



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

Dispositivo nanoestructurado que sirva de base para la construcción de una guía de onda usada para la transferencia de información.

T E S I S

Para obtener el título de
INGENIERA ELÉCTRICA – ELECTRÓNICA

P R E S E N T A:

SANDRA SÁNCHEZ ESCOBAR



DIRECTORA DE TESIS:

DRA. ALEJANDRA LÓPEZ SUÁREZ

2013

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar mi mayor gratitud a la *Universidad Nacional Autónoma de México* que me permitió formarme como ingeniera.

A mis padres **Irene** e **Isaac** a quienes les debo todo lo que soy y son mi mayor motivo para salir adelante.

A mis hermanos y hermanas Humberto, Aurora, María, Gaby, Jesús, Lucía, Nancy, Delia e Isaac quienes siempre me apoyaron en todo momento. Los quiero mucho.

A mi asesora la **Dra. Alejandra López Suárez** por permitirme ser parte de su proyecto, por su apoyo, sus valiosas recomendaciones y sobre todo por su confianza y amistad.

Agradezco a los proyectos DGAPA-PAPIIT IN-100510 e IN-100213, y CONACYT 99224 por el apoyo en becas y material para la realización de esta tesis.

Se agradece el apoyo técnico del señor Karim López, Ing. Francisco Javier Jaimes e Ing. Mauricio Escobar por su colaboración en el manejo del acelerador Pelletron y su ayuda en la implantación de las muestras.

Al M. en C. Juan Gabriel Morales por su ayuda en los tratamientos térmicos de las muestras.

A la Dra. Marel Monroy y la Dra. Citlalli por su valiosa colaboración para la realización de las pruebas de fotoluminiscencia de las muestras.

A mis sinodales: Ing. Gabriel Alejandro Jaramillo Morales, M. I. Eduardo Enrique Ramírez Sánchez, Dra. Margarita Navarrete Montesinos y la Dra. Laura Oropeza Ramos gracias por la revisión de este trabajo, comentarios y correcciones acertadas.

A mis amigos y compañeros de clase y a los profesores de la Facultad de Ingeniería, que me acompañaron y compartieron su conocimiento a lo largo de mi formación profesional dentro de la Universidad.

Resumen

En este trabajo se presenta el proceso para la construcción de un dispositivo nanoestructurado capaz de modificar de manera modulada una señal de luz. Este dispositivo consta de una matriz de SiO_2 , la cual contiene en su interior nanopartículas de Cu y nanocristales de Si.

La importancia de este dispositivo radica en que, aunque está compuesto de silicio, y éste presenta el inconveniente de que en bulto posee una banda de gap indirecta y no es un buen emisor de luz, al bajar la dimensión de este elemento hasta el nivel nanométrico, se presenta la emisión de una señal fotoluminiscente, haciendo posible la incorporación del silicio en la rama Opto-electrónica.

Durante la primera parte de la investigación se utilizó el Acelerador de Partículas PELLETRON del Instituto de Física de la UNAM (IFUNAM) para implantar los iones de cobre y silicio en la matriz de SiO_2 . Para el caso de los iones de silicio se utilizó una sola energía durante su implantación; mientras que para el caso de los iones de cobre se implantaron a tres diferentes energías, con el fin de generar tres sistemas nanoestructurados para obtener diferentes grados de amplificación de la señal fotoluminiscente.

Después de cada implantación, la matriz de dióxido de silicio se sometió a un tratamiento térmico con el fin de nuclear las nanopartículas tanto de Cu como de Si. Para producir los nanocristales de silicio se utilizó una atmósfera reductora (50% H₂+50% N₂), mientras que para el caso del cobre se utilizó una atmósfera oxidante (aire).

Los métodos experimentales para caracterizar las muestras consistieron en la técnica analítica de origen nuclear RBS, la cual permitió determinar la distribución y la composición de las impurezas implantadas en la matriz. Para este caso se utilizó la línea de análisis de RBS del Acelerador de partículas Pelletron del IFUNAM.

Los experimentos de fotoluminiscencia (PL) se llevaron a cabo con dos fuentes láser: la primera fue de Argón con una longitud de onda de 480 nm, con la cual no se logró detectar alguna señal de PL, para el segundo caso se utilizó un láser de excímero de alta

Resumen

potencia pulsado de 248 nm. Los datos experimentales presentados en esta tesis son los realizados con este láser.

ÍNDICE

CAPITULO 1

Introducción	1
---------------------------	----------

CAPITULO 2: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

2.1 Silicio como base del desarrollo de la electrónica	8
2.1.1 Propiedades del silicio	9
2.1.2 Silicio semiconductor.....	10
2.1.3 Silicio extrínseco.....	14
2.1.4 Compuestos de silicio	16
2.2 Problemas del silicio en la rama optoelectrónica y solución para ser usado en esta área	16
2.2.1 Interacción fotón-electrón	17
2.2.2 ¿Por qué el silicio no emite luz?	18
2.2.3 Solución para que el silicio sea utilizado en optoelectrónica.....	21
Referencias	23

CAPITULO 3: DESARROLLO TEÓRICO

3.1 Nanocristales de silicio	24
3.1.1 Confinamiento cuántico	24
3.1.2 Nanoestructuras	26
3.1.3 Puntos cuánticos de silicio (nanocristales o nanoestructuras)	26
3.1.4 Tecnicas para producir nanocristales de silicio (Si-nc) en un matriz de SiO_2	27
3.2 Implantación iónica	29
3.2.1 Implantación	29
3.2.2 Como interaccionan los iones positivos con la materia	30
3.2.3 Poder de frenado	31
3.2.4 Frenado electrónico	32
3.2.5 Frenado nuclear	32

Índice

3.2.6 Alcance lineal	33
3.2.7 Distribución de los iones en materia	35
3.2.8 Efectos de la implantación de iones en la materia	37
3.2.9 Daños por implantación	38
3.2.10 Colisiones de desplazamiento	49
3.3 Retrodispersión de Rutherford (RBS)	41
3.3.1 Concepto	41
3.3.2 Principios físicos de RBS	42
3.3.2.1 Factor cinemático de dispersión	42
3.3.2.2 Sección eficaz diferencial	44
3.3.3 Análisis de un espectro	45
3.3.4 Programa de simulación SIMNRA	47
3.4 Luminiscencia (PL)	49
3.4.1 Fotoluminiscencia	50
3.4.2 Fotoluminiscencia en nanocristales de silicio (Si-nc)	51
Referencias	53

CAPITULO 4: DESARROLLO EXPERIMENTAL

4.1 Acelerador Pelletron	55
4.2 Implantación de iones.....	59
4.2.1 Implantación de iones de silicio	59
4.2.2 Implantación de iones de cobre	61
4.3 Horno para tratamiento térmico.....	64
4.3.1 Horno	64
4.3.2 Tratamiento térmico	65
4.4 Experimento RBS	65
4.5 Sistema para estudio de fotoluminiscencia	68

CAPITULO 5: RESULTADOS

5.1 Composición del material usando la técnica RBS.....	73
5.2 Distribución de las nanopartículas de cobre implantadas en la matriz de SiO_2	75
5.3 Estudio de fotoluminiscencia (PL)	78

CAPÍTULO 6: CONCLUSIONES

6.1 Conclusiones.....	90
-----------------------	----

Referencias	93
--------------------------	----

APÉNDICE A

Programa de simulación SIMNRA.....	94
------------------------------------	----

CAPÍTULO 1

Introducción

Los chips de silicio facilitan la manipulación de flujos de electrones. A ellos debemos la gran cantidad de funciones que hacen que nuestras computadoras, teléfonos móviles y otros dispositivos electrónicos nos resulten tan útiles. Si los circuitos integrados de silicio generaran y controlaran también haces de luz, posibilitarían el desarrollo de técnicas novedosas y baratas adaptables a múltiples aplicaciones distintas; pero durante mucho tiempo, la propia naturaleza del silicio había imposibilitado tan ambicioso reto.

La sustitución de las tradicionales conexiones y cables de cobre por medios de transmisión ópticos elevaría en órdenes de magnitud la velocidad de transmisión de datos, en comparación con la capacidad de la técnica actual disponible. Dispositivos ópticos incorporados en los chips de silicio transferirían sin esfuerzo archivos digitales enormes, como vídeos de alta definición, a velocidades de 10 gigabits por segundo (unas 10,000 veces más rápido) [1].

La microelectrónica basada en semiconductores y circuitos integrados ha sido bien desarrollada, ha creado fundamentos sólidos para diversas aplicaciones, especialmente en el procesamiento y transmisión de la información. Sin embargo, el mayor desarrollo que exige la transmisión de información está siempre limitado por el rendimiento de los componentes electrónicos [2].

A medida que evoluciona la tecnología, se va acrecentando la necesidad de transmitir y procesar información más rápido; sin embargo, lo anterior implica cambios en los dispositivos microelectrónicos actuales. Como primera solución a este reto se pensó en lograr una mayor miniaturización de los circuitos, y ciertamente, la microelectrónica ha hecho un muy buen trabajo en este aspecto. Si se lograra una mayor miniaturización de los dispositivos sería posible integrar circuitos más complejos, pues este proceso conlleva la reducción de las capacidades de carga, al mismo tiempo que mejora la capacidad para manejar corrientes. De esta manera, un circuito electrónico desarrollado sobre una

tecnología con un mayor grado de miniaturización incorpora directamente un aumento de la velocidad de respuesta del mismo.

Desafortunadamente a pesar de que la miniaturización de los dispositivos mejora la velocidad de respuesta, también trae consigo algunos factores negativos. Tales factores se relacionan con el elevado número de componentes que forman el dispositivo, provocando que la tendencia de consumo de potencia aumente, con el consiguiente aumento de la temperatura y los retardos que introducen las interconexiones.

Como una alternativa a este problema se pensó en la fotónica, la cual emplea a los fotones como portadores de la información, y que podría ofrecer la solución a las limitaciones de los dispositivos electrónicos, dado que los componentes ópticos ofrecen mayores anchos de banda y un reducido poder de disipación. Sin embargo, los componentes dieléctricos en fotónica están limitados en su tamaño por la ley de la difracción (fenómeno por el cual, cuando la longitud de onda de la luz es mayor que el espacio por el que viaja, se produce una deformación en la onda y se difracta; es decir, cambia de dirección). Tal efecto provoca que la miniaturización de los dispositivos fotónicos tenga un límite.

Sería extraordinario poder juntar las ventajas tanto de la fotónica como de la electrónica, es decir, la velocidad de la primera y la miniaturización de la segunda.

Investigaciones recientes se están desarrollando para transmitir señales ópticas a través de minúsculas estructuras a escala nanométrica. En la década de 1980 investigadores experimentalmente confirmaron que la dirección de las ondas de luz en la interfaz entre un metal y un dieléctrico puede, bajo las circunstancias correctas, inducir una interacción resonante entre las ondas y los electrones libres en la superficie del metal. Las oscilaciones de los electrones en la superficie coinciden con las del campo electromagnético fuera del metal. El resultado es la generación de plasmones de superficie, los cuales son básicamente modos electromagnéticos que se propagan por la superficie de un metal, cuando éste tiene dimensiones nanométricas. Estos modos permiten la alta concentración de luz en volúmenes de dimensiones mucho menores que la longitud de onda de luz incidente (figura 1.1).

Introducción

De esta manera si se, diseñan interfaces metal-dieléctrico se pueden generar plasmones de superficie que son los encargados de transmitir las señales de luz a través de un material. Los plasmones se forman en la interfaz entre un material dieléctrico y las nanopartículas metálicas inmersas en un dieléctrico.

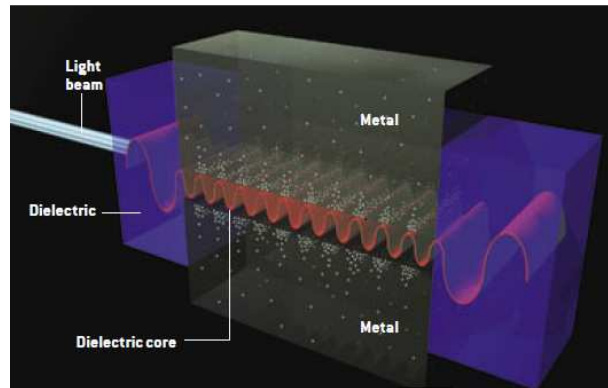


Figura 1.1 Dispositivo plasmónico que consta de un dieléctrico en contacto con nanopartículas metálicas. Con este dispositivo es posible producir una guía de ondas de plasmones, la cual confina la señal óptica. Los investigadores han construido guías de ondas de ranura con anchos tan pequeños como 50 nanómetros-casi del mismo tamaño que los más pequeños circuitos electrónicos. El dispositivo plasmónico puede transmitir mucha más información que un alambre usado en la electrónica. Reproducida de [3].

En el año 2000 un grupo de investigadores del Instituto Tecnológico de California dio el nombre de “Plasmónica” a esta nueva disciplina, convencidos que la investigación en esta área podría dar lugar a una nueva clase de dispositivos. Ellos pensaron que los circuitos plasmónicos poseerían la gran capacidad de llevar señales ópticas y corrientes eléctricas a través del mismo circuito. De esta manera unirían las ventajas tanto de la electrónica como de la fotónica; es decir, velocidad y miniaturización, tal como se observa en la figura 1.2.

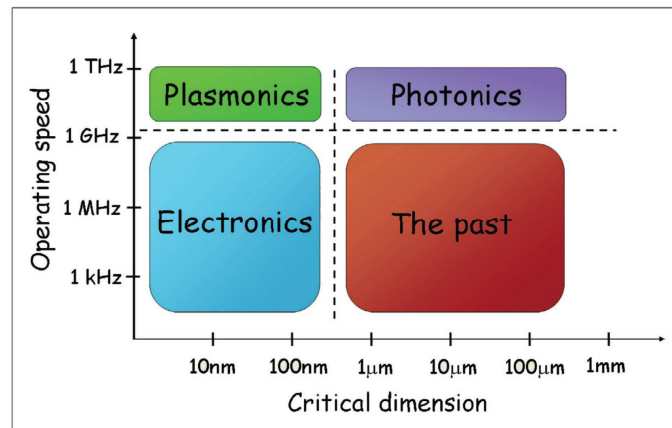


Figura 1.2. La gráfica muestra la velocidad de operación de los dispositivos con relación a las dimensiones de los mismos para diferentes tecnologías. En el pasado los dispositivos eran relativamente lentos y grandes. La industria de los semiconductores ha realizado un buen desempeño en el escalamiento de dispositivos electrónicos a dimensiones nanométricas, pero su velocidad de operación se ve superada por la fotónica, la cual tiene una excelente velocidad de operación pero sus dimensiones son mayores. Por el contrario, la plasmónica ofrece las ventajas de la electrónica y la fotónica: el tamaño de la electrónica y la velocidad de la fotónica. Reproducido de [4].

Sin duda, las posibles aplicaciones de la plasmónica son amplias y prometedoras en áreas tan diferentes como la tecnología de las comunicaciones y la salud. Las aplicaciones incluyen la transmisión de información, la conmutación óptica, la regeneración de señales, el multiplexado de alta velocidad, la computación cuántica, así como la medicina.

En este trabajo de tesis se desarrolla un dispositivo nanoestructurado que consta de una matriz de dióxido de silicio (dieléctrico), dentro de la cual se forman nanocristales de silicio y nanopartículas de cobre. Se llevan a cabo simulaciones de las condiciones experimentales utilizando el programa SRIM, el cual permite obtener los parámetros experimentales para implantar los iones de silicio y los de cobre en la matriz de dióxido de silicio, esto se realiza usando el acelerador de partículas tipo Pelletron del Instituto de Física de la UNAM.

La muestra se somete a un tratamiento térmico que permite la formación de las nanoestructuras y posteriormente se realizan estudios usando técnicas de origen nuclear y fotoluminiscencia. Se espera un aumento en la fotoluminiscencia de las nanopartículas de silicio, tal como se ha observado en la plata. Utilizando la técnica de origen nuclear RBS, se obtiene el perfil de concentración del cobre implantado.

Los objetivos particulares de este trabajo son:

1. Obtener las condiciones experimentales necesarias (energía y ángulo de implantación, así como fluencia) en el acelerador Pelletron del Instituto de Física, para poder realizar la implantación de los iones de silicio y de cobre.
2. Realizar el tratamiento térmico a las muestras para nuclear los defectos creados en la matriz de sílice durante la implantación y formar las nanopartículas de silicio y cobre.
3. Caracterizar las muestras con técnicas ópticas como la fotoluminiscencia, así como la técnica analítica de origen nuclear con aceleradores RBS.

La estructura del trabajo de investigación que se presenta en esta tesis será la siguiente:

En el capítulo 1 se da una breve introducción al tema.

El capítulo 2 plantea el problema que se pretende desarrollar en este trabajo. se describe el gran dominio del silicio como elemento principal para el desarrollo de la microelectrónica y por qué no puede ser utilizado en áreas de desarrollo tan importantes como la optoelectrónica. Por último se plantea la posible solución para que el silicio sea utilizado como emisor de luz.

El capítulo 3 desarrolla los fundamentos teóricos relacionados con las características del silicio cuando es llevado a una escala nanométrica, los conceptos relacionados con la implantación de iones, la técnica de origen nuclear RBS para conocer la distribución de las nanopartículas de cobre y silicio y la fotoluminiscencia.

El capítulo 4 presenta el desarrollo experimental llevado a cabo para el diseño y construcción del dispositivo nanoestructurado: desde la implantación de iones hasta la parte de la formación de los nanocristales y las nanopartículas en la matriz de dióxido de silicio y los experimentos de RBS y fotoluminiscencia.

El capítulo 5 y 6 se presentan los resultados y conclusiones obtenidos de los experimentos. Distribución y profundidad de las nanopartículas de cobre y silicio así como la fotoluminiscencia de los dispositivos nanoestructurados implantados a diferentes energías.

Introducción

Por último, se presenta el apéndice A, donde se explica con más detalle el programa de simulación SIMNRA utilizado para determinar la composición de las muestras estudiadas.

Referencias

- [1] Bahram Jalali. “*Láseres de silicio*”, Investigación y ciencia, abril 2007.
- [2] Cheng-Ping Huang and Yong-Yuan Zhu. “*Plasmonic: Manipulating Light at the Subwavelength Scale*”, National Laboratory of Solid State Microstructure, Nanjing University, Nanjing 210093, China.
- [3] Harry A. Atwater. “*The promise of Plasmonics*”. Scientific American 2007.
- [4] Rashid Zia, Jon A. Schuller, Anu Chandran, and Mark L. Brogersman. “*Plasmonics: the next chip-scale technology*”. Geballe Laboratory for Advanced Materials, Stanford University, Materials today, 2006.

CAPÍTULO 2

Planteamiento del problema

2.1 Silicio como base del desarrollo de la electrónica

El desarrollo de la electrónica y de sus múltiples aplicaciones fue posible gracias a la invención del transistor ya que éste superó, ampliamente, las dificultades que presentaban sus antecesores, las válvulas. En efecto, las válvulas inventadas a principios del siglo XX, habían sido aplicadas exitosamente en telefonía como amplificadores y, posteriormente, popularizadas en radios y televisores; sin embargo, presentaban el inconveniente que consumían mucha energía para funcionar. Los transistores desarrollados en 1947 por los físicos W. Shockley, J. Bardeen y W. Brattain, resolvieron todos los inconvenientes presentes en las válvulas y abrieron el camino que, junto con otras invenciones –como la de los circuitos integrados–, potenciarían el desarrollo de las computadoras, electrodomésticos y hasta teléfonos celulares [3].

