde emitiendo con  $\lambda_l$ .

De acuerdo con lo anterior, un espectro de emisión fotoluminiscente dará información acerca de la longitud de onda de la luz emitida por la muestra al ser excitada por una  $\lambda_e$  fija, y un espectro de excitación indicará qué longitud de onda excita a la muestra de modo que ésta emita en una  $\lambda_0$  fija.

Para obtener estos espectros se utiliza un espectrofluorímetro, del cual se muestra un esquema a continuación:

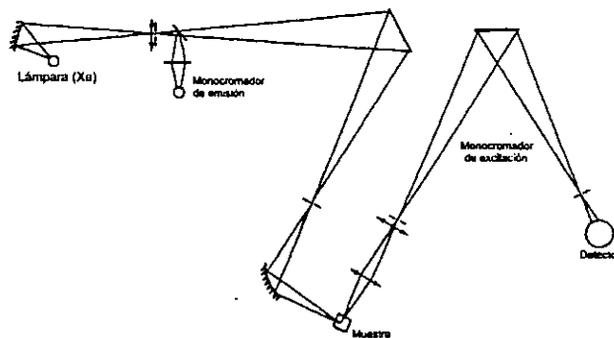


figura 5.6

La luz emitida por la lámpara de xenón pasa por un monocromador donde se elige  $\lambda_e$ , esta luz monocromada incide sobre la muestra pasando por un sistema de rendijas que limitan en ancho de banda de la luz seleccionada. La luz emitida por la muestra es enfocada y monocromada en  $\lambda_0$  e incide sobre el detector. De éste modo para obtener un espectro de

emisión se fija  $\lambda_e$  y se barre sobre  $\lambda_0$  en el intervalo deseado, y viceversa para obtener el espectro de excitación.

Al igual que en el caso del espectrofotómetro para analizar absorción óptica, el espectrofluorímetro debe calibrarse ya que la lámpara no tiene la misma intensidad para toda  $\lambda$  y el detector también varía su respuesta respecto a la longitud de onda. Para este fin, se emplean sustancias como la *rodamina-B* la cual tiene la propiedad de emitir un fotón de 640 nm por cada fotón incidente de cualquier longitud de onda, de modo que la intensidad de luminiscencia es independiente de la longitud de onda de excitación, de este modo, colocando una ampolleta con rodamina a manera de muestra, se puede asegurar que las variaciones en intensidad de emisión al barrer  $\lambda_e$  serán debidas a la eficiencia de la lámpara al ser monocromada en esa longitud de onda y es posible entonces corregir los espectros de excitación.

Por otro lado, la corrección de los espectros de emisión se realiza colocando un difusor de sulfato de bario (el cual tiene la propiedad de no absorber preferentemente alguna longitud de onda, de modo que tiene una respuesta plana frente a  $\lambda_e$ ) en el portamuestras, así pues, la variación que se encuentre en la señal del detector será debida a la eficiencia del detector respecto a  $\lambda_0$ .

## 5.4 MÉTODO EXPERIMENTAL

Se planteó el experimento en base a la literatura consultada que reporta la formación de nanocristales de Si en SiO<sub>2</sub> con un rango de dosis que va desde  $1 \times 10^{17}$  Si/cm<sup>2</sup> a  $6 \times 10^{17}$  Si/cm<sup>2</sup> a energías del orden de 700 KeV y con tratamientos térmicos posteriores a la implantación de 900°C a 1300°C durante lapsos de 15 minutos hasta 2 horas.

Dadas las condiciones de trabajo del equipo, se consideraron dosis de implantación de  $2 \times 10^{16}$ ,  $4 \times 10^{16}$  y  $1 \times 10^{17}$  Si/cm<sup>2</sup> con una energía de 2 MeV con lo cual se obtendría un alcance proyectado de aproximadamente 2.0  $\mu\text{m}$  y una anchura a la semialtura de 0.55  $\mu\text{m}$  de acuerdo a los cálculos de frenamiento electrónico y nuclear realizado por el programa TRIM mencionado en la sección 3.2. se eligió la muestra con la dosis de  $4 \times 10^{16}$  Si/cm<sup>2</sup> para relizar sobre ella una reimplantación con oro con la misma dosis y con una energía de 10 MeV con la cual se obtiene un alcance proyectado y una anchura a la semialtura similar a la del Si (2.2  $\mu\text{m}$  y 0.42  $\mu\text{m}$  respectivamente, empleando para estos cálculos el mismo programa). Una vez realizada la implantación sobre discos de cuarzo fundido de 2 cm de diámetro y 1 mm de espesor éstos se cortaron en 4 partes para llevar a cabo los tratamientos térmicos bajo atmósfera reductora con una mezcla de 90% nitrógeno y 10% hidrógeno, de modo que para cada dosis se obtuvo una muestra con un horneado de 600°C por 1 y 12 horas, y de 900°C por 1 hora y la parte sobrante se conservó sin tratamiento térmico para control. La temperatura del horno fue incrementada a razón de 25 °C/min a partir del ambiente hasta los 500 °C para los dos primeros tratamientos y hasta 700 °C para el tercero, y de 5 °C/min hasta llegar a la temperatura final.