Durante los diez años posteriores a la invención del primer transistor se realizaron importantes adelantos en este campo: se inventaron distintos tipos de transistores (de punto, de juntura, de campo), basados en distintas propiedades básicas; se emplearon distintos materiales, inicialmente, el germanio (1948) y, posteriormente, el silicio (1954) que domina la industria de los semiconductores de la actualidad (95% de los materiales semiconductores usados en la industria electrónica son hechos de silicio); se logró construir una gran cantidad de transistores, otros elementos y los circuitos para acoplarlos directamente sobre una oblea de silicio, a lo que se le dio el nombre de circuito integrado.

2.1.1 Propiedades del silicio

El silicio (Si) tiene número atómico 14, lo cual significa que un átomo de Si aislado tiene 14 protones (partículas cargadas positivamente) en su núcleo y 14 electrones (partículas cargadas negativamente) orbitando alrededor de él como un sistema solar en miniatura. Diez de los 14 electrones están, estrechamente, ligados al núcleo y tienen menos importancia para las uniones químicas con otros elementos. Los cuatro electrones restantes determinan cómo los átomos de silicio se organizan entre sí para formar el material de silicio sólido.

El silicio pertenece a la categoría de los metaloides, lo que quiere decir que sus propiedades son intermedias entre los metales y los no metales. Los metaloides son semiconductores antes que conductores.

Es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre (25% en peso) después del oxígeno, esto hace que su utilización sea mayor pues el costo de fabricación es más bajo en comparación con otros materiales semiconductores.

Se presenta en fase amorfa y cristalina. El silicio en forma amorfa contiene átomos que no presentan un orden bien definido; una de las aplicaciones del silicio en fase amorfa es para dispositivos fotovoltaicos. En el silicio cristalino los átomos poseen un orden estricto que se repite, además es la base de la industria microelectrónica.

En la corteza terrestre el silicio normalmente no se encuentra en estado puro, sino en forma de sílice (compuesto de silicio y oxígeno, SiO_2 , comúnmente aparece en la forma de cuarzo) y silicatos (grupo de minerales de mayor abundancia que forman las rocas).

Cuando los átomos de silicio se unen para formar un sólido, lo hacen a través de enlaces covalentes formando una estructura cristalina, como se muestra en la figura 2.1. Los enlaces covalentes tienen las siguientes características:

- ❖ Se comparten electrones con dos o más átomos. De esta manera la capa electrónica exterior del átomo se encuentra llena.

- ❖ Es un enlace fuerte.
- ❖ Presentan baja ductilidad y baja conductividad eléctrica y térmica.
- ❖ Al tratarse de enlaces fuertes, para romper un enlace, es necesario aplicar altas energías.

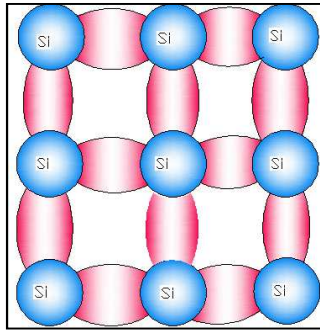


Figura 2.1 Representación de un cristal de silicio ilustrando los enlaces covalentes

2.1.2 Silicio semiconductor

Los materiales en fase sólida se pueden clasificar en tres grandes grupos: *aislantes*, *semiconductores* y *conductores*, esta clasificación se realiza con base en las propiedades de conductividad de cada grupo de materiales. La conductividad de un material está dada por su estructura electrónica.

La figura 2.2 muestra un cuadro comparativo de los rangos típicos de conductividad y resistividad para aislantes, semiconductores y conductores. Se puede ver que los aislantes poseen gran resistividad, del orden de 10^{18} [$\Omega \cdot cm$]. El caso del cuarzo y el vidrio son ejemplos típicos de materiales aislantes, con una resistividad muy grande. En el caso de los conductores como la plata y el cobre, éstos poseen una alta conductividad eléctrica, con valores en el intervalo de $10^6 - 10^5$ [S/cm] y por tanto su resistividad al paso de la corriente eléctrica es mínima, siendo el cobre el conductor eléctrico más utilizado debido a su bajo costo y alta conductividad.

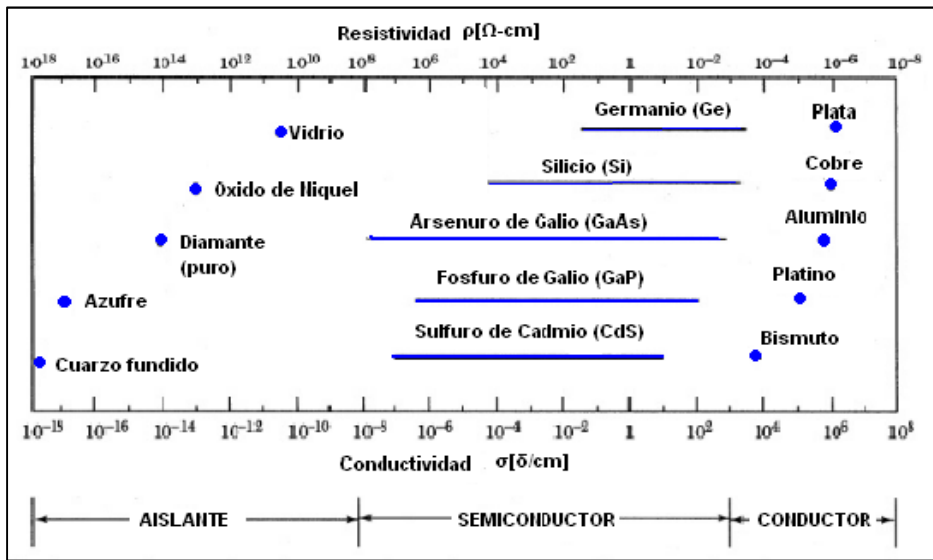


Figura 2.2 Rangos típicos de resistividad y conductividad para aislantes, semiconductores y conductores. Tomada de [4]

Entre los aislantes y los conductores se encuentran los “semiconductores” cuya principal virtud radica en que se puede hacer variar su conductividad mediante diseño; es decir, es posible fabricarlos con las características necesarias para alguna aplicación específica. La conductividad de un semiconductor es generalmente sensible a la temperatura, la iluminación, el campo magnético así como a la adición de impurezas. Esta sensibilidad los convierte en algunos de los materiales más importantes para aplicaciones en la electrónica.

El silicio es un material excelente para su aplicación como semiconductor, aunque su conducción es baja cuando se tiene silicio puro. Los semiconductores pueden conducir mediante dos mecanismos: por medio de e^- (electrones) o h^+ (huecos). Para entender mejor este mecanismo es importante conocer el concepto de “Bandas de Energía” de los materiales en fase sólida.

En 1930, se desarrolló la teoría de bandas de energía de los sólidos. Los niveles de energía en los cristales están tan juntos, que no es posible considerar niveles discretos de energía; no obstante, se consideran “bandas de energía” (Figura 2.3).

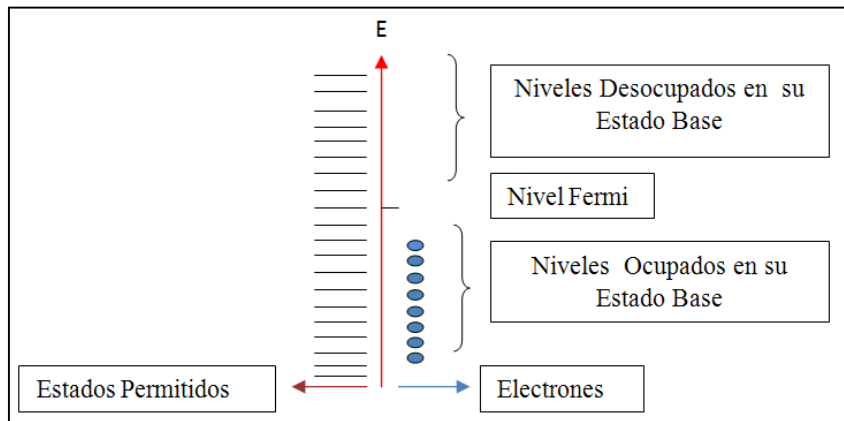


Figura 2.3 Representación de los niveles ocupados y desocupados en un semiconductor.

Los niveles de energía que se encuentran ocupados, y donde la energía es menor, forman la banda de valencia. A medida que los electrones obtienen energía y se excitan, es posible que salten a la banda de conducción. Ambas bandas (valencia y conducción) están separadas por un intervalo de energía prohibida (llamado *Band-gap* o nivel de Fermi) que corresponde a la energía que debe recibir un electrón de la banda de valencia para pasar a la banda de conducción.

Las bandas de energía son diferentes para cada tipo de material. Las principales diferencias eléctricas entre los aislantes, semiconductores y conductores radican en el tamaño del band gap y en la manera en la que los electrones ocupan estas bandas de energía, tal como se muestra en la figura 2.4.

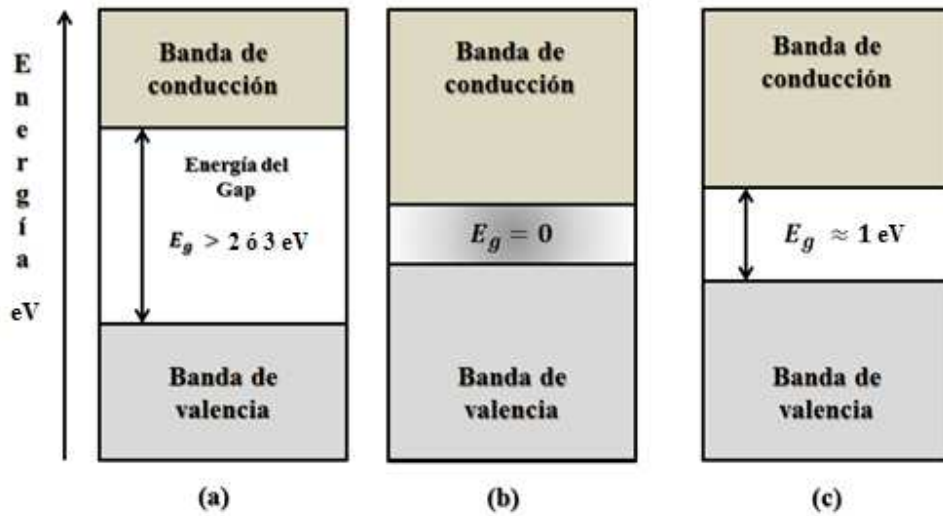


Figura 2.4 Diagrama de niveles de energía: (a) Aislante, (b) Conductor y (c) Semiconductor

Entender el concepto de las bandas de energía es de suma importancia para comprender el proceso de conducción del silicio. Supongamos que tenemos un cristal de silicio puro, al aplicarle una variación de temperatura (o energía), el enlace covalente que forma la estructura se rompe; como consecuencia, algunos electrones pueden saltar de la banda de valencia (BV) a la banda de conducción (BC), generándose *huecos* en la BV. Los huecos (h^+) pueden tratarse como partículas iguales al e^- pero con carga positiva. Es a través de los electrones que saltan de la BV a la BC que se lleva a cabo la conducción en el silicio puro (intrínseco) (figura 2.5).

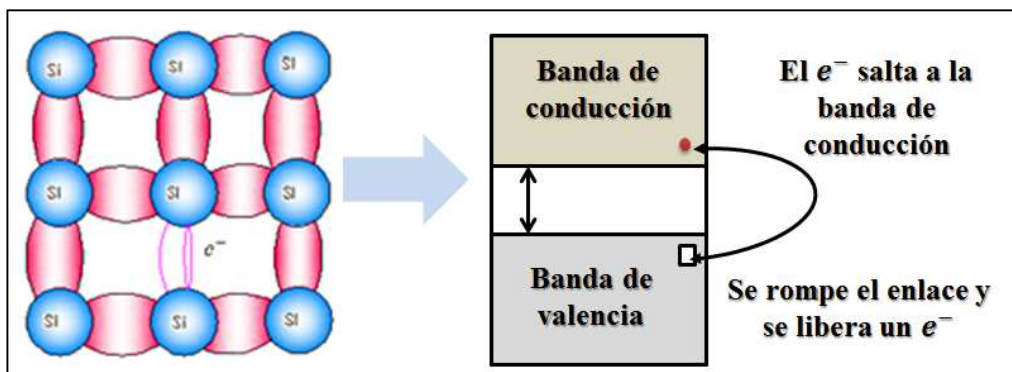


Figura 2.5 Ilustración del proceso de conducción del silicio

En el caso de los aislantes se necesitaría una energía demasiado grande para extraer un e^- de la BV y llevarlo hasta la BC. Esta es la razón por la cual estos materiales no son buenos conductores. En el caso de los conductores, éstos tienen traslapadas sus bandas de energía, por lo que los electrones fluyen libremente y sin ningún tipo de excitación externa desde la BV hasta la BC; es decir, la energía del Gap es igual a cero.

2.1.3 Silicio Extrínseco

La conductividad de los semiconductores intrínsecos en este caso del silicio no es del todo conveniente pues depende de la energía térmica para romper los enlaces covalentes. Otra forma de aumentar la conductividad en los semiconductores y en particular en el silicio es adicionar impurezas. Un material semiconductor que es dopado se le denomina *Semiconductor Extrínseco*.

La tabla 2.1 muestra algunos elementos de la tabla periódica relacionada con los semiconductores. Los elementos utilizados para dopar a los semiconductores, tales como el silicio, pertenecen a los grupos III y V, tal como se observa en esta tabla.

Tabla 2.1

Periodo	Columna	III	IV	V	VI
2		B	C	N	O
		Boro	Carbón	Nitrógeno	Oxígeno
3	Mg	Al	Si	P	S
	Magnesio	Aluminio	Silicio	Fósforo	Azufre
4	Zn	Ga	Ge	As	Se
	Zinc	Galio	Germanio	Arsénico	Selenio
5	Cd	In	Sn	Sb	Te
	Cadmio	Indio	Estaño	Antimonio	Telurio
6	Hg		Pb		
	Mercurio		Plomo		

Si al silicio le adicionamos impurezas como el galio, el enlace covalente que se forma tendría la forma que se observa en la figura 2.6. De esta manera no es posible completar los

enlaces covalentes porque el galio solo tiene 3 e^- de valencia y el silicio tiene 4. Por esta razón, para que se complete el enlace, es necesario que se cree un hueco h^+ en la BV que se puede llenar con un e^- . De esta manera, los h^+ actúan como aceptores de e^- . Un e^- puede ganar energía E_a (energía aceptora) a manera de crear h^+ en la BV. El hueco se mueve y transporta de esa manera carga. Cuando el silicio conduce mediante huecos se le denomina *Silicio Extrínseco tipo P*.

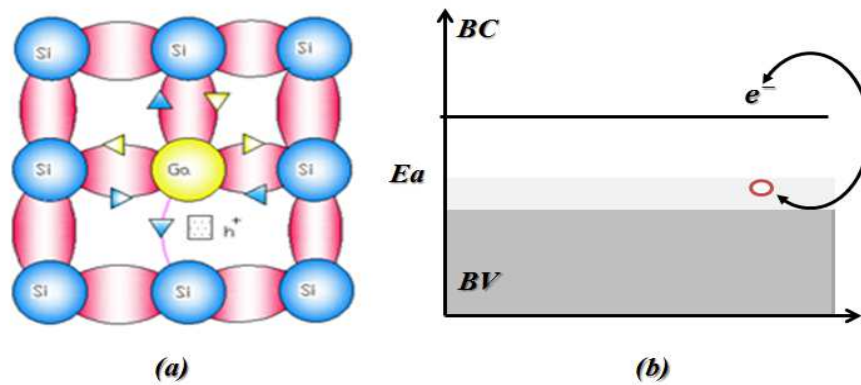


Figura 2.6 Representación del enlace covalente (a) y bandas de energía (b) del silicio dopado con galio (Ga).

Si ahora se adiciona antimonio (Sb) que tiene 5 electrones de valencia, solo 4 e^- del Sb participan en el enlace covalente (figura 2.7), por lo tanto queda un e^- extra en un nivel de energía justo debajo de la BC, que se conoce como *Donor o donante*. Debido a que este electrón no está ligado y a que la separación energética entre los niveles del donante y la BC es muy pequeña, sólo requiere de una energía mínima E_d para pasar a la BC. Los semiconductores contaminados con átomos donantes se denominan semiconductores tipo *N* y el silicio es un ejemplo de ellos, por lo que también se le conoce como *Silicio Extrínseco tipo N*.

Las diversas combinaciones de los semiconductores tipo N y P han generado los dispositivos más importantes de la electrónica moderna.

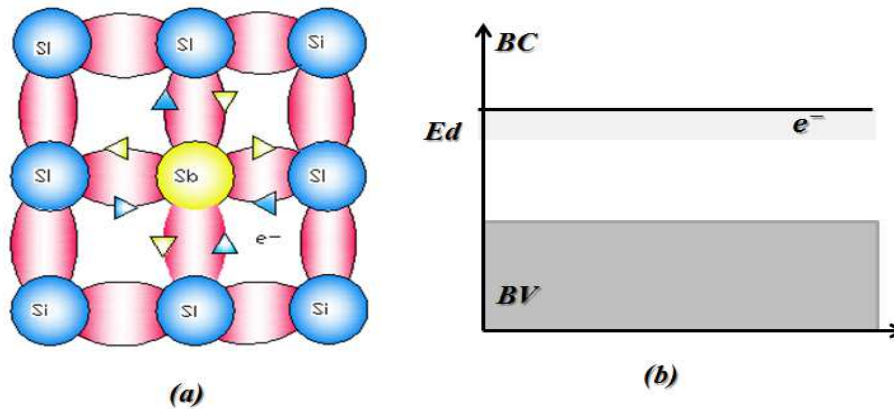


Figura 2.7 Representación del enlace covalente (a) y bandas de energía del silicio dopado con antimonio (Sb).

2.1.4 Compuestos de Silicio.

Dióxido de silicio (SiO_2). Otro de los materiales utilizados en la electrónica es el *Dióxido de Silicio* (SiO_2), el cual es el aislante cuyas características mejor se aproximan al dieléctrico ideal. Eléctricamente, sus características son excepcionales: presenta una brecha de energía de 8.8 eV que resulta grande comparada con cualquier material alternativo, confiriéndole excelentes características como aislante, con resistividades entre 10^{12} y $10^{14} \Omega \cdot m$, a una temperatura de $25^\circ C$. En particular, el SiO_2 , es la base para los dispositivos de metal-óxido-semiconductor (MOS) [5].

2.2 Problemas del silicio en la rama optoelectrónica y la solución para ser usado en esta área.

Los dispositivos electrónicos son componentes cuyos portadores de carga son los *electrones* y los dispositivos fotónicos son dispositivos que hacen uso del *fotón* para transmitir la información. El fotón es una partícula que no tiene masa ni carga y que por lo tanto, es mucho más eficiente en el transporte de información.

La ciencia que enfrenta el reto de combinar tanto la tecnología fotónica como la electrónica, mediante el desarrollo de componentes que sean capaces de convertir la señal

eléctrica de los sistemas electrónicos en señal óptica y ésta otra vez en eléctrica es la *Optoelectrónica* [6].

La optoelectrónica se sitúa a medio camino entre la electrónica basada en el silicio que transmite la información a través de electrones (señal eléctrica) y la fotónica que lo hace con base en fotones (partículas de luz).

2.2.1 Interacción fotón-electrón

Las propiedades ópticas de un material son el producto de la interacción de los fotones con los e^- de valencia de éste. Existen tres procesos básicos que pueden presentarse durante la interacción entre un fotón y un e^- en un sólido: absorción, emisión espontánea y emisión estimulada.

Consideremos dos niveles de energía E_1 y E_2 de un átomo, donde E_1 corresponde al estado base y E_2 corresponde al estado excitado. Cualquier transición entre estos estados implicará la absorción o emisión de un fotón. La energía del fotón está dada por $h\nu_{12} = E_2 - E_1$; donde h es la constante de Plank ($h = 6.6 \times 10^{-34}$ [J. s]) y ν es la frecuencia de la onda.

A temperatura ambiente, la mayoría de los átomos se encuentran en su estado base. Esta situación cambia cuando un fotón de energía exactamente igual a $h\nu_{12}$ interactúa con el sistema. Entonces, un átomo en su estado base E_1 absorbe la energía del fotón, excitando al electrón y dándole la suficiente energía para pasar al estado E_2 . Cuando un átomo cambia de estado de energía de esta manera, se dice que lo hizo a través de un proceso de *absorción*, como se muestra en la figura 2.8(a). Dispositivos que operan con este tipo de proceso son las celdas solares y los fotodetectores.

Cuando un átomo ha sido previamente excitado, no permanecerá en este estado indefinidamente, sino tenderá a regresar a su estado base emitiendo un fotón de energía $h\nu_{12}$. Este proceso es llamado *emisión espontánea* (Fig. 2.8 (b)), o *recombinación radiativa* en el caso de los semiconductores. Los LEDs operan mediante este proceso.

Cuando un fotón de energía $h\nu_{12}$ incide en un átomo y éste se encuentra en estado excitado (Fig. 2.14 (c)), el átomo puede ser estimulado para realizar la transición al estado base y emite un fotón de energía $h\nu_{12}$, el cual está en fase con la radiación incidente. Este proceso es llamado *emisión estimulada* y los diodos láser operan de esta manera.

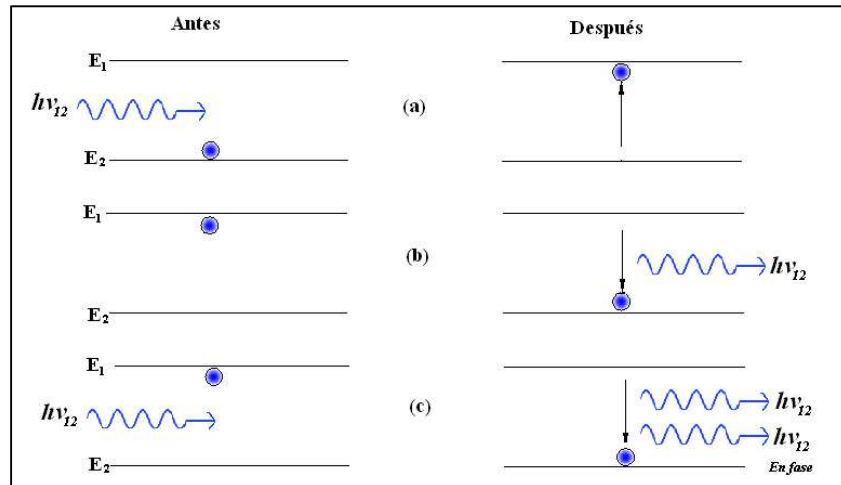


Figura 2.8 Tres procesos básicos de transición entre dos niveles de energía. Los puntos negros indican el estado del átomo. El estado inicial se encuentra en el lado izquierdo y la transición en el derecho. (a) Absorción. (b) Emisión espontánea. (c) Emisión estimulada.

2.2.2 ¿Por qué el silicio no emite luz?

Para que los materiales semiconductores emitan luz (fotones) se tienen que cumplir ciertas condiciones. La mayoría de los materiales semiconductores utilizados en fotónica son compuestos del grupo III y IV, estos compuestos tienen la característica que poseen una banda prohibida directa, lo que significa que el máximo en la banda de conducción coincide con el mínimo en la banda de valencia (figura 2.9).

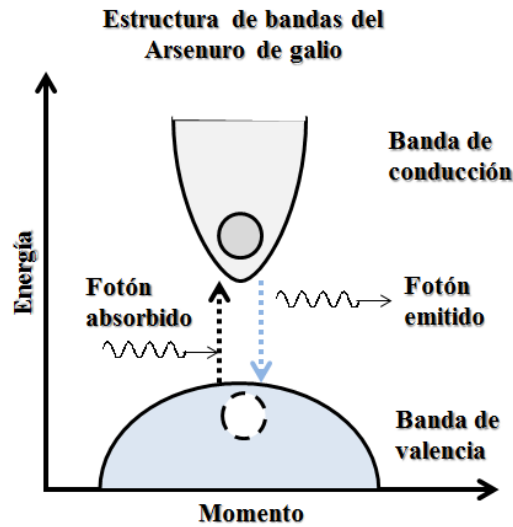


Figura 2.9 Estructura de bandas de un semiconductor con gap directo. Reproducida de [7]

Recordemos que cuando un e^- es excitado y adquiere cierta energía para saltar a la banda de conducción (BC), éste deja un h^+ en la banda de valencia (BV). En este punto el estado del hueco es inestable, pero sólo durante un corto periodo de tiempo, pues el e^- tiende a ocupar nuevamente su lugar en la banda de valencia; es decir, pasa del nivel excitado al nivel de menor energía. Durante la transición se libera energía, en el caso del arseniuro de galio (GaAs) como el mínimo y el máximo tanto de la BC como de la BV coinciden en el mismo punto, el resultado es la emisión de un fotón. De tal manera que se cumple:

- ❖ El fotón emitido tendrá una energía igual a la banda del gap $h\nu = E_{BC} - E_{BV}$.
- ❖ No existe cambio en el momento (p) del e^- al realizar la transición; es decir, $p=0$, lo cual se conoce como una transición vertical.
- ❖ La recombinación radiativa tiene un tiempo de vida muy corto del orden de nanosegundos [8].

Lo anterior muestra que en semiconductores con banda prohibida directa se tienen las condiciones necesarias para la emisión de fotones.

Veamos ahora la figura 2.10. Se muestra la estructura de bandas de semiconductores con banda prohibida indirecta, lo cual significa que existe un desfaseamiento entre el mínimo en la banda de conducción y el máximo en la banda de valencia, tal es el caso del *silicio*. Debido a este desfaseamiento, cuando se presenta el proceso de transición se requiere no solamente un cambio de energía $\geq E_g$ (energía del gap), sino también se debe tomar en cuenta la magnitud del momento, que es diferente de cero.

Durante los procesos de transición se tienen que conservar la energía y el momento (tendencia de seguir viajando en la misma dirección). Al presentarse un exceso de momento, para conservarlo es necesaria la emisión de un *fonón* (disipación de calor). En este tipo de procesos los fotones que intervienen en la excitación poseen una cantidad de momento muy inferior a la que necesitan los electrones para saltar a la banda de conducción. Entonces, el electrón debe esperar a que un fonón, con el momento extra adecuado, se cruce en su camino y actúe como intermediario en la transferencia de energía. Desgraciadamente, esos electrones excitados se pierden con frecuencia en forma de calor, y su energía adicional se transfiere al resto del material, antes de que aparezca el fonón esperado y pueda proporcionarle la energía extra que necesita para que se produzca la transición [7].

De esta manera el proceso de emisión de un fotón termina siendo un proceso de segundo orden. El tiempo de vida de la recombinación radiativa es más largo del orden de microsegundos. Esta es la razón principal por la cual el silicio no ha sido utilizado en aplicaciones en optoelectrónica.

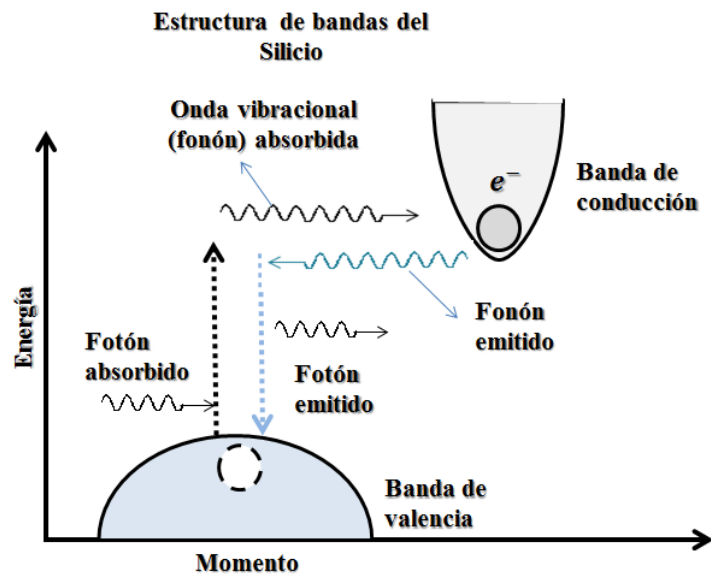


Figura 2.10. Estructura de bandas de un semiconductor con banda prohibida indirecta. Reproducida de [7]

2.2.3. Solución para que el silicio sea utilizado en Optoelectrónica.

Los científicos se proponen, desde hace tiempo, desarrollar un chip de silicio que manipule la luz con la misma pericia que los electrones. Sin embargo, una limitación importante para este desarrollo es la falta de una eficiente fuente de luz a base de silicio, debido a que es un material con banda prohibida indirecta, y en consecuencia es un mal emisor de luz, se creía que su integración en dispositivos ópticos no era factible; sin embargo, en 1990, algunas investigaciones mostraron que si se reducía la dimensión del silicio hasta escala nanométrica, como en el caso de los puntos cuánticos de silicio QDS (por sus siglas en inglés) o nanocristales de silicio, sus propiedades ópticas y eléctricas son bastante diferentes a las que presente el silicio en bulto. En particular la emisión de luz en nanoestructuras de silicio es un tema de interés debido a su potencial para aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos basados en silicio [9] ya que presentan una eficiente fotoluminiscencia en el espectro visible y en el infrarrojo cercano, pues la banda prohibida llega a ser cuasidirecta y por tanto se incrementa la recombinación radiativa [10]; sin embargo, su tasa de emisión radiativa es baja comparada con otros semiconductores, por lo que la intensidad de la fotoluminiscencia no es la óptima.

Capítulo 2. Planteamiento del problema.

En este trabajo se propone estudiar la emisión de luz producida por nanocristales de silicio al estar acoplados con nanopartículas metálicas, ambos inmersos en una matriz de dióxido de silicio. Al unir las propiedades de emisión de las nanoestructuras de silicio y nanopartículas metálicas se podrían crear dispositivos, en este caso guías de onda, para transportar energía en forma de luz a grandes distancias, sin tener pérdidas de energía.

Referencias:

- [1] Raúl Ibarra, Miguel Serrano López. “*Principios de teoría de las comunicaciones*”, Ed. Limusa, México (1999).
- [2] Wayne Tomásí. “*Sistemas de Comunicaciones Electrónicas*”, Pearson educación, Mexico (2003).
- [3] Mónica Martínez Bogado. “*Materiales y materia primas: silicio*”, colección encuentro INET, Argentina (2011).
- [4] De S.M. Sze. “*Semiconductor Devices: Physics and Technology*”, Wiley, New York (1985).
- [5] Antonio Rubio, Josep Altet, Xavier Aragonés, José Luis González, Diego Mateo y Francesc Moll. “*Diseño de circuitos y sistemas integrados*”, Ed. UPC, España (2003).
- [6] Manuel C. Rubio. “*La era del Fotón*”, Técnica Industrial (marzo 2002), p (23).
- [7] Bahram Jalali. “*Láseres de silicio*”, Investigación y ciencia (abril 2007), p (50).
- [8] Philippe M. Fauchet. “*Light emission from Si quantum dots*”, Materials Today, (enero 2005).
- [9] A. G. Cullis and L.T. Canham, “*Visible light emission due to quantum size effects in highly porous crystalline silicon*”, Nature (1991).
- [10] X. Wen, L.V. Dao, P. Hannaford, E-C Cho, Y. H. Cho and M.A. Green, “*Excitation dependence of photoluminescence in silicon quantum dots*”, New Journal of Physics (2007) p (2).

CAPÍTULO 3

Desarrollo teórico

3.1 Nanocristales de silicio

Se espera que el diseño, síntesis y caracterización de nanomateriales proporcionen la capacidad para manipular la materia en el nivel más fundamental, lo que permite la implementación de nuevos dispositivos de escala nanométrica y sistemas con propiedades únicas y de gran importancia tecnológica. Cuando las dimensiones físicas de un dispositivo se reducen a la escala nanométrica, los fenómenos cuánticos se vuelven frecuentes, al igual que la modificación de las propiedades ópticas y electrónicas del material. Esto puede permitir el diseño y fabricación de materiales con propiedades adaptadas para una aplicación en particular.

3.1.1. Confinamiento cuántico

Cuando las dimensiones de los sólidos se reducen a nanómetros, las propiedades tales como resistencia, temperatura de fusión, color, conductividad eléctrica, conductividad térmica, reactividad, y magnetismo cambian, si un material reduce su tamaño conservando valores macroscópicos (por ejemplo centímetros), sus propiedades iniciales siguen siendo las mismas; sin embargo, cuando estas dimensiones caen por debajo de los 100 nm, aparecen cambios bruscos [1].

Cuando los electrones se encuentran restringidos a moverse en una región muy pequeña del espacio, se dice que están confinados. Y cuando esta región es tan pequeña que es comparable a la longitud de onda asociada al electrón – llamada longitud de onda de De Broglie -, comienza a observarse el llamado *comportamiento cuántico*.

De Broglie interrelacionó las características físicas de dos fenómenos substancialmente distintos:

- ❖ Los fenómenos ondulatorios caracterizados por la longitud de onda (λ).

- ❖ Los fenómenos corpusculares caracterizados por la cantidad de movimiento lineal (p).

La ecuación que correlaciona los fenómenos ondulatorios y corpusculares de una partícula es:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (1)$$

Donde h es la constante de Planck.

Por ejemplo, si se asociara una función de onda al electrón y se confinara en una región finita denominada *caja*, entonces la mecánica cuántica explica que la partícula no puede encontrarse en cualquier sitio, sino que su función de onda debe ser cero en las paredes de la caja. El estado de más baja energía corresponde a la onda más simple, siendo los estados más energéticos los que tienen más nodos en el interior de la caja cuántica, o equivalentemente, las ondas con frecuencias más grandes (figura 3.1). Las energías correspondientes a estas funciones de onda no pueden tomar cualquier valor, sino que tienen valores determinados, por lo que se dice que la energía está “cuantizada” o “discretizada” [2].

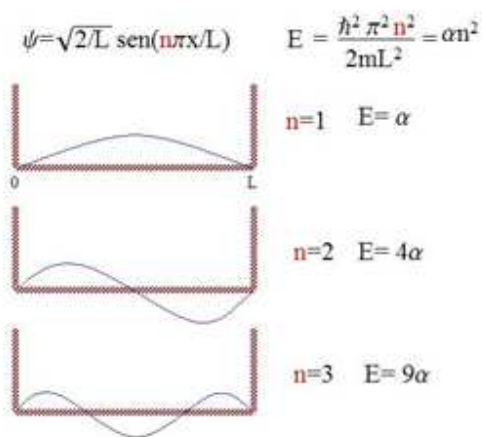


Figura 3.1 Un electrón en una caja nanométrica. $\psi(x)$ Representa la función de onda asociada al electrón, E su energía, m la masa del electrón, L la longitud de la caja y \hbar la constante de Planck. Para cada estado ($n=1,2,3,\dots$), se tiene una energía cuantizada. Se puede observar que la energía es directamente proporcional al estado, e inversamente proporcional L . Además se tiene que: $\alpha = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$.

3.1.2. Nanoestructuras

Una nanoestructura puede definirse como una estructura atómica, molecular o macromolecular que tiene al menos una dimensión física de 1-100 nm aproximadamente, y poseen la propiedad de proporcionar una función especial o producir un efecto especial que es exclusivamente atribuible al tamaño nanométrico de la estructura [3].

La interacción de las nanoestructuras con la luz depende de los siguientes parámetros:

- ❖ Tamaño y forma de la partícula.
- ❖ Distancia entre partículas adyacentes.
- ❖ Material que conforma las partículas y sus propiedades de absorción de luz.
- ❖ La naturaleza de la luz incidente, por ejemplo: ondas continuas, casi continuas o pulsos.

Gracias a los avances tecnológicos es posible fabricar sistemas nanométricos artificiales en donde se pueden observar claramente los efectos de confinamiento cuántico en dos, una y cero dimensiones (2D, 1D y 0D) respectivamente [2].

3.1.3. Puntos cuánticos de Silicio (Nanocristales o Nanoestructuras)

En los últimos años se ha generado un considerable interés en las nanoestructuras de silicio, ya que es un material prometedor para fabricar dispositivos cuánticos de próxima generación.

El término de punto cuántico se utiliza generalmente para describir un nanocristal con confinamiento cuántico en tres dimensiones espaciales (figura 3.2). Un punto cuántico es un dispositivo artificial muy pequeño o una región del espacio de dimensiones muy pequeñas, desde algunas decenas de nanómetros a algunos micrones, que es capaz de confinar electrones en tres dimensiones. Usualmente están fabricados con material semiconductor y pueden albergar desde ninguno a varios miles de electrones (figura 3.2).

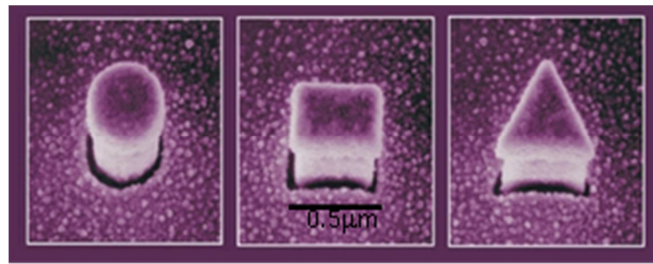


Figura 3.2 Diferentes tipos de puntos cuánticos. Reproducida de [3]

Los electrones que están dentro del pozo cuántico se repelen, cuesta energía introducir electrones adicionales, y obedecen el principio de exclusión de Pauli, que prohíbe que dos electrones ocupen el mismo estado cuántico simultáneamente. En consecuencia, los electrones en un punto cuántico forman órbitas de una manera muy similar a las de los átomos y en algunos casos se los denomina “átomos artificiales”. También presentan comportamientos electrónicos y ópticos similares a los átomos [2].

A esas dimensiones el material se convierte en una matriz sobre la que han crecido estructuras, como pirámides o montañas, formadas por unos pocos cientos o miles de átomos. Esas estructuras son los puntos cuánticos.

Las aplicaciones de los puntos cuánticos son enormes, y van desde la computación cuántica, el almacenamiento de información de computadoras, la óptica y la optoelectrónica.

3.1.4. Técnicas para producir Nanocristales de Silicio (Si-nc) en una matriz de SiO₂

Los nanocristales de silicio embebidos en un dieléctrico forman un sistema atractivo para la fabricación de dispositivos debido al aumento de la estabilidad de su superficie y la rigidez del material. Otra característica importante de los Si-nc es que poseen un índice de refracción mayor que el del SiO₂, por lo que presentan grandes cualidades para ser usados como guías de onda.