Los espectros de absorción se obtuvieron a temperatura ambiente mediante un espectrofotómetro de doble haz Perkin Elmer 330 descrito en la sección 5.2, el cual maneja longitudes de onda en el intervalo de 185 a 2600 nm, esto es, desde el ultravioleta hasta el cercano infrarrojo, en este caso se analizó el intervalo de 200 a 700 nm. Con la información proporcionada por estos espectros, se analizaron las muestras mediante la obtención de los espectros de emisión empleando para ello el espectrofluorímetro descrito en la sección 5.3 y

analizando la región alrededor de los 600 nm excitando las muestras con un haz de 355 nm, esto es en la longitud de onda correspondiente a las bandas en los espectros de absorción como se verá posteriormente.

### Referencias

- [1] Komoda, T., Kelly, J., Cristiano, F., Nejm, A. et al Nucl. Instr. And Meth **B96**, 387 (1985)
- [2] Brebec et al. Acta Metalurgica **28**, 327 (1980)
- [3] Oliver, A. Proceedings of the Fourteenth International Conference of Applications of Accelerators in Reseach Industry. AP Pres New York 1105 (1997)
- [4] Manual de Operación del Espectrofotómetro de doble haz *Perkin-Elmer* modelo 330.

## CAPITULO VI

### 6.1 RESULTADOS

En las tres figuras siguientes (6.1,6.2,6.3) se muestran cuatro espectros de absorción en cada una, los cuales han sido desplazados sobre el eje vertical para mayor claridad, la línea punteada representa al eje X en cada una de ellas.