Algunos métodos para producir Si-nc en matrices dieléctricas son los siguientes:

Depósito químico de vapor asistido por plasma (PECVD): es una técnica muy utilizada para depositar películas delgadas sobre un sustrato por medio de un gas. En esta técnica el flujo de gas, la presión total, la potencia del plasma y la temperatura del sustrato son usadas para controlar la tasa de crecimiento, la composición química y el tamaño de los Si-nc, respectivamente (figura 3.3 (c)) [4].

Sputtering: se basa en el bombardeo intenso de un material con los iones producidos en una descarga eléctrica en forma de plasma. Cuando la energía de los iones incidentes es suficientemente elevada, la interacción con la superficie del material hace que los átomos sean arrancados. Estos átomos caen por gravedad sobre el sustrato sobre el cual se formará la película delgada (figura 3.3 (b)) [5].

Implantación de iones: esta técnica es la que se utilizará en este trabajo, y consiste en bombardear la muestra con iones del material que se quiere implantar dentro del sustrato. La implantación de iones no depende de tantas variables como las técnicas anteriores y su aplicación en dispositivos puede ser directa (figura 3.3 (a)). Los Si-nc producidos por esta técnica se encuentran protegidos por la matriz, ya que están inmersos en ella, lo cual les permite mantener sus propiedades físicas.

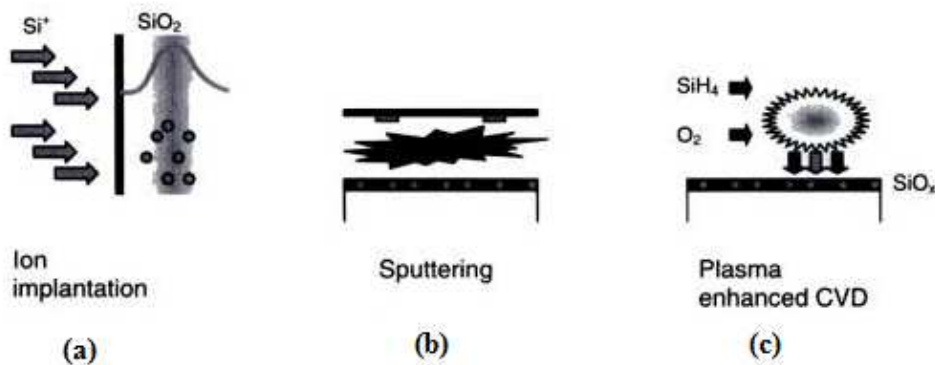


Figura 3.3 Procesos de preparación de Si-nc. Tomado de [6]

3.2 Implantación Iónica

Desde los primeros estudios de implantación de iones llevados a cabo en los Laboratorios Bell entre 1940 y 1950 donde se lograron hacer uniones n-p, la implantación de iones se ha convertido en el principal procedimiento en la fabricación de circuitos integrados [7].

La implantación de iones es un proceso muy conocido en la industria microelectrónica, es esencial para la fabricación de circuitos integrados modernos, más precisamente donde se requieren capas finas de silicio dopado de algunos elementos tales como arsénico, fósforo, boro, indio, antimonio, germanio, nitrógeno y helio.

3.2.1 Implantación

El proceso de implantación consiste en el bombardeo de un material con átomos ionizados con suficiente energía, para penetrar más allá de las capas superficiales. Dependiendo de la aplicación, las energías de los iones pueden variar desde unos pocos keV a varios MeV. Los iones implantados se pueden utilizar para modificar la composición de la superficie, la estructura o las propiedades químicas, eléctricas y ópticas del material sólido.

El esquema general de un proceso de implantación de iones se observa en la figura 3.4. Básicamente consiste en lanzar un gran número de proyectiles sobre un objetivo. En nuestro caso, los proyectiles (o haz) son iones positivos, los cuales son átomos que viajan a altas velocidades, y que por alguna razón han perdido uno o más electrones.

El flujo de proyectiles es el número de iones que cruzan una superficie por unidad de tiempo. La densidad de flujo (o afluencia) de proyectiles ϕ , se define como el número de ellos que pasa por un área en un tiempo determinado y tiene por unidades [*proyectiles/cm²*]. Dado que los iones son partículas cargadas, el flujo constituye una corriente, y la densidad de flujo equivale a una densidad de corriente eléctrica. La corriente i del haz se mide generalmente en submúltiplos de A (ampere), *nA*, μA o *mA*. Para calcular la densidad de flujo en [*proyectiles/cm²*] a partir de la corriente, es necesario dividir la corriente entre el área en [*cm²*]. Esta área generalmente está definida por un colimador colocado frente al material [8].

$$\phi = \frac{i}{\text{Área}_{\text{blanco}}} \quad (2)$$

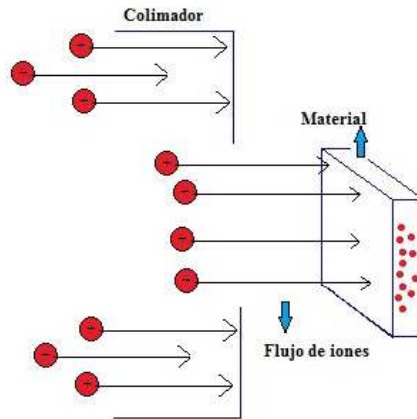


Figura 3.4 Esquema general del proceso de implantación de iones. Los iones son lanzados en el material con suficiente energía para penetrar en el material y quedar depositados en este.

Cuando los iones penetran el material, éstos llevan cierta velocidad, la cual se ve disminuida debido a una serie de interacciones de la partícula con el material; esto provoca que se frenen, hasta quedar depositados dentro del sustrato. Los fenómenos físicos producidos durante la implantación iónica son la causa de la modificación de las propiedades del material.

3.2.2 ¿Cómo interaccionan los iones positivos con la materia?

Los iones tienen la estructura típica de los átomos: un núcleo con sus electrones, sólo que tienen carga positiva porque han perdido algún electrón. Cuando un ion penetra en la materia llevando cierta velocidad, puede ir intercambiando electrones con el medio, al irse frenando y recogiendo electrones.

Al avanzar el ion dentro del material, va perdiendo energía cinética gradualmente debido a interacciones con el gran número de partículas cargadas que va encontrando,

principalmente electrones. Esto provoca un frenado gradual del proyectil, que va depositando energía a lo largo de su trayectoria, hasta que finalmente se frena totalmente.

3.2.3 Poder de frenado

El *poder de frenado* de un proyectil (ion) se define como la energía perdida por unidad de longitud recorrida y tiene unidades de [MeV/cm].

Para entender mejor este concepto veamos la figura 3.5, en la cual se tiene un proyectil incidente con energía E_1 , que va a recorrer una distancia (Δx) en un material. Durante la trayectoria el proyectil perdió una energía ΔE_1 consecuencia de la interacción con los electrones y los núcleos del material. Como resultado se tiene que la energía final del proyectil será la diferencia entre la energía inicial y la energía perdida durante el trayecto; es decir: $E_1 - \Delta E_1$.

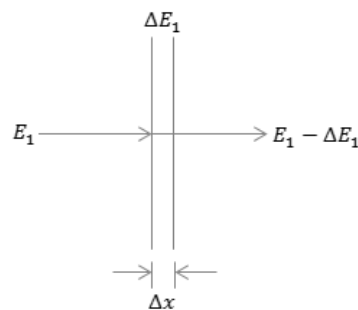


Figura 3.5 Frenado de un proyectil que pasa por un material delgado.

Estudios han demostrado que al interactuar los iones con la materia, éstos lo hacen de la siguiente manera:

- a) Con los electrones del material, lo cual provocará el *frenamiento electrónico*.
- b) Menos frecuentemente con los átomos completos, produciendo el *frenamiento nuclear*.

3.2.4 Frenado electrónico.

Es producto de la interacción del proyectil (ion) con los electrones del material, produce ionización y excitación atómica. Veamos qué significan cada uno de estos fenómenos.

La *ionización* se produce al interaccionar un proyectil con los electrones de los átomos del material; la energía transferida por el proyectil es mayor a la energía de enlace (energía de ionización) del electrón colisionado, éste abandona el átomo y por lo tanto se crea un ion positivo. La *excitación* se da cuando en la colisión de la partícula incidente con un electrón atómico, la energía transferida es insuficiente para producir ionización, el electrón impactado no puede ser expulsado del átomo, pero sí puede saltar a una capa de mayor energía. Tal electrón excitado, al regresar a su estado base (con menor energía) devolverá la energía sobrante en forma de radiación electromagnética como transiciones radiativas o bien en forma de calor.

Las principales características del frenado electrónico son:

- ❖ Las trayectorias de los iones son esencialmente rectas: debido a que las masas de los electrones son pequeñas y no alcanzan a desviar al ion.
- ❖ La transferencia de energía es pequeña por cada colisión.
- ❖ Se requiere de un gran número de colisiones para producir el frenado.

3.2.5 Frenado nuclear.

Se debe a choques del proyectil con los núcleos de los átomos que componen el material. El resultado de este proceso es que los átomos del material pueden ser desplazados de sus posiciones originales, dando lugar a cambios estructurales en el material.

El frenado nuclear se caracteriza por:

- ❖ Las trayectorias de los iones son quebradas y se da un mayor esparcimiento de los proyectiles.
- ❖ La transferencia de energía en el material puede ser considerable.
- ❖ En este caso no existe gran número de colisiones. Incluso el proyectil puede ceder gran parte de su energía en una colisión.

3.2.6 Alcance lineal

Durante los procesos de implantación de iones es de suma importancia conocer la trayectoria que sigue el ion hasta que se frena. El término utilizado para referirse a la distancia total recorrida sobre la trayectoria, desde el punto de incidencia hasta que se detiene es el *alcance lineal* R_l [cm].

En la figura 3.6, se muestra la trayectoria de un ion en un material. En ella R_p es la proyección de R_l en dirección del ion incidente y representa la profundidad a la que llegan los proyectiles en el material. Dado que las trayectorias no son rectas, pues el ion sufre desviaciones en su camino, el alcance transversal R_t , es la proyección de R_l en la dirección perpendicular al ion incidente.

El alcance de los iones va a depender de su energía cinética, a mayor energía incidente, mayor alcance lineal.

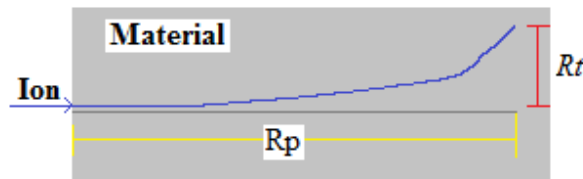


Figura 3.6. Trayectoria de un ion en un material

Un programa que ayuda a visualizar la trayectorias de los iones en diversos materiales es TRIM (Transport of Ions in Matter) [9-10]. El código es empleado en el software SRIM en el cual se simulan los efectos de las interacciones de los iones con la materia. Este programa toma en cuenta cantidades como los alcances proyectado y lateral, la ionización producida a lo largo de la trayectoria, el número de desplazamientos atómicos producidos, la composición del material donde se produce la implantación, el tipo de proyectil y su energía, entre otras, y a partir de estos datos simula las condiciones experimentales que se tendrían al interactuar un proyectil con los átomos del material que se estudia. Al concluir la simulación se tienen las curvas de distribución de estas cantidades (alcance, trayectoria, ionizaciones, defectos creados en la red) como función de la profundidad.

El programa permite realizar simulaciones de implantaciones o colisiones de una gran variedad de iones (toda la tabla periódica) en materiales tan diversos como metales, gases, líquidos, plásticos, piel humana, cartílagos, huesos, glándulas mamarias y demás órganos humanos.

Un ejemplo de una simulación hecha con el programa Trim se muestra en la figura 3.7. En las imágenes se ven las trayectorias y el alcance de iones de plata implantados en cuarzo y piel humana a diferentes energías. Se observa que el alcance depende tanto del proyectil, de su energía, así como del material. Por ejemplo, en el inciso (a) y (b) se implantaron iones de plata a una energía de 1 MeV y 5 MeV, respectivamente, sobre un sustrato de cuarzo. Se observa que en el primer caso se alcanza una profundidad de aproximadamente 0.8 μm y el segundo 3 μm ; así mientras mayor sea la energía de incidencia mayor será la profundidad alcanzada en el material.

Sin embargo, en el inciso (c) y (d) las simulaciones se realizaron bajo las mismas condiciones que en los incisos (a) y (b) pero ahora el material a implantar fue piel humana. La profundidad alcanzada en el inciso (c) es de aproximadamente 1 μm y en el (d) de 4.8 μm . En este caso hubo mayor penetración de los iones en el material. El alcance de los iones también depende del material pues cada uno de estos posee una estructura diferente y los iones van a interactuar de forma distinta con los átomos del sustrato.

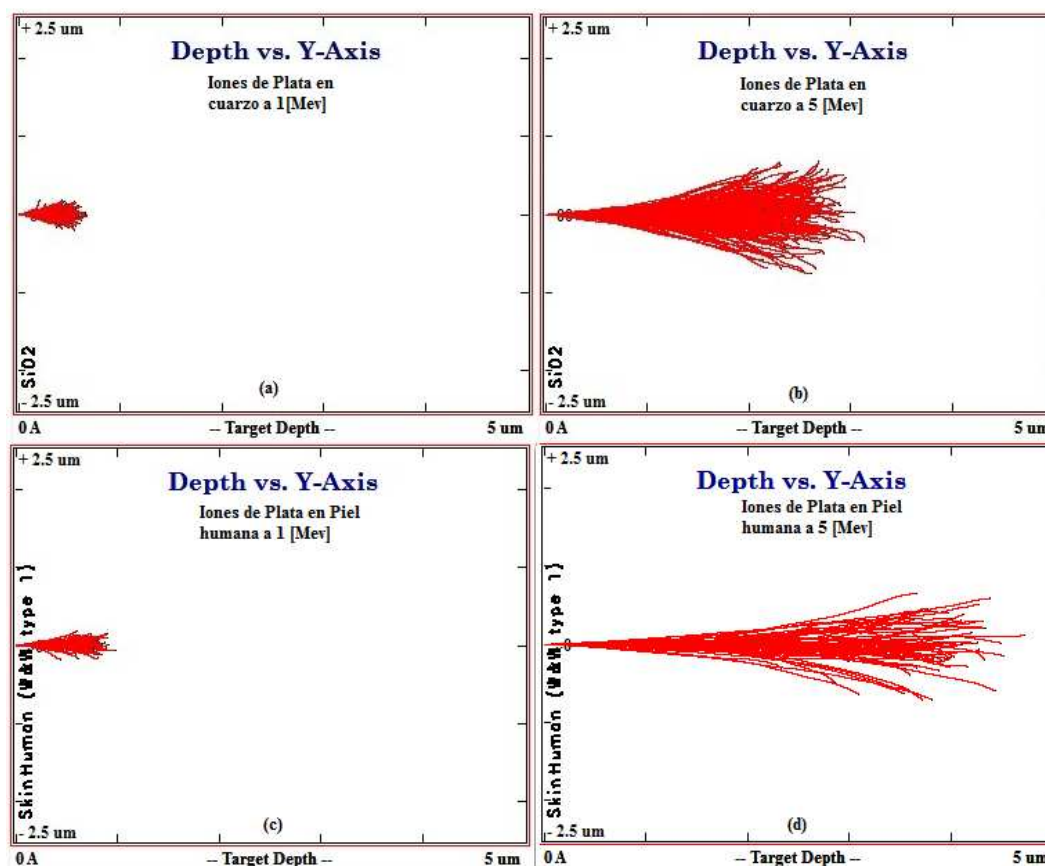


Figura 3.7 Simulación con el programa TRIM de iones de plata implantados a diferentes energías y en diferentes materiales. Cuando la energía de implantación aumenta también aumenta la profundidad de los iones implantados en el material.

3.2.7 Distribución de los iones en la materia

En experimentos de implantación se tiene un gran número de proyectiles incidiendo en el material en una misma dirección y con la misma energía. La manera en la cual se acomodan los iones en el material se relaciona con el carácter aleatorio del frenado, esto significa que el alcance de los iones podría ser diferente para cada evento. La distribución que siguen los iones en el material será una distribución de probabilidad (figura 3.8).

En el caso de proyectiles ligeros de alta energía se supone que la distribución es gaussiana; pero la forma de la distribución real depende del tipo de proyectil, de su energía inicial y del material en el cual se va a implantar. En la figura 3.9 se muestra la gráfica de distribución de iones silicio y cobre en cuarzo.

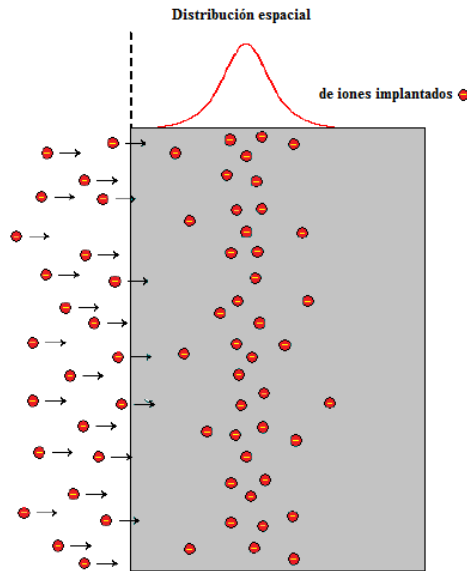


Figura 3.8 Imagen de la distribución de probabilidad de iones implantados (tomada de [1])

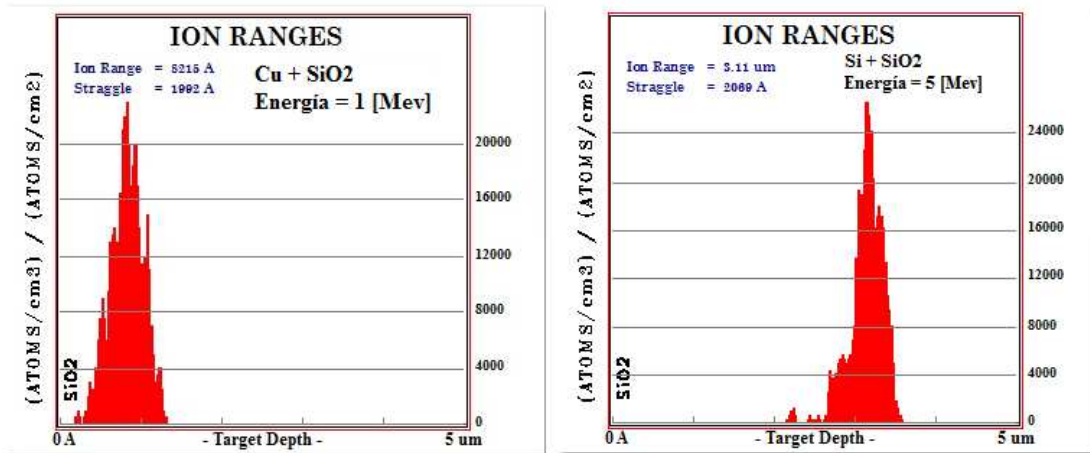


Figura 3.9. Gráfica en el programa TRIM de la distribución de iones de silicio y cobre en cuarzo, se observa la forma gaussiana de la distribución.

3.2.8 Efectos de la implantación de iones en la materia

Las estructuras de los materiales no son perfectas, en algunos casos llegan a tener imperfecciones, dichas imperfecciones son propias del material y en otros casos son producidas por la presencia de impurezas.

Las propiedades del material a implantar, tales como la composición química, el estado físico, la pureza, la homogeneidad, la estructura cristalina, y las dimensiones, son determinantes durante la implantación iónica. Los defectos presentes en los materiales se pueden clasificar como:

	Desorden	Impurezas
Defectos reticulares	Vacante	Sustitución
	Intersticiales	Intersticiales

Los defectos de desorden no implican la presencia de material extraño alguno, son propios del material; dentro de estos se encuentran las vacantes o efecto Shottky, y se definen como posiciones en la red cristalina a la cual le hace falta un átomo (figura 3.10) [11]

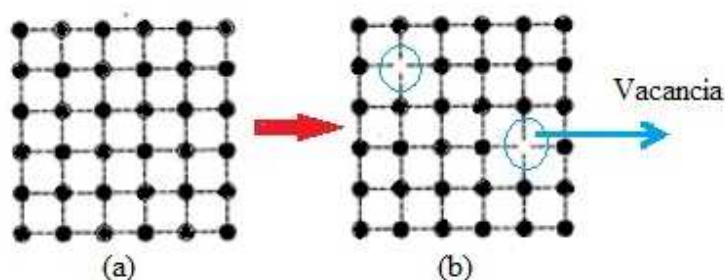


Figura 3.10 (a) Red cristalina sin defectos. (b) vacancias en la red cristalina.

Otro defecto son los átomos intersticiales, los cuales son átomos de la misma especie, pero que se encuentran situados en un intersticio (lugar entre la red cristalina), en lugar de encontrarse en el lugar que normalmente le corresponde, como se observa en la figura 3.11.

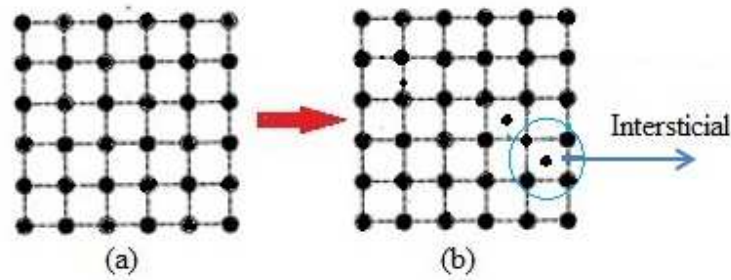


Figura 3.11. (a) Red cristalina sin defectos. (b) Intersticios en la red cristalina.

Cuando se incorporan impurezas en el material, como en el caso de la implantación de iones de un material diferente al de la red cristalina, se presentan los defectos producidos por impurezas. Los átomos de impurezas pueden encontrarse en posición sustitucional o en posición intersticial, como se muestra en la figura 3.12.

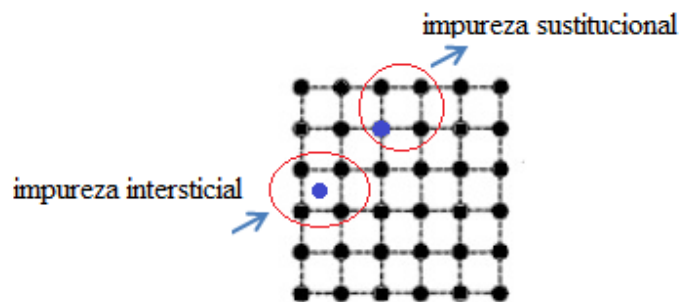


Figura 3.12. Imagen de una red cristalina, los puntos azules representan impurezas.

3.2.9 Daños por la implantación.

Cuando ocurre la colisión del ion con alguno de los átomos del material puede suceder que la energía transferida no sea suficiente como para desplazar el átomo de su posición, lo que provoca que el átomo golpeado sufra vibraciones en su posición original. Dicha energía es compartida con sus átomos cercanos y se disipa en forma de calor.

Durante la implantación se producen defectos en la estructura cristalina, como consecuencia del frenado nuclear. Los principales defectos se deben a los siguientes tipos de colisiones:

- ❖ Colisiones de desplazamiento
- ❖ Colisión de reemplazo.

3.2.10 Colisiones de desplazamiento.

Como ya se había mencionado anteriormente durante el frenado nuclear se presentan colisiones del proyectil con los átomos completos del material, lo que provoca su desplazamiento. La energía de desplazamiento E_d de un sólido es la energía que se debe transferir a un átomo del sólido para producir su desplazamiento permanente. El desplazamiento se efectuará si la energía transferida es mayor o igual a E_d .

Cuando un proyectil choca con átomos del material estos adquieren energía cinética, de tal manera que se convierten en proyectiles que chocan con átomos cercanos a ellos. A los átomos desplazados por el proyectil original se les conoce como PKA (primary knock on atom) y cada uno genera una cascada. Dicho fenómeno termina una vez que los átomos pierden energía, de modo que ya no poseen suficiente energía para desplazar a otro átomo. La figura 3.13 muestra el esquema de colisiones en cascada.

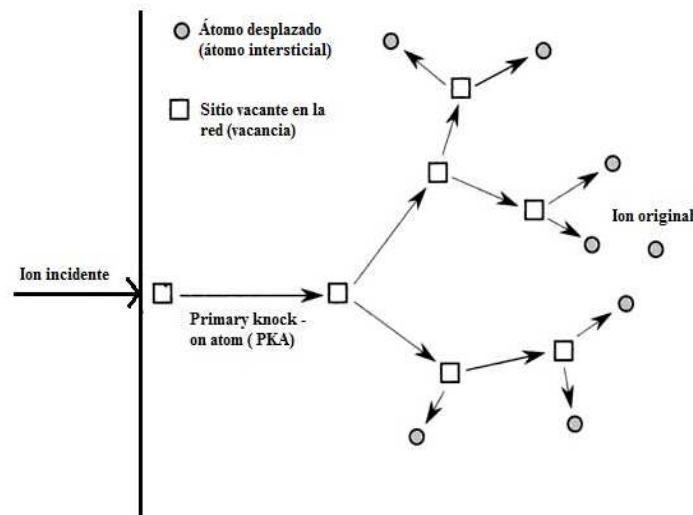


Figura 3.13 Esquema de colisiones en cascada. La figura muestra los efectos provocados al chocar el ion con el átomo (reproducida de [12]).

En términos generales se puede decir que las colisiones PKO tienen las siguientes características:

- ❖ La cascada es creada por una secuencia de colisiones de dos cuerpos.
- ❖ Todas las colisiones son elásticas.
- ❖ Si un átomo recibe menor energía que E_d , no se desplaza.
- ❖ Si el átomo recibe una energía dentro del intervalo E_d y $2E_d$, este será desplazado, pero no provocará desplazamientos secundarios.
- ❖ Si la energía transferida por el PKA al átomo de la red excede E_d , pero es menor que $2E_d$, habrá desplazamiento. La energía del PKA será menor que E_d , el átomo golpeado se moverá de su sitio en la red y el PKA caerá en un sitio vacante. Este proceso es denominado *colisión de reemplazo* (figura 3.14).

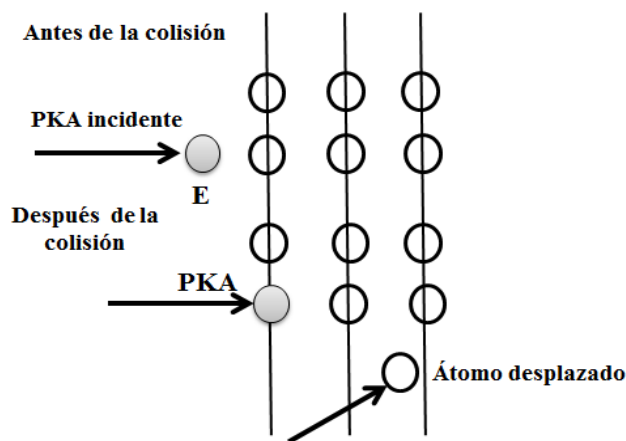


Figura 3.14 Esquema que representa la colisión de reemplazo

3.3 Retrodispersión de Rutherford (RBS)

3.3.1 Concepto

La Retrodispersión de Rutherford es una técnica de origen nuclear no destructiva que se utiliza para analizar materiales. El nombre de la técnica *Rutherford Backscattering Spectrometry* o *RBS* (*Espectrometría de Retrodispersión de Rutherford*), proviene de las investigaciones realizadas por el físico Ernest Rutherford a principios de este siglo, y con las cuales llegó a establecer su modelo atómico [13].

El método consiste en bombardear el material que se desea analizar con iones de hidrógeno, helio o cualquier otro elemento, normalmente ligeros. La energía de estos iones se encuentra en el rango de MeV (típicamente del orden de 0.5 – 4 MeV) [14] (figura 3.15).

Se considera que las partículas colisionan elásticamente, lo que significa que se conserva tanto el momento lineal como la energía cinética; es decir, los cuerpos se separan después del choque.

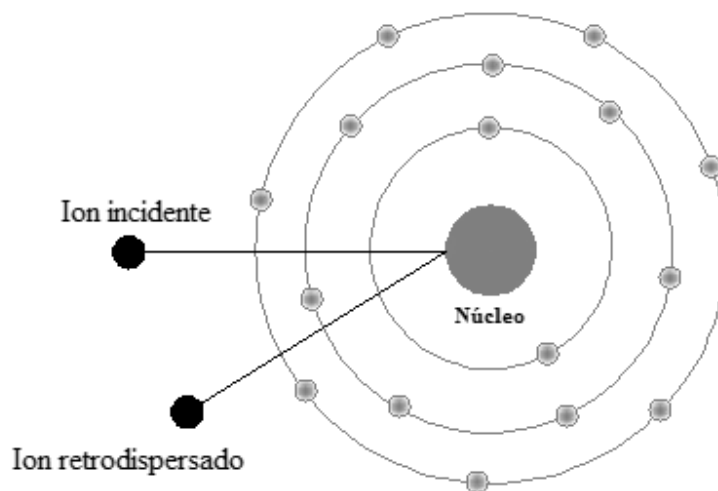


Figura 3.15 Esquema de Retrodispersión de Rutherford

Los iones retrodispersados del material como resultado de la interacción son detectados y analizados. La energía de las partículas detectadas contiene información sobre la

composición del material y sobre la distribución de concentración en profundidad de los elementos que lo constituyen.

3.3.2 Principios físicos de RBS

La técnica RBS se fundamenta principalmente en los siguientes conceptos físicos, los cuales permiten determinar el tipo de elementos en la muestra y la concentración de los mismos, estos son:

- ❖ Factor cinemático de dispersión.
- ❖ Sección eficaz diferencial.

3.3.2.1 Factor cinemático de dispersión

Los iones inciden en el material con una energía E_0 y como resultado son dispersados, pero ahora con una energía dada por:

$$E = KE_0 \tag{3}$$

Donde K es el factor cinemático de dispersión. Este factor proporciona información acerca de la masa del átomo del material. Para una colisión elástica, K puede calcularse si se considera la conservación de la energía y el momento lineal como se ve en la figura 3.16. En la imagen se representa una partícula con masa m_1 y velocidad v_1 que choca con otra de masa m_2 pero que se halla en reposo.

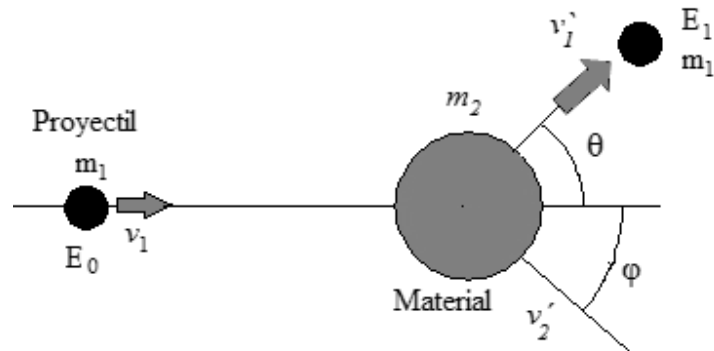


Figura 3.16. Diagrama para el cálculo del factor cinemático de dispersión.

Haciendo el análisis apropiado de conservación de energía y momento lineal se tiene:

$$m_1 v_1 = m_2 v_2 \cos \varphi + m_1 v_1' \cos \theta \quad (4)$$

$$0 = m_1 v_1' \sin \theta + m_2 v_2 \sin \varphi \quad (5)$$

$$\frac{1}{2} m_1 v_1^2 = \frac{1}{2} m_2 v_2^2 + \frac{1}{2} m_1 v_1'^2 \quad (6)$$

Con las ecuaciones (3), (4) y (5) y realizando operaciones algebraicas se llega a que el factor cinemático en el sistema de laboratorio es:

$$K = \left(\frac{m_1 \cos \theta + \sqrt{m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta}}{m_1 + m_2} \right)^2 \quad (7)$$

Donde θ es el ángulo al cual se retrodispersa el proyectil. Dado que m_1 , E_0 y θ son cantidades conocidas, se puede determinar m_2 de la ecuación (7) y así determinar cualquier elemento que componga al material [15].

3.3.2.2 Sección eficaz diferencial.

La sección eficaz representa la probabilidad de que ocurra el fenómeno de dispersión. Un experimento de dispersión de partículas se muestra en la figura 3.17, en el cual se muestra un material delgado, con densidad areal (número de átomos por unidad de área) n_α . El detector abarca un ángulo sólido Ω , y está colocado con su centro a un ángulo θ (ángulo de retrodispersión) respecto a la dirección del haz incidente. En un intervalo de tiempo dado, un número (generalmente muy grande) de proyectiles N_{inc} bombardea al material. De éstos, N_{disp} son dispersados hacia el detector. La relación N_{disp}/N_{inc} es proporcional al ángulo sólido Ω , a la densidad areal del blanco, y a una cantidad σ que representa la sección eficaz promedio. A esta cantidad se le llama sección diferencial [16].

$$\frac{N_{disp}}{N_{inc}} = \sigma n_\alpha \Omega \quad (7)$$

Si se mide o determina la sección eficaz, se tiene el número de partículas incidentes (N_{inc}) y dispersadas N_{disp} y el ángulo sólido Ω , entonces con la ecuación (8) es posible calcular la densidad areal (n_α) para obtener la composición de la muestra.

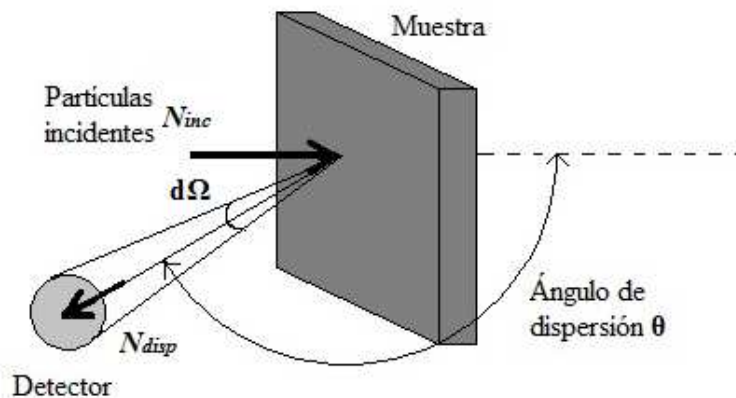


Figura 3.17. Esquema que representa la definición de sección eficaz diferencial.

3.3.3 Análisis de un espectro

La forma de estudiar la energía de los iones consiste en contar el número de partículas que son retrodispersadas con energías que están dentro de los intervalos que cubren a su vez todo el intervalo de energía esperadas como resultado de esa retrodispersión. Dependiendo del tipo de muestra que se tenga el análisis va a cambiar.

En la figura 3.19 se observa una muestra gruesa, pero se toma en cuenta solo la región cercana a la superficie; una capa.

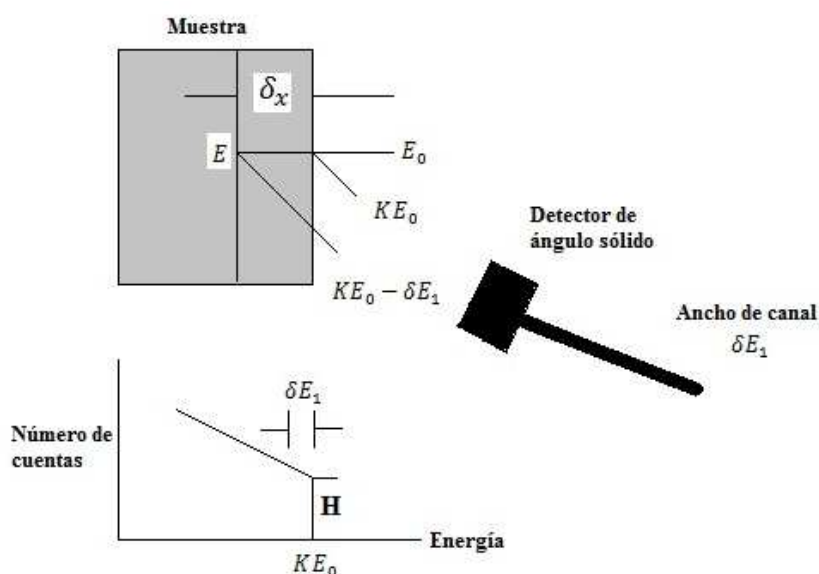


Figura 3.19 Esquema representativo de una muestra gruesa en la zona superficial.

De la imagen se observa que δE_1 , es el ancho de canal de energía del sistema de detección, δE es el grosor de una capa y H es la altura del espectro o número de cuentas por canal.

Para este tipo de muestra, la altura del espectro depende del número total de iones incidentes Q, el ángulo sólido del detector Ω , la sección eficaz promedio σ y el número total de átomos por unidad de área $N\delta_x$, que da la diferencia de energía correspondiente al ancho de canal con lo cual

$$\delta E_1 = KE_0 - E_1 \tag{9}$$

$$H = Q\sigma\Omega N\delta_x \tag{10}$$

De esta manera con la ecuación (10) se puede obtener la altura del espectro, dado que las demás variables son conocidas

En segundo caso es el de una muestra gruesa a una profundidad x , (figura 3.20).

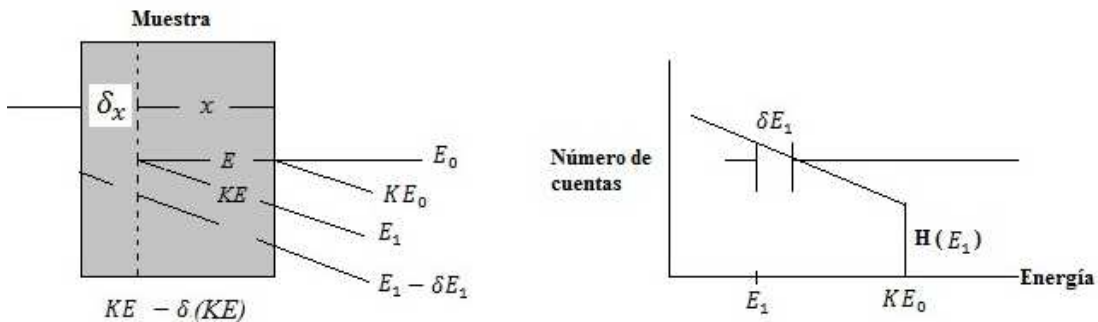


Figura 3.20

Para explicar el espectro, primero los iones inciden en el material con una energía E_0 algunos se retrodispersan en superficie con una energía KE_0 , pero otros iones seguirán avanzando en el material perdiendo energía por su interacción con electrones o átomos del material, hasta retrodispersarse a una profundidad x con una energía KE . Durante el trayecto de retrodispersión el ion tiene que recorrer otra vez la distancia x , perdiendo más energía y saliendo del material con una energía E_1 .