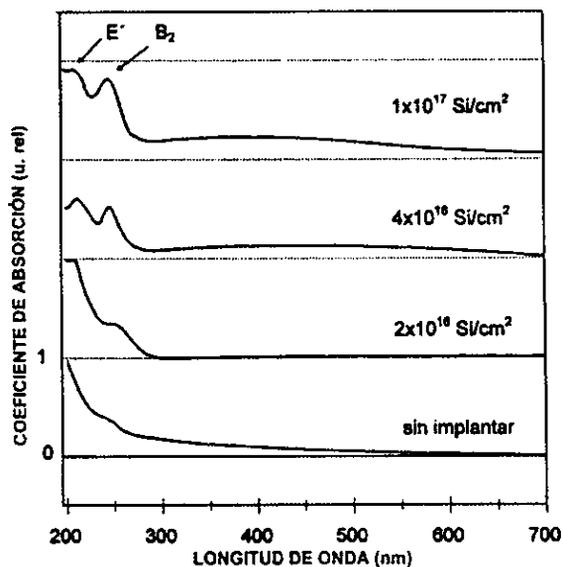


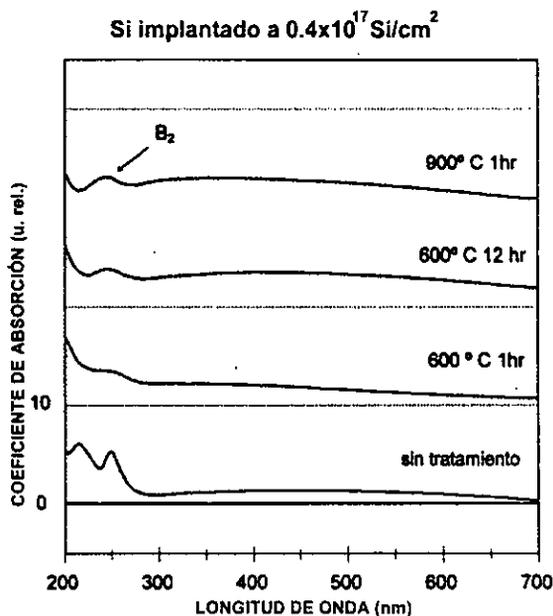
figura 6.1

La figura 6.1 muestra los espectros de absorción correspondientes a las muestras sin tratamiento térmico. El primer espectro (en la parte inferior) corresponde a la muestra de control sin implantación, en el cual se aprecia que la densidad óptica aumenta lentamente al disminuir la longitud de onda hasta aproximadamente 250 nm para después pronunciar su comportamiento creciente. A esta zona donde la pendiente crece de manera similar a una asíntota, se le llama borde de absorción. Cerca de éste se distingue una banda aproximadamente en los 248 nm la cual crece en intensidad al aumentar la dosis de implantación, asimismo, es evidente otra banda a 215 nm que aparece en el siguiente espectro con un comportamiento similar. Estas bandas, pueden asociarse a un tipo de

defectos producidos o favorecidos por los desplazamientos en el material como consecuencia de la implantación llamados  $E'$  y  $B_2$ , acerca de los cuales se discutirá mas adelante.

También, al aumentar la dosis de implantación, comienza a aparecer una pequeña banda ancha centrada aproximadamente en los 400 nm, la cual puede estar relacionada con la formación de nanopartículas en el material.

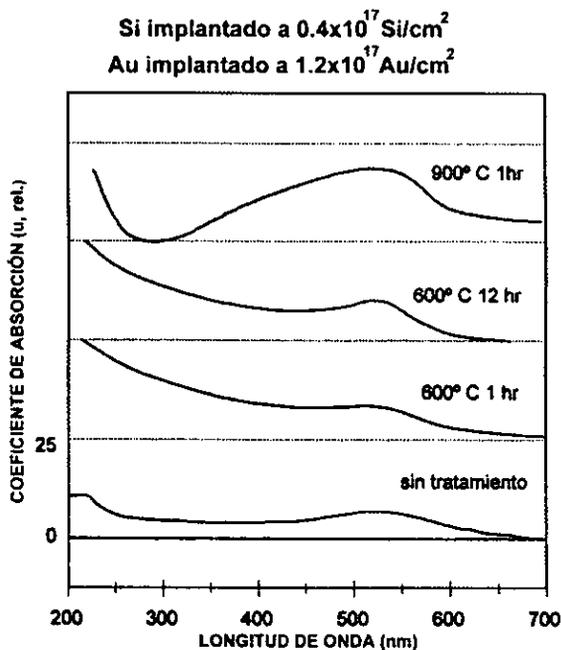
Como puede apreciarse en la figura 6.2, la cual muestra el efecto de los tratamientos térmicos para la implantación de  $0.4 \times 10^{17}$  Si/cm<sup>2</sup>, la banda en 214 nm desaparece por completo, mientras que la banda en 248 nm sólo disminuye notablemente sobre todo en el caso del tratamiento térmico a 600° C durante 1 hr.



*figura 6.2*

Como se mencionó anteriormente, se eligió la dosis media ( $0.4 \times 10^{17}$  Si/cm<sup>2</sup>) para realizar una reimplantación con Au, para ello se prepararon dos muestras adicionales con

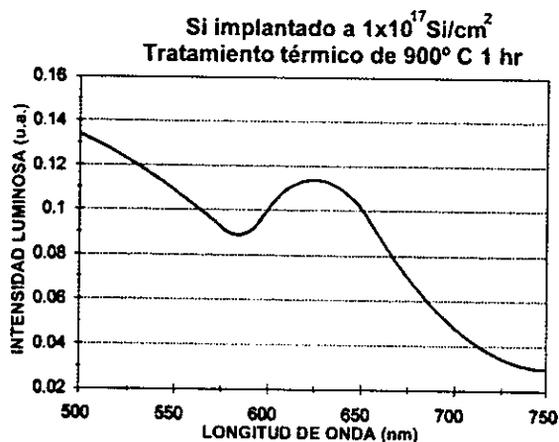
esta dosis de Si sobre las cuales se implantó Au a  $0.4 \times 10^{17}$  Au/cm<sup>2</sup> y a  $1.2 \times 10^{17}$  Au/cm<sup>2</sup>. La figura siguiente (6.3) muestra los espectros de absorción para esta última reimplantación