El espectro RBS de los iones detectados deberá tener registros solamente para energías menores a KE_0 , generando una especie de escalón. La posición donde inicia el escalón nos indica con qué elemento atómico del material chocó el proyectil, los demás registros del espectro indican a que profundidad se produce la retrodispersión; así a menor energía registrada, mayor profundidad donde colisionó el ion [17].

Cuando el blanco es una película delgada (figura 3.21) significa que la pérdida de energía no cambia en forma apreciable al variar la energía de E_0 a E y de KE a E_1 . Además se encuentra una relación entre el área del espectro y el espesor de la película, tal como se muestra a continuación.

$$A = H \frac{\Delta E}{\delta E_1} \quad (11)$$

De esta manera se tiene que:

$$A = Q\sigma\Omega Nt \quad (12)$$

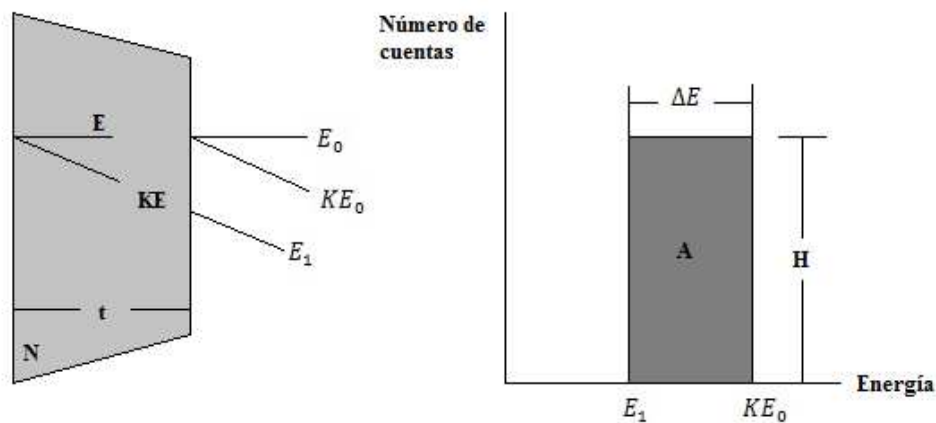


Figura 3.21 Espectro (teórico) de una película delgada de un solo componente.

3.3.4 Programa de simulación SIMRA

Los datos provenientes del analizador multicanal y que son registrados en la computadora no tienen un formato adecuado para su estudio. Para evaluar los datos existen diversos programas como RUMP, RBX y SIMRA. En este trabajo se utilizó el código SIMNRA [M. Mayer, *SIMNRA User's Guide*, Version 6.0, Max Planck-Institute für Plasmaphysik, Garching (2010)].

SIMRA es un programa de simulación que calcula y simula espectros RBS, fue desarrollado en 1996 por M. Mayer, del Instituto de Física del plasma en Alemania. Básicamente el programa consiste en cargar los datos provenientes del multicanal, previamente transformados a la extensión txt, obteniéndose un espectro, que es el espectro experimental.

Para determinar la concentración y profundidad de los elementos presentes en el material es necesario calibrar el sistema de detección. La calibración se realiza a partir de una muestra con elementos conocidos. El espectro de esta muestra, conocida como patrón de calibración, se ingresa al programa SIMNRA aunado a los datos experimentales, tales como energía y tipo del proyectil y ángulos de incidencia y de retrodispersión del ion incidente. Posteriormente, usando la ecuación (1) y conociendo la energía de incidencia y el factor cinemático de dispersión de cada elemento, se calcula la energía retrodispersada en superficie para cada elemento; se mide el número de canal correspondiente a la superficie de cada elemento; y es partir de estos dos valores, que se calibra el sistema.

Una vez que se cuenta con la calibración del sistema, se ingresan en el programa SIMNRA los espectros experimentales de las muestras a analizar. Usando como base una propuesta elemental del material, así como la calibración y los parámetros experimentales proporcionados, el programa SIMNRA calcula y simula los espectros RBS, obteniéndose un espectro RBS teórico. Éste se compara con el experimental, refinándose paulatinamente la composición propuesta hasta que los espectros teórico y experimental alcanzan la máxima similitud. La composición del material se considera que ha sido determinada cuando se llega a este punto.

La figura 3.22 muestra el espectro de un experimento de implantación de iones de plata (Ag) en dióxido de silicio (SiO_2). El espectro en color rojo representa los datos experimentales provenientes del multicanal ya transformados a una extensión que reconoce el programa SIMNRA. El espectro azul es el simulado y se tienen que realizar una serie de pasos explicados anteriormente para que coincida con el espectro experimental. Las líneas de colores representan los elementos que componen la muestra en este caso serían: oxígeno (O), silicio (Si) y plata (Ag). De esta manera la composición de la muestra quedaría como la figura 3.22 (b).

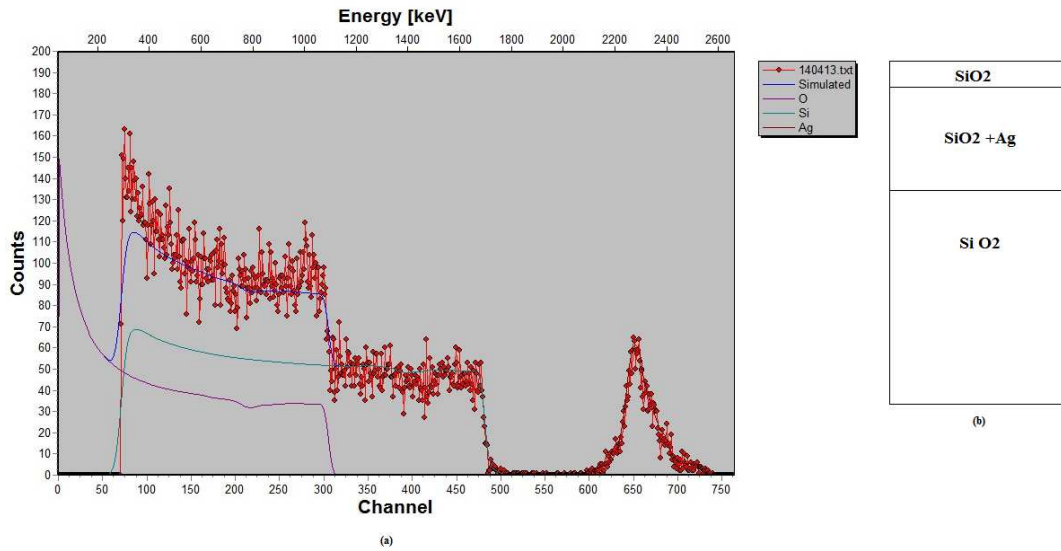


Figura 3.22 (a) Espectro simulado en el programa SIMRA y (b) composición de la muestra.

3.4 Luminiscencia

Se define como el fenómeno que experimentan algunos materiales capaces de absorber energía y de volver a emitirla en forma de luz visible. Los fotones de luz emitida se generan por transiciones electrónicas en el sólido. Cuando se absorbe energía mayor o igual a la energía del gap, un electrón en su estado base tiene la energía suficiente para saltar a un estado excitado; cuando este electrón cae a un estado energético inferior, se desexcita emitiendo radiación en forma de luz visible (figura 3.23).

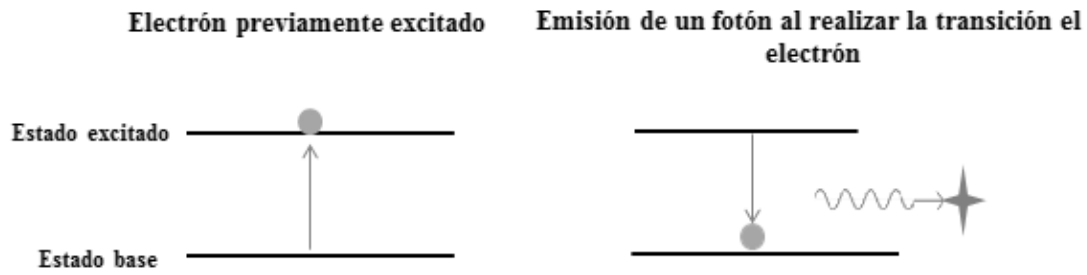


Figura 3.23 Excitación y desexcitación de un átomo.

3.4.1 Fotoluminiscencia

Es una técnica poderosa, no destructiva, para medir las propiedades ópticas de los materiales. La fotoluminiscencia es la emisión espontánea de luz de un material bajo una excitación óptica (fotones) [19].

La emisión de radiación es un proceso inverso a la absorción, en donde los electrones que están ocupando estados de mayor energía al que ocuparían en condiciones de equilibrio, realizan una transición. La diferencia de energía de los dos estados se emite como radiación electromagnética (figura 3.25).

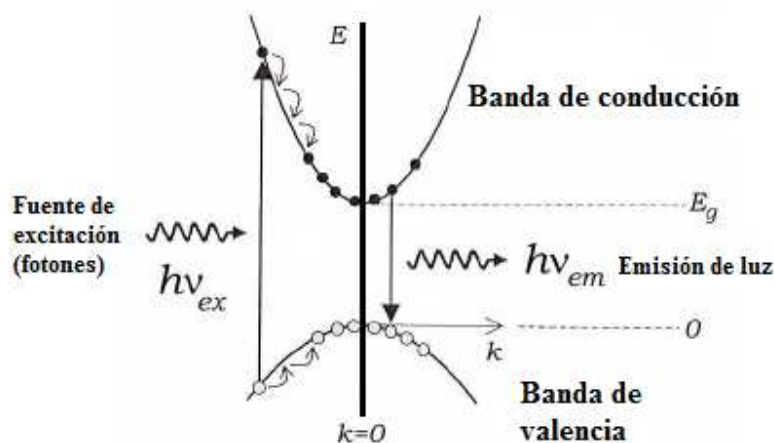


Figura 3.24 Esquema de bandas de energía con gap directo de un semiconductor, donde se representa la fotoluminiscencia (reproducida de [20])

En un experimento de fotoluminiscencia los pares electrón-hueco ($e^- - h^+$) son excitados mediante la absorción de luz. Los pares $e^- - h^+$ retornan a su estado de equilibrio a través de recombinaciones radiativas y no radiativas.

Durante la fotoluminiscencia se llevan a cabo tres procesos principales:

1. Excitación por $e^- - h^+$: la absorción del fotón en el material se debe a la excitación de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción. Los estados iniciales y finales se deben a la energía de excitación.
2. Termalización y difusión de los pares $e^- - h^+$: cuando la energía de excitación es mayor que la energía del Gap, los pares $e^- - h^+$ presentan una energía cinética mayor que la energía térmica de la red. Los portadores previamente excitados tienden a alcanzar el equilibrio térmico con la red (termalización) y como consecuencia tienden a los límites de las bandas. Cuando sucede el proceso de termalización los portadores se mueven dentro del material (difusión). Los mecanismos para alcanzar el equilibrio térmico, compiten con los procesos radiativos de la recombinación de pares $e^- - h^+$.
3. Recombinación de pares $e^- - h^+$: una vez que los electrones ya han sido excitados de la banda de valencia a la banda de conducción, estos tienden a su estado de equilibrio, el electrón ocupa nuevamente el hueco dejado, para ello libera energía. Existen diversas maneras de liberarla pero cuando la energía liberada es forma de fotón, el proceso es conocido como *recombinación radiativa*.

3.4.2 Fotoluminiscencia en Nanocristales de silicio (Si-nc).

Investigaciones realizadas hasta hoy han confirmado que las nanoestructuras de silicio embebidas en matrices aislantes son responsables de la emisión de luz visible.

El proceso de fotoluminiscencia en silicio en bulto, como se había explicado anteriormente, es deficiente debido a que es un proceso de banda indirecta; sin embargo, en los últimos

años los expertos han encontrado la solución al disminuir las dimensiones del silicio hasta los nanómetros y lograr un confinamiento cuántico de las estructuras.

El confinamiento cuántico en Si-nc produce los siguientes efectos:

- ❖ Maximiza el confinamiento de portadores en una región espacial pequeña, reduciendo la probabilidad de encuentros con centros de recombinación no radiativa.
- ❖ La función de onda del electrón y del hueco en Si-nc incrementa su extensión en el espacio de momento produciendo un traslape entre dichas funciones. Como resultado, la proporción de recombinación radiativa y la eficiencia en la luminiscencia se incrementan en varios órdenes de magnitud.
- ❖ Se puede variar la longitud de onda de emisión en el visible y se controla por el tamaño de los nanocristales de silicio.
- ❖ Disminuye la absorción de portadores confinados debido al aumento de la longitud de onda de emisión.

De manera general podría decirse que las bandas de valencia y conducción llegar a ser cuasi directas en los puntos cuánticos de silicio, produciéndose la emisión (figura a).

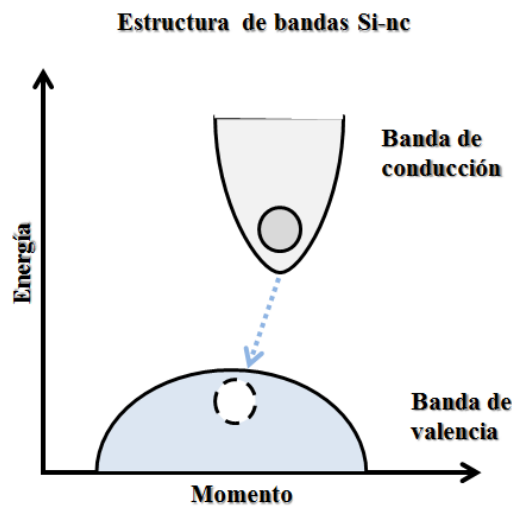


Figura 3.25 Diagrama que muestra como las bandas de valencia y conducción llegan a ser cuasi directas en Si-nc

Referencias

- [1] Sohail Anwar, M., Yasin Akhtar Raja, Salahuddin Qazi y Mohammad Ilyas. “*Nanotechnology for Telecommunications*”, CRC Press (2010).
- [2] Alejandro Fainstein y Karen Hallberg, “*Confinamiento cuántico en sistemas nanoscópicos*”. Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, CNEA (2001)
- [3] Pavesi L., Dal Negro L., Mazzoleni C., Franzo G. y Priolo F. “*Optical gain in silicon nanocrystals*”, *Nature*, 408:440–444 (2000).
- [4] Philippe M. Fauchet. “*Light emission from Si quantum dots*”, *Materials Today* (2005), p (27).
- [5] José María Albella Martín. “*Láminas delgadas y recubrimientos: preparación, propiedades y aplicaciones*”. Consejo Superior de Investigaciones Científicas (España 2003).
- [6] Lorenzo Pavesi, David J. Lockwood. “*Silicon photonics, Volumen 1*”. Ed. Springer (2004).
- [7] Luis Rodríguez Fernández, “*Aceleradores de Partículas: Irradiación con iones y electrones*”, Instituto de Física UNAM (2009).
- [8] Jorge Rickards Campbell, “*La física de las radiaciones en materia*” Dirección General de Divulgación de la Ciencia. UNAM (2001).
- [9] James F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack,” *SRIM – The stopping and range of ions in matter 2010*” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 268 (2010) 1818–1823.
- [10] Página de internet <http://www.srim.org/>
- [11] R. W. Christy, Agnar Pytte, “*Estructura de la materia*” Ed. Reverte (1971).
- [12] Michael Anthony Nastasi, James W. Mayer, James Karsten Hirvonen, “*Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications*”. Cambridge Solid State Science Series. (1996).
- [13] Javier Miranda Martín del Campo, “*Técnicas Analíticas de origen nuclear: un curso introductorio*”. Instituto de Física UNAM, México (1996).

- [14] W.-K. Chu, J.W. Mayer and M.-A. Nicolet, “*Backscattering Spectrometry*”, Ed. Academic Press, Nueva York (1978).
- [15] Tesis de doctorado de López Suárez Alejandra, “*Estudio comparativo de la absorción de hidrógeno en Ti y Ti-6AL-4V utilizando técnicas de origen nuclear*”. UNAM. Posgrado de Ciencias Físicas (2004).
- [16] Tesis de licenciatura de Araceli Aldana Vázquez, “*Caracterización por medio de RBS de la distribución de iones de plata implantados en sílice a energías de megaelectronvolts*”. UNAM, Facultad de Ciencias (2008).
- [17] Hernando Ariza Calderón, “*Fabricación y caracterización óptica de materiales semiconductores para aplicaciones en optoelectrónica*”. Rev. Acad. Colomb. Cienc, 2003.
- [18] Hernando Ariza Calderón, “*Fabricación y caracterización óptica de materiales semiconductores para aplicaciones en optoelectrónica*”. Rev. Acad. Colomb. Cienc, (2003).
- [19] Tesis de doctorado de Abdellah Benami “*Estudio sobre la fotoluminiscencia y formación de nanocúmulos de silicio en películas delgadas de nitruro de silicio*”. UNAM. Instituto de Investigaciones en Materiales (2008).
- [20] M. Fox, “*Optical properties of Solids*”, Oxford Master Series in Condensed Matter Physics, Oxford University Press. (2001).

CAPÍTULO 4

Desarrollo experimental

4.1 Acelerador Pelletron

Los aceleradores de partículas son instrumentos que emplean campos eléctricos para acelerar partículas estables (protones, electrones, iones pesados) a alta energía. El desarrollo de los aceleradores se ha debido en gran medida al estudio de la estructura de la materia a nivel subatómico; sin embargo, aunque en su origen, la motivación para su construcción ha sido principalmente científica, su desarrollo está más asociado a la física de materiales, la ingeniería, la tecnología y el diseño [1]. De una manera sencilla se podría decir que el tubo de rayos catódicos de los televisores antiguos es el primer acelerador construido.

El acelerador utilizado para llevar a cabo la implantación de iones, así como el experimento RBS fue el acelerador de partículas del Instituto de Física de la UNAM tipo PELLETRON, modelo 9SDH-2 de National Electrostatic Corporation. Éste es un acelerador tandem electrostático de 3.0 MV y es capaz de acelerar una gran variedad de iones en un rango amplio de energías.

La configuración experimental del acelerador se muestra en la figura 4.1. Básicamente se compone de dos fuentes de iones, un tubo o tanque acelerador y las líneas de análisis. El acelerador de partículas está contenido en un tanque que se encuentra relleno con hexafluoruro de azufre (SF_6); este gas permite trabajar con altos voltajes, evitando las descargas eléctricas que pudieran producirse durante el funcionamiento del acelerador. El Pelletron se compone de dos fuentes negativas de iones:

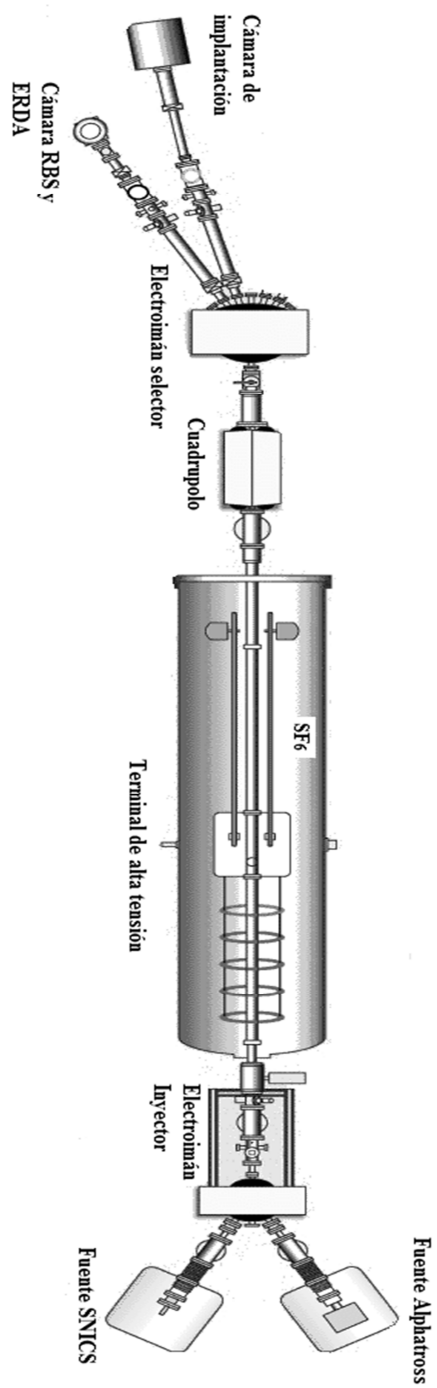


Figura 4.1 Imagen del acelerador de partículas PELLETRON modelo 9SDH-2

- ❖ la Alphotross, que genera iones que provienen de elementos gaseosos usando para ello una fuente de radiofrecuencia. Un gas o mezcla de gases se hace fluir dentro de un tubo de cuarzo conectado a un oscilador de RF (radiofrecuencia) cuya tarea es disociar el gas. Una diferencia de voltaje (cerca de 2 o 6 kV) es usada para empujar los iones fuera de la cámara a través de un orificio de salida, creando un haz continuo. Este haz es inmediatamente inyectado a una celda de rubidio para llevarse a cabo el intercambio de carga esto para producir el haz negativo.

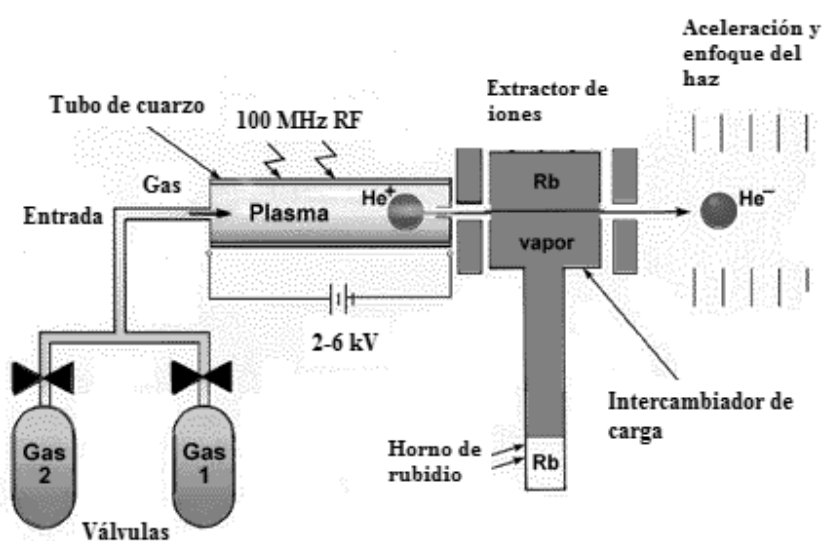


Figura 4.2 Esquema del funcionamiento de la fuente Alphotross.

- ❖ la SNICS (fuente de iones secundarios producidos por erosión iónica debida al cesio) que genera iones provenientes de elementos solidos depositados en cátodos. En este trabajo se utilizaron las dos fuentes, la SNICS para producir los iones de Si y Cu que se implantaron en el sustrato y la Alphotross para producir las partículas alfa usadas como proyectiles durante el experimento RBS. La fuentes de iones SNICS produce un haz de iones negativos y trabaja de la siguiente forma: el cesio se mantiene dentro de un depósito, que es calentado aproximadamente a 120°C , de modo que se forma vapor de cesio. Este vapor se eleva del depósito a una región encerrada entre un cátodo refrigerado y una superficie caliente que sirve como ionizador. El cesio ionizado es acelerado hacia el cátodo del material, impactándose

con éste, erosionándolo y sacando átomos del material. Las partículas obtenidas del proceso anterior ganarán electrones al entrar en contacto con el cesio, lo que provocara que se carguen negativamente (figura 4.2).

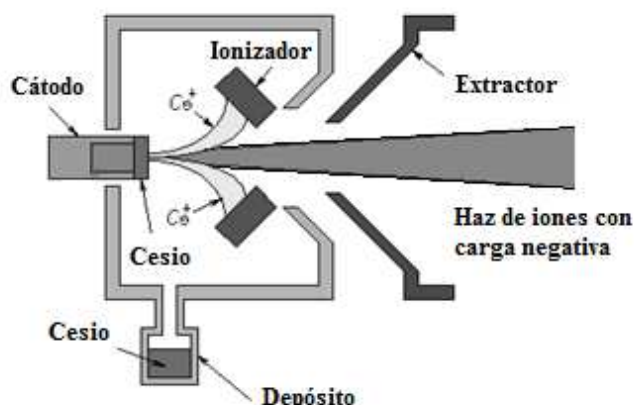


Figura 4.3. Esquema de funcionamiento de la fuente de iones SNICS

Una vez que se tiene el haz de iones negativos, éste entra a una sección denominada de baja energía, donde se produce una pre-aceleración mediante un imán inyector. Posteriormente, los iones se aceleran debido a la presencia de una terminal de alta tensión cargada positivamente. Como los iones están cargados negativamente y la terminal tiene carga positiva, los iones negativos son atraídos por la terminal y se da una primera gran aceleración. Una vez alcanzada esta primera aceleración, los iones pasan a través de un dispositivo llamado *Stripper*, cuya función es extraer electrones de los iones, que, como consecuencia, adquieren carga positiva. Ahora, los iones y la terminal están cargados positivamente, por lo que éstos son repelidos por la terminal, obteniéndose una segunda aceleración. Esta es la gran ventaja de los aceleradores tipo Pelletron, pues es posible obtener una doble aceleración de los iones usando sólo un tubo acelerador. Después de la aceleración, el haz de iones es enfocado por medio de campos magnéticos (cuádruplo magnético) para llevarlo hasta las líneas de análisis, donde se llevan a cabo los estudios de implantación iónica y las medidas de Retrodispersión de Rutherford.

4.2 Implantación de iones

El material utilizado como sustrato para implantar los iones de silicio y cobre fue el dióxido de silicio de alta pureza o sílice (suprasil 3000®). Se requiere que sea de alta pureza debido a que la presencia de impurezas en el material afectaría la emisión de luz del dispositivo a construir. Las muestras consisten en placas de sílice de 2.5×2.5 cm y un espesor de 0.1 cm, tal como se observa en la figura 4.4

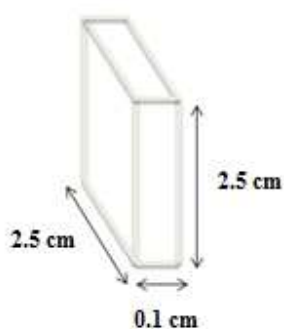


Figura 4.4

4.2.1. Implantación de iones de silicio

El sustrato de sílice se colocó en la cámara de implantación del acelerador de partículas. El esquema de la línea de implantación del acelerador se muestra en la figura 4.5.

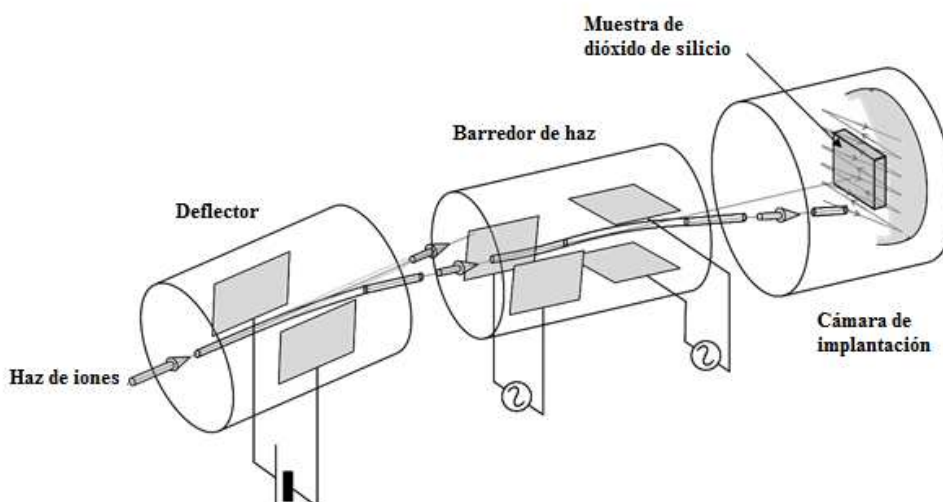


Figura 4.5 La imagen muestra el haz de iones pasando por el deflector, el cual cambia la dirección del haz, el barredor de haz se utiliza para producir una distribución uniforme de iones en la muestra.

La primera implantación consistió en irradiar la muestra con iones de Si^{+2} (carga +2) a una energía de 5 MeV, con una fluencia nominal de $\Phi = 1.4 \times 10^{17}$ [iones de silicio/ cm^2] y a un ángulo de 0° . La corriente promedio durante los días de implantación fue de 800 nA. Una vez implantados los iones de silicio, se sometió la muestra a un tratamiento térmico para generar las nanopartículas de silicio; el proceso térmico se explicará más adelante.

Para conocer la distribución teórica de los iones de silicio implantados en SiO_2 se utilizó el software SRIM. El perfil de concentración de los iones de Si en SiO_2 se muestra en la figura 4.6

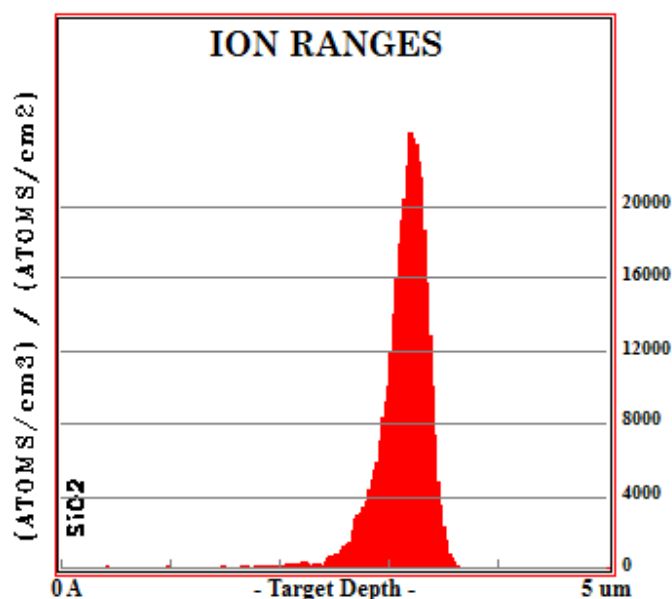


Figura 4.6 Distribución de los iones de silicio en SiO_2 . A simple vista se ve que los iones de silicio están presentes desde una profundidad de $2 \mu m$ hasta aproximadamente $3.6 \mu m$.

4.2.2 Implantación de iones de cobre.

La muestra implantada con iones de silicio se cortó obteniéndose piezas de 0.85 cm por 0.9 cm , con un área de 0.765 cm^2 . Cada muestra se implantó con iones de cobre Cu^{+2} a diferentes energías, con una fluencia de $\Phi = 6 \times 10^{16}$ [iones de cobre/ cm^2] y ángulo de incidencia del haz a 0° . Variando la energía los iones de cobre se implantaron a diferentes distancias entre las nanopartículas de silicio. En la tabla 4.1 se enumeran las muestras implantadas y la energía aplicada.

Tabla 4.1 Características de las muestras implantadas

Muestras	Energía de implantación	Impurezas implantadas
M1	1 Mev	$Si^{+2} + Cu^{+2}$
M2	2 Mev	$Si^{+2} + Cu^{+2}$
M3	3 Mev	$Si^{+2} + Cu^{+2}$

Para conocer la cantidad de iones implantados teóricamente se utilizó la siguiente ecuación:

$$\frac{(afluencia)(1.6 \times 10^{-19})(\text{área de la muestra})}{(1 \times 10^{-8})} = \text{Número de iones a implantar} \quad (1)$$

De la ecuación (1), los valores numéricos son constantes, y corresponden a la carga del electrón (1.6×10^{-19}) y a un factor de conversión (1×10^{-8}) relacionado con la corriente; mientras que los valores que cambian son: la afluencia y el área de la muestra. Con esta ecuación se calculó el número total de iones de cobre teóricos a implantar en las muestras de dióxido de silicio. Dado que no se varió la afluencia y el área fue la misma para las tres energías, se obtuvo lo siguiente:

$$\frac{(6 \times 10^{16})(1.6 \times 10^{-19})(0.765)}{(1 \times 10^{-8})} = 1,468,800 \text{ iones de cobre} \quad (2)$$

De acuerdo a la ecuación (2) el número total de iones de cobre a implantar fue de: 1,468,800 iones de cobre (Cu^{+2}) en cada muestra. El número de iones de silicio implantados se obtuvo de una manera similar.

La simulación de la distribución de iones cobre para cada muestra a diferente energía se realizó con el software SRIM. Cuando la energía empleada para implantar los iones de cobre es 1 MeV, se observa que la profundidad alcanzada es de aproximadamente 1 μm en el cuarzo, tal como se observa en la figura 4.7 (a). En esta figura también se aprecia la separación entre los iones de silicio y los de cobre.

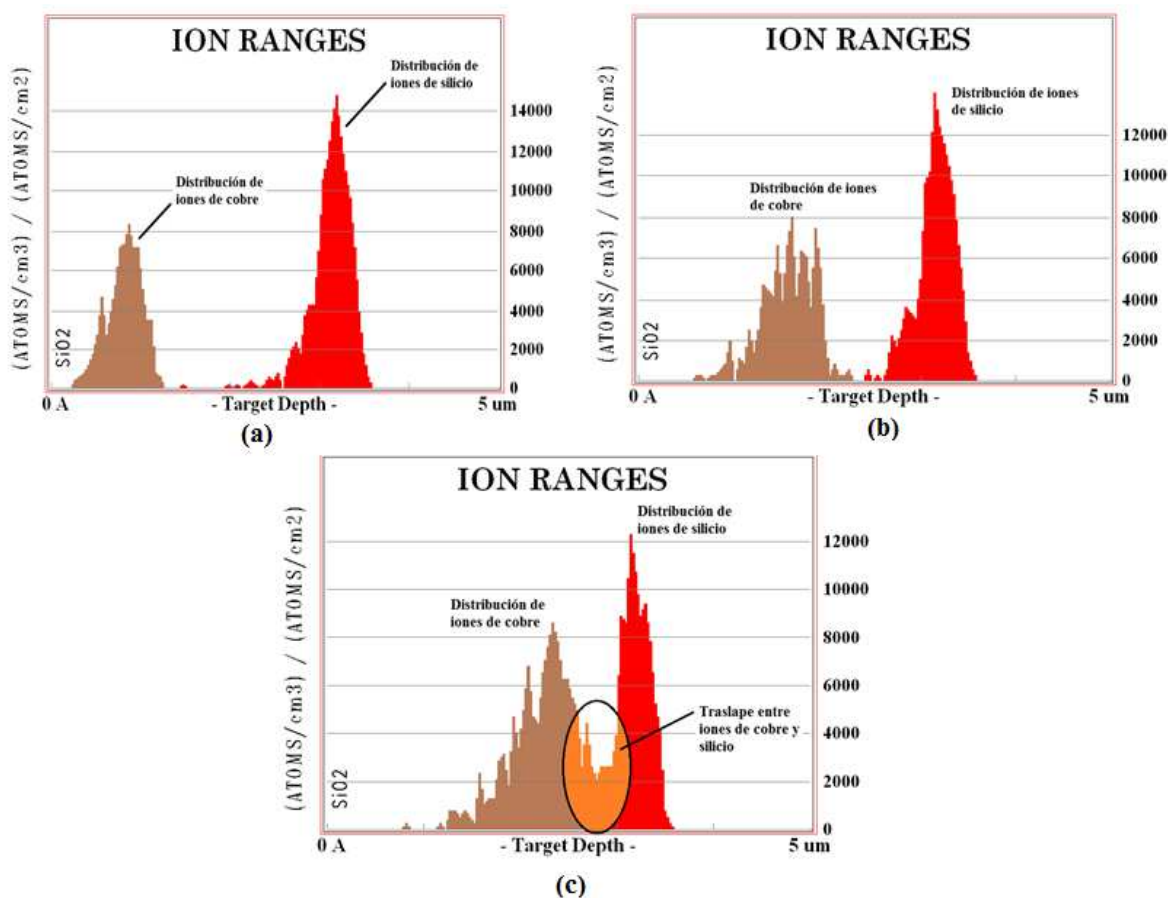


Figura 4.7. Distribución de los iones de cobre y silicio. (a) Si-5 MeV +Cu- 1 MeV, (b) Si-5 MeV +Cu- 2 MeV y (c) Si-5 MeV +Cu- 3MeV.

Conforme se incrementa la energía de implantación de los iones de cobre, éstos se acercan más a los de silicio hasta llegar a traslaparse (figura 4.7 (c)) Con estas tres distribuciones de iones de silicio y cobre, obtenemos tres sistemas a estudiar:

- a) Cuando las distribuciones de los iones de silicio y cobre están totalmente separados
- b) las colas de las distribuciones de los iones de silicio y cobre están ligeramente juntas
- c) las distribuciones de silicio y cobre se traslapan.

4.3 Horno para tratamiento térmico.

4.3.1 Horno

El tratamiento térmico de las muestras se realizó en un horno de la marca THERMOLYNE 79300. Esta mufla alcanza una temperatura máxima de 1200°C y es de atmósfera positiva; es decir, no es posible reducir la presión del sistema por debajo de la presión atmosférica. El dispositivo consta de un tubo de cuarzo de 3.85 cm de diámetro y 1.15 metros de largo, que se coloca dentro del horno. En él se calientan los gases a utilizar durante el experimento, los cuales pueden ser un único gas o la combinación de ellos. En el tubo se introduce un portamuestras de cuarzo donde se coloca el material al cual se le realizará el tratamiento térmico, éste queda en el centro del tubo, tal como se observa en la figura 4.8.