*figura 6.3*

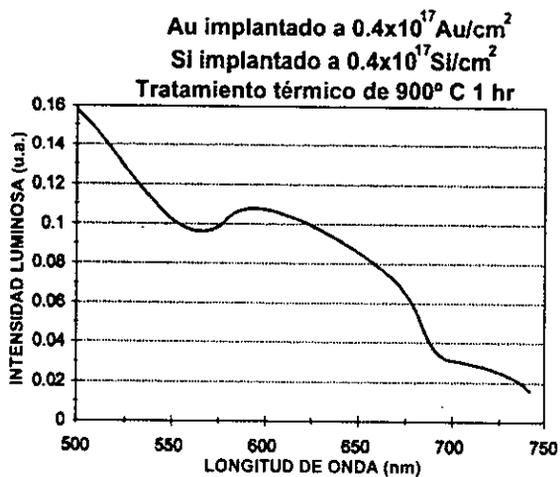
En este caso, aparece otra banda en 520 nm aproximadamente, la cual se superpone en la banda de 400 nm y la hace menos evidente, este comportamiento es más acentuado en la muestra con el horneado a 900° C.

En las muestras sin tratamiento térmico con implantación de silicio, no se detectó emisión en los espectros de fotoluminiscencia sin importar la dosis, sin embargo, en el caso del tratamiento a 900° C y con la dosis de  $1 \times 10^{17}$  Si/cm<sup>2</sup> se observó una débil emisión luminosa al rededor de 630 nm al excitar con 355 nm como puede verse en la figura 6.4.



*figura 6.4*

Ahora, en las muestras implantadas con  $0.4 \times 10^{17}$  Si/cm<sup>2</sup> y reimplantadas con  $0.4 \times 10^{17}$  Au/cm<sup>2</sup> no se detectó ninguna banda de emisión salvo en el caso del horneado a 900° C para la cual aparece una banda en la región de 600 nm como se muestra en la figura 6.5.



*figura 6.5*

En el caso de la reimplantación con  $1.2 \times 10^{17}$  Au/cm<sup>2</sup> para la misma dosis de  $0.4 \times 10^{17}$  Si/cm<sup>2</sup> se detectó una banda de emisión al rededor de los 630 nm a partir del primer tratamiento térmico como se muestra en la figura 6.6 donde puede apreciarse que se consigue una mayor eficiencia con el horneado a 900° C.

Cabe destacar que con la reimplantación con Au se consigue fotoluminiscencia en la misma región espectral donde aparece al implantar con una alta dosis de silicio.

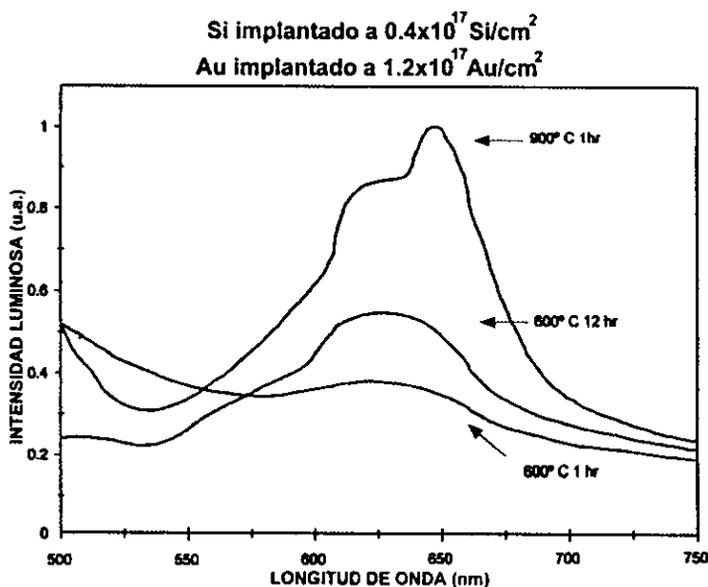


figura 6.6

ESTA TERCERA NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

## 6.2 DISCUSIÓN

La literatura consultada reporta bandas de absorción en  $\text{SiO}_2$  irradiado con iones en  $215 \text{ nm}$  y  $248 \text{ nm}$ , asociados con defectos en la composición molecular del  $\text{SiO}_2$ , ambas son consecuencia del daño por radiación al producir desplazamientos de los átomos de oxígeno generando vacancias.

La banda de absorción a  $520 \text{ nm}$  en las muestras reimplantadas con Au (figura 6.3) se relaciona con un fenómeno de resonancia en plasmones de superficie de cúmulos de Au formados dentro del  $\text{SiO}_2$ . Este efecto ya conocido es explicado por el modelo estándar de sistemas compuestos de Maxwell - Garnet el cual predice esta banda [1].

La banda centrada en  $215 \text{ nm}$  se relaciona con un tipo de defecto llamado  $E'$  el cual está formado por una molécula de  $\text{SiO}_2$  en la cual ha ocurrido un desplazamiento del átomo de oxígeno que liga ambos átomos de Si dejando uno de ellos con tres oxígenos en una configuración plana y el otro con los tres oxígenos restantes y un electrón desapareado lo cual forma una vacancia de oxígeno como se muestra en la figura 6.7.

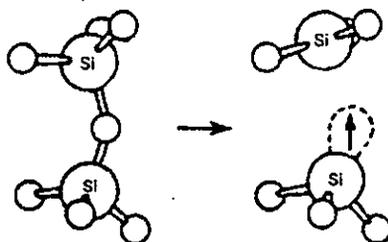


figura 6.7

Estos centros  $E'$  son importantes en la discusión ya que presentan, además de la banda de absorción antes mencionada, una emisión fotoluminiscente en la misma región espectral donde emite el silicio poroso (o en este caso las nanopartículas de Si) es decir en  $620 \text{ nm}$ . No obstante, es posible examinar este tipo de defectos dadas sus propiedades

paramagnéticas mediante la técnica conocida como *EPR* (Resonancia Paramagnética Electrónica) con la cual fueron analizadas las muestras antes y después de hornear, ya que estos defectos son disminuidos por los tratamientos térmicos como se observó en los espectros de absorción (fig. 6.2), y los resultados del análisis de resonancia paramagnética confirman que los defectos de este tipo desaparecen por completo al hornear a  $900^{\circ}\text{C}$  durante una hora, lo cual señala que la emisión observada en  $630\text{ nm}$  (figuras 6.5 y 6.6) es consecuencia de la formación de cúmulos de Si la cual es favorecida por la implantación de Au. En la sección 3.3 se menciona un cálculo del número de desplazamientos generados por un ion incidente, en el cual se llega a que esta cantidad crece linealmente con la energía del ion hasta llegar a un máximo a partir del cual se mantiene constante. Este número de desplazamientos máximo está dado por la ecuación 3.30 en la cual se observa que existe una dependencia con la masa del ion (ya que  $E_c$  se toma como  $M_2\text{ KeV}$ ) de modo que es claro que se obtiene un mayor número de desplazamientos al implantar Au que al implantar Si, por lo tanto los daños causados por el Au son importantes y favorecen la movilidad del Si dentro del  $\text{SiO}_2$  facilitando la formación de nanopartículas de Si. Lo cual concuerda con el resultado de obtener emisión con una dosis relativamente baja de éste elemento y reimplantar con Au o bien al aumentar la dosis de Si.

Ahora, la banda en  $248\text{ nm}$  es consecuencia de los defectos llamados  $B_2$  los cuales también presentan una emisión a  $288\text{ nm}$  y  $390\text{ nm}$ . La configuración de éste defecto se muestra en la figura 6.8 nótese que es similar al  $E'$  pero en este caso ambos átomos de Si tienen tres oxígenos y un electrón con espines apareados, de modo que presenta propiedades diamagnéticas y no es posible estudiarlos con *EPR*. Sin embargo sus propiedades de emisión no interfiere con el estudio de los efectos fotoluminiscentes de las nanopartículas de Si.

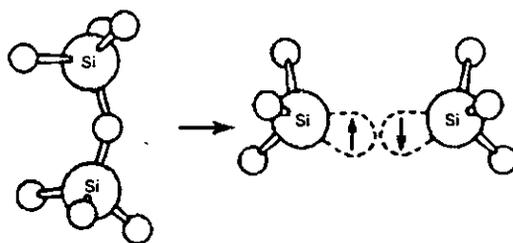


figura 6.8

Cabe mencionar que en relación a los resultados reportados en la literatura, las implantaciones realizadas para este trabajo fueron a una energía casi tres veces mayor, lo cual ocasiona que la densidad atómica en el centro de la distribución sea menor y ésta sea mas ancha como puede verse en la figura 6.9 donde se muestra la simulación de dos implantaciones con la misma dosis y a energías que difieren en un factor 5.

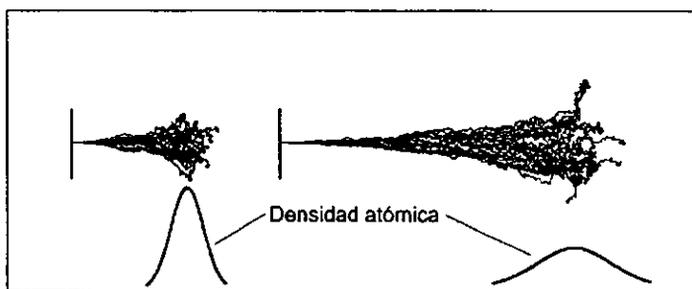


figura 6.9

Lo anterior tiene como consecuencia que el formar nanopartículas de Si dentro del material sea más difícil debido a la baja densidad atómica, en cuanto al daño por radiación, éste es similar en ambos casos, ya que está relacionado con el frenamiento nuclear que predomina cuando el ion llega a tener una energía tal que su velocidad sea considerablemente menor a la de los electrones de los átomos del blanco.

No obstante al aumentar la energía se obtiene una implantación más profunda y por lo tanto menos vulnerable al manejo de las muestras durante su estudio.

En conclusión, la formación de nanopartículas de Si dentro de SiO<sub>2</sub> responsables de una emisión fotoluminiscente equivalente a la del silicio poroso mediante la implantación, es favorecida por la implantación subsecuente de iones de Au, encontrando en particular que el SiO<sub>2</sub> implantado a dosis de  $0.4 \times 10^{17}$  Si/cm<sup>2</sup> a una energía de 2 MeV no presenta fotoluminiscencia detectable aun después de los tratamientos térmicos, y que sin embargo, al reimplantar con Au y hornear a 900° C durante una hora, se presenta una emisión en 630 nm.

#### Referencias

[1] Cohen R.W, et al. Physical Review B, **8** 3689 (1973)

## APENDICE

### FORMULA UNIVERSAL DE MONTENEGRO, CRUZ Y VARGAS DEL FRENAMIENTO ELECTRÓNICO

En el artículo indicado en la referencia [11] del capítulo 2, el autor calcula una sección eficaz para la interacción de protones incidiendo en un sólido con número atómico  $Z_2$  como sigue:

$$S_p^0 = Kue^{-u} + au^{-2} \ln(1 + bu^2) - c(1 + du^2)^{-1} + fu^4(1 + eu^2)^{-3}$$

y el poder de frenamiento correspondiente:

$$S_p = S_p^0 - \frac{\beta(gu^2)^{\frac{3}{2}}}{6b^2(1 + gu^2)^4}$$

donde  $\beta$  es una constante empleada para ajustar variables, de modo que si  $a$  está en  $10^{15} \text{ eV cm}^2/\text{atomo}$ , toma el valor de  $1$ , y entonces  $\beta$  toma el valor de:

$$\beta = 9.5616Z_2$$

y la velocidad del ion incidente está incluida en  $u$  de la siguiente forma:

$$u = \frac{v}{v_0}$$

y

$$b = \frac{4I_H}{\langle I \rangle}$$

$$d = \frac{K}{c} + \frac{b}{2} + \frac{Z_2^*}{9Z_2}$$

con  $I_H = 13.595 \text{ eV}$ ,  $\langle I \rangle$  es el valor promedio de la energía (en  $\text{eV}$ ) de ionización de los átomos del blanco,  $K$  es una constante con unidades de  $10^{15} \text{ eV cm}^2/\text{atomo}$  que puede ser calculada con la teoría de Lindhard,  $Z_2^*$  es el número de electrones externos de los átomos del blanco. Ambas cantidades aparecen tabuladas en el artículo citado. Las demás literales son calculadas como siguen:

$$c = ab$$

$$e = \frac{3b^2d}{Z_2^{1.4}bd^2 + b^2 + d^2}$$

$$f = \frac{ce^3}{d}$$

$$g = \frac{2\beta}{3c}$$

La generalización para el frenamiento electrónico de iones pesados con número atómico  $Z_1$  es como sigue:

$$S_{HI} = Z_{HI}^2 \left( \frac{Z_{HI}^*}{Z_p^*} \right)^2 S_p$$

donde  $Z_{HI}^*$  es la carga efectiva del proyectil y  $Z_p^*$  es el valor correspondiente para protones en el mismo material y con la misma velocidad. El cociente involucrado puede calcularse como sigue:

$$\frac{Z_{HI}^*}{Z_2^*} = \frac{1 - e^{-\alpha u} - \frac{1}{6} \alpha u e^{-2\alpha u}}{1 - e^{-u} - \frac{1}{6} u e^{-2u}}$$

con

$$\alpha = Z_1^{-\frac{2}{3}}$$