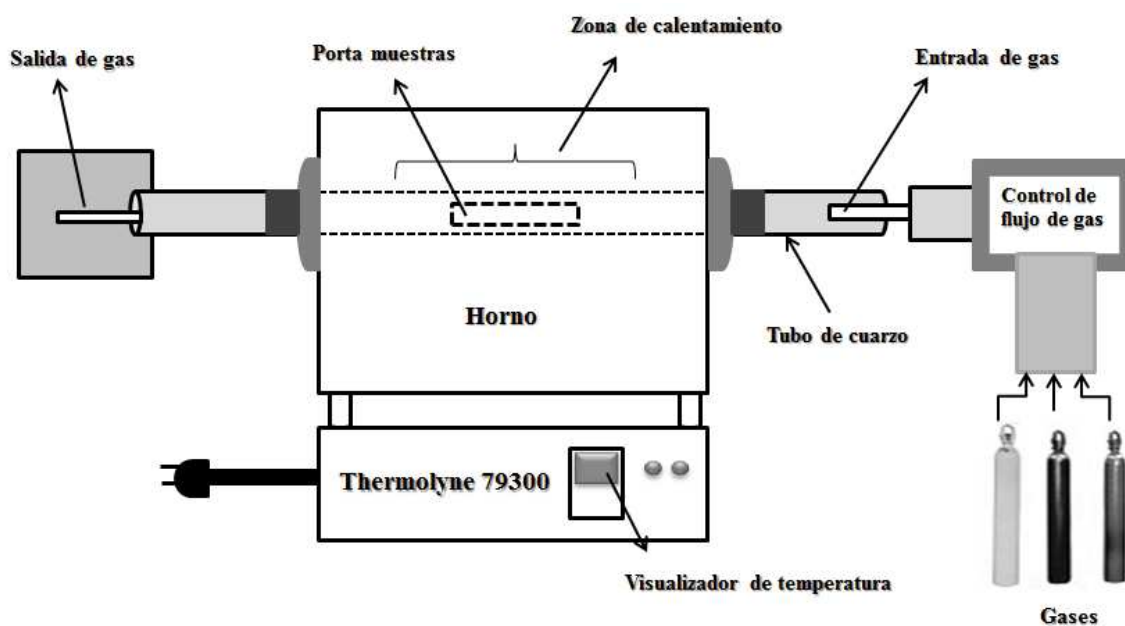


Figura 4.8. Imagen del horno Thermolyne 79300 utilizado para realizar el tratamiento térmico a las muestras.

4.3.2 Tratamiento térmico

Las muestras son sometidas a un tratamiento térmico con la finalidad de nuclear los defectos producidos durante la implantación y generar las nanopartículas de silicio y cobre.

Se aplicaron dos tratamientos térmicos, uno para generar los nanocristales de silicio y posteriormente, otro para la formación de nanopartículas de cobre.

Los nanocristales de silicio se produjeron utilizando una atmósfera reductora; es decir, la muestra se calentó haciendo circular por el tubo de cuarzo una mezcla de gases de nitrógeno e hidrógeno en una proporción de 50% para cada uno. Antes de encender el horno se abren las válvulas de los gases N e H permitiendo un flujo de $150 \text{ cm}^3/\text{min}$ durante 10 minutos. Transcurrido este tiempo se reduce el flujo a $50 \text{ cm}^3/\text{min}$, y así se mantiene durante 1 hora a una temperatura de 1100°C . El horno tarda aproximadamente 30 minutos en llegar a 1100°C , a este tiempo se le llama rampa de calentamiento del horno. Transcurrido el tiempo del tratamiento térmico (1.5 horas), el horno se apaga y se deja enfriar la muestra hasta alcanzar la temperatura ambiente, continuando con el flujo de gases para evitar la oxidación de las muestras.

Las tres muestras implantadas con iones de cobre fueron sometidas a otro tratamiento térmico, esta vez se utilizó una atmósfera oxidante (aire) a una temperatura de 900°C durante 1 hora. El proceso de enfriamiento de las muestras fue similar al que se realizó en el caso del silicio.

4.4 Experimento RBS

Para conocer la distribución de cobre en las muestras de dióxido de silicio se llevó a cabo el estudio de RBS en la cámara de análisis del acelerador PELLETRON. Los dispositivos que componen el sistema de experimentación son: portamuestras, colimador, detector de barrera superficial (conectado a un preamplificador y después a un amplificador, cuya salida va a un analizador multicanal) y el sistema de vacío de la cámara.

Para las mediciones de RBS se utilizaron partículas α (átomos de He doblemente ionizados; es decir, que han perdido sus dos electrones) a una energía de 4 MeV. Las tres muestras se colocaron en el portamuestras y se irradiaron una a una con partículas α . A medida que las partículas α interactuaban con cada uno de los elementos que componían la muestra, éstas alcanzaban al detector y la energía de las partículas retrodispersadas eran registradas en el analizador multicanal hasta formarse el espectro RBS. Para la muestra M3 la energía se cambió a 5 MeV para poder detectar a las partículas α retrodispersadas por los átomos de cobre, esto porque están implantadas a una mayor profundidad y se necesita mayor energía para llegar hasta ellas.

La imagen 4.9 muestra la cámara de análisis RBS y las condiciones experimentales utilizadas para llevar a cabo el experimento. A continuación se explica cada parte que compone el experimento RBS:

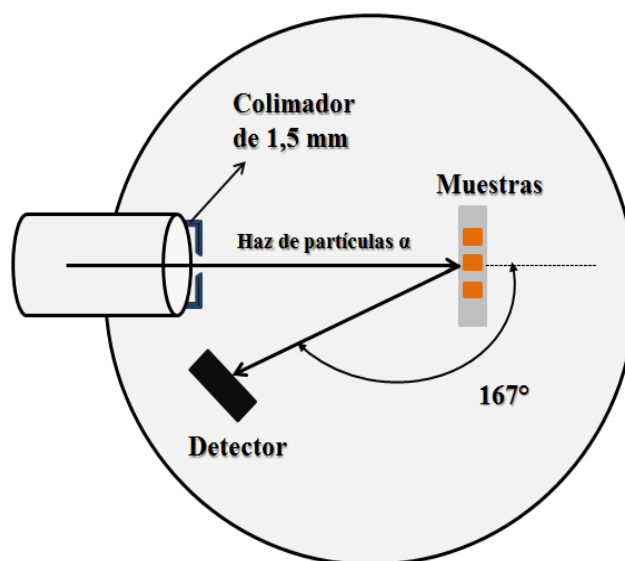


Figura 4.9 Cámara de análisis. En la imagen se muestra la configuración para llevar a cabo el análisis RBS a las muestras.

Un haz de partículas α proveniente del acelerador pasa a través de un colimador de 1.5 mm, e incide sobre la muestra a analizar. Las partículas α interactúan con los elementos del material y son retrodispersadas hasta alcanzar un detector de estado sólido o también llamado de barrera superficial, colocado a 167° con respecto a la dirección del haz.

Los detectores de barrera superficial (figura 4.10) son empleados para detectar partículas cargadas, como radiación alfa, electrones u otros iones. Se operan generalmente en vacío y a temperatura ambiente. Tienen una ventana muy delgada de oro para permitir el paso de la radiación sin producir una atenuación apreciable en su energía e intensidad.

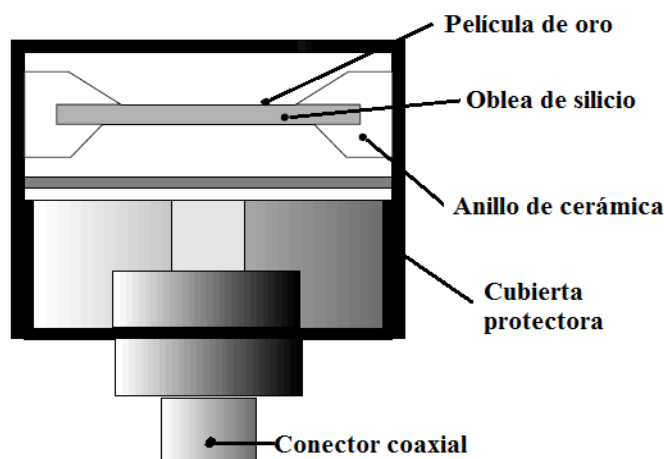


Figura 4.10 Diagrama de un detector de barrera superficial

Los detectores requieren equipo electrónico auxiliar el cual incluye una fuente de alto voltaje, un amplificador (además de un preamplificador), un escalador y una unidad de registro de conteo.

El primer circuito asociado a un detector es el preamplificador, su función consiste en recoger la señal (pulso de voltaje) del detector y aumentar su amplitud hasta un tamaño procesable por el amplificador. La señal de salida del preamplificador entra al amplificador en el cual se produce un pulso con una altura proporcional a la de la partícula detectada. Dado que la señal obtenida es analógica, ésta ingresa a un CAD (convertidor analógico-digital) para que se pueda aplicar a un analizador multicanal. Al final se obtiene el espectro de energía de las partículas retrodispersadas.

Los resultados obtenidos de las tres muestras se analizaron por medio del programa SIMRA.

4.5 Sistemas para estudio de fotoluminiscencia.

Para caracterizar la fotoluminiscencia de las muestras en este caso fue necesario utilizar dos dispositivos experimentales: láser de Ar y láser excímero pulsado. Las mediciones se realizaron en el Instituto de Investigaciones en Materiales (IIM) y en el Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico (CCADET), de la UNAM. A continuación se explican cada uno de ellos.

Sistema experimental utilizando como fuente de excitación láser de Argón

Los componentes generales del dispositivo experimental para medir la fotoluminiscencia se muestran en la figura 4.11. Este sistema de fotoluminiscencia es continuo, ya que el láser excita la muestra constantemente. Las mediciones se llevaron a cabo en el IIM y cada uno de los componentes tiene la siguiente función:

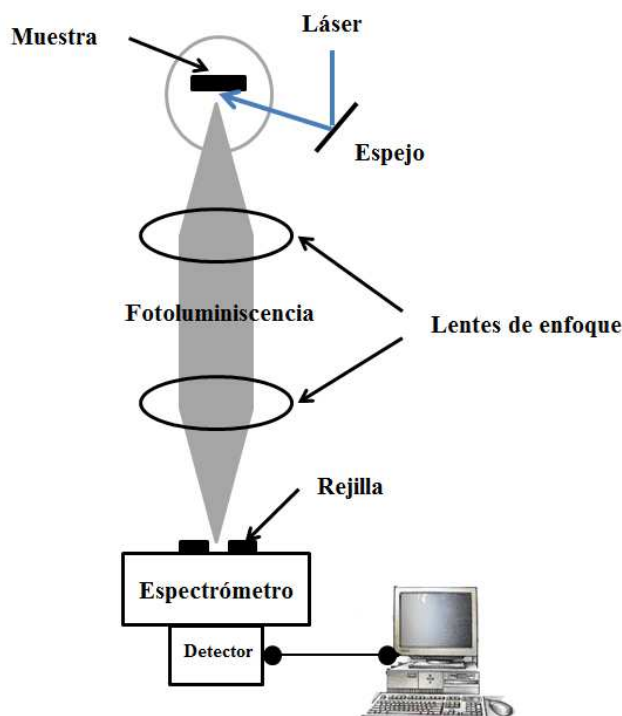


Figura 4.11 Esquema experimental para medir la fotoluminiscencia en el IIM. Reproducido de [8].

Fuente de excitación: la fuente de iluminación es un láser de argón (haz azul) con una longitud de onda de 458 nm. La energía de excitación debe ser superior a la energía del gap del silicio que es de aproximadamente 1.11 eV, para producir la emisión.

Espejo: es una superficie pulida que al incidir la luz se refleja de tal modo que llegue a la muestra.

Lentes de enfoque: dado que la luminiscencia se produce en todas direcciones, las lentes cumplen la función de concentrar o dispersar los rayos de luz dependiendo el caso. Existen diversos tipos de lentes que hacen converger o diverger la luz.

Espectrómetro: generalmente la palabra espectrómetro se aplica a los instrumentos que detectan y cuantifican las radiaciones electromagnéticas producidas. Poseen sistemas de detección eléctricos.

Detector: el espectro se registra midiendo la intensidad emitida en cada longitud de onda con un detector que generalmente consiste en un tubo fotomultiplicador.

Tubo fotomultiplicador: los fotomultiplicadores son un tipo de fototubos de vacío de respuesta rápida y sensibilidad muy elevada diseñados de tal forma que puede conseguirse una amplificación de varios millones dentro de un tubo por emisión de electrones secundarios. La radiación que llega al fotocátodo provoca la emisión de electrones primarios. De manera análoga a un fototubo normal de vacío, pero en el fotomultiplicador estos electrones son acelerados, por aplicación de un potencial positivo hacia una superficie sensible, de forma que al chocar con ella cada electrón primario es capaz de producir la emisión de cuatro o cinco electrones secundarios. Estos electrones son también acelerados hacia otra superficie sensible de tal forma que el número de electrones emitidos vuelve a multiplicarse por 4 o 5. Este proceso puede repetirse tantas veces como se desee, pero la mayoría de los fotomultiplicadores posee unos 10 electrodos o dinodos, como se conoce a estos dispositivos.

Con un fotomultiplicador se pueden medir intensidades de alrededor de unas 200 veces más débiles que las que se miden con otros dispositivos. La relación entre la sensibilidad del cátodo y la longitud de onda es la respuesta espectral del fotomultiplicador.

Al utilizar el láser de argón no se logró excitar a las muestras para que emitieran luz, es por esta razón que se buscó un láser con diferente longitud de onda para efectuar las mediciones. Los resultados se expondrán en el siguiente capítulo.

Sistema experimental utilizando como fuente de excitación láser excímero pulsado.

Las mediciones realizadas con este láser fueron realizadas en el CCADET de la UNAM, en el laboratorio de Fotofísica.

De igual manera que con el láser de argón las muestras fueron excitadas, pero ahora con un láser de excímero.

El sistema experimental se muestra en la figura 4.12. La fuente de excitación es un láser de alta potencia pulsado de 248 nm. Como la longitud de onda del haz se encuentra en rango del UV, éste no es visible. La frecuencia del haz es 5 Hz con una duración de pulso de 30 ns y una energía de 50 mJ.

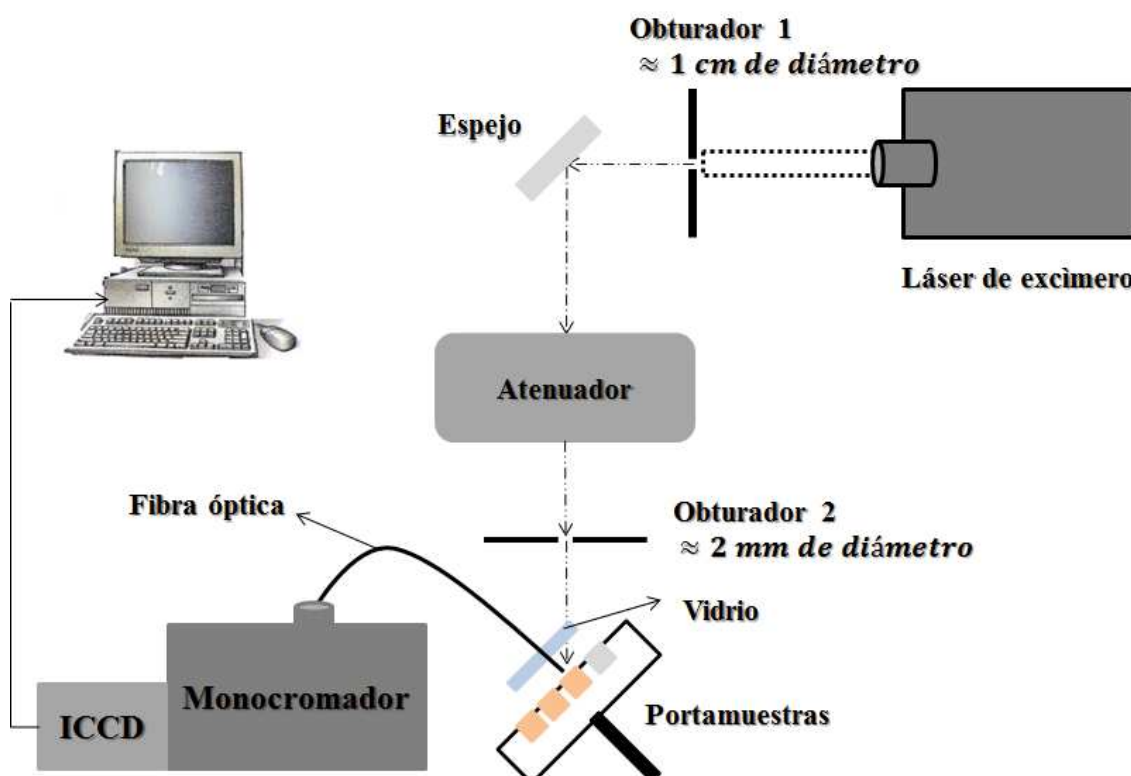


Figura 4.12 Sistema experimental utilizado para el estudio de fotoluminiscencia usando un láser excímero.

La forma del haz proveniente del láser es un rectángulo de 3×3 cm, es por eso que tiene que pasar por el obturador No. 1 de aproximadamente 1 cm de diámetro. El haz se refleja en un espejo y llega al atenuador, éste tiene la función de disminuir la energía que incide sobre él para evitar dañar a los demás dispositivos debido a que la potencia del láser es alta. A la salida del atenuador el haz ingresa al obturador No. 2 que tiene un diámetro de aproximadamente 2 mm. Este haz incide en cada una de las muestras a analizar provocando su excitación y su consiguiente emisión de luz.

Paralelo a las muestras se coloca un vidrio que no permite el paso de luz UV para no dañar al detector. La energía luminiscente emitida por las muestras se propaga a través de una fibra óptica colocada enfrente de las muestras. Esta luz llega a un monocromador cuya función es seleccionar una brecha corta de longitudes de onda. La radiación es detectada en un ICCD (Intensified Charge Couple Device). El detector está diseñado para intensificar y amplificar la luz incidente que se detecta mediante un sensor CCD.

Durante el experimento se colocaron las 4 muestras (3 muestras de Si+Cu y una muestra de Si, que se usa como referencia) de acuerdo con la imagen mostrada en la figura 4.13. El portamuestras se coloca en un mecanismo mediante el cual se puede mover en el eje Y y X, de tal manera que la fibra óptica apunte hacia el material a medir.

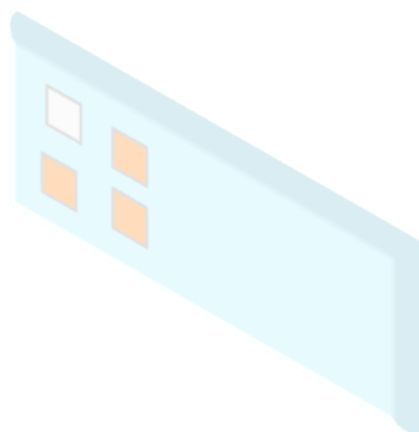


Figura 4.13 Imagen del portamuestras. Las muestras se pegan con cinta doble cara.

Capítulo 4: Desarrollo experimental

Para realizar las medidas se establecieron los siguientes parámetros: ganancia de 240 y acumulado de 100 cuentas.

Para la primera muestra (M1) se midieron dos regiones, tomando los siguientes intervalos de longitud de onda: 380, 515, 660 y 795 nm.

Para las siguientes tres muestras (M2, M3 Y M4) sólo se tomó una región (centro de la muestra) y se agregó un intervalo más de 930 nm.

Tabla 4.2 Muestras sometidas a experimento de fotoluminiscencia.

Muestras	Energía de implantación	Impurezas implantadas
M1	5 Mev	Si^{+2}
M2	1 Mev	$Si^{+2} + Cu^{+2}$
M3	2 Mev	$Si^{+2} + Cu^{+2}$
M4	3 Mev	$Si^{+2} + Cu^{+2}$

Los datos obtenidos se procesaron en el software OriginPro 8.

CAPÍTULO 5

Resultados

5.1 Composición elemental del material usando la técnica RBS.

Para conocer la composición elemental de las muestras se realizó el experimento de RBS. En las figuras 5.1, 5.2 y 5.3 se observa la composición de las tres muestras implantadas con iones de silicio y cobre. Se puede ver que conforme aumenta la energía de implantación de los iones de cobre (de 1 a 3 MeV), éstos se aproximan más a los iones de silicio, teniendo la muestra M1 una separación de aproximadamente 95 canales.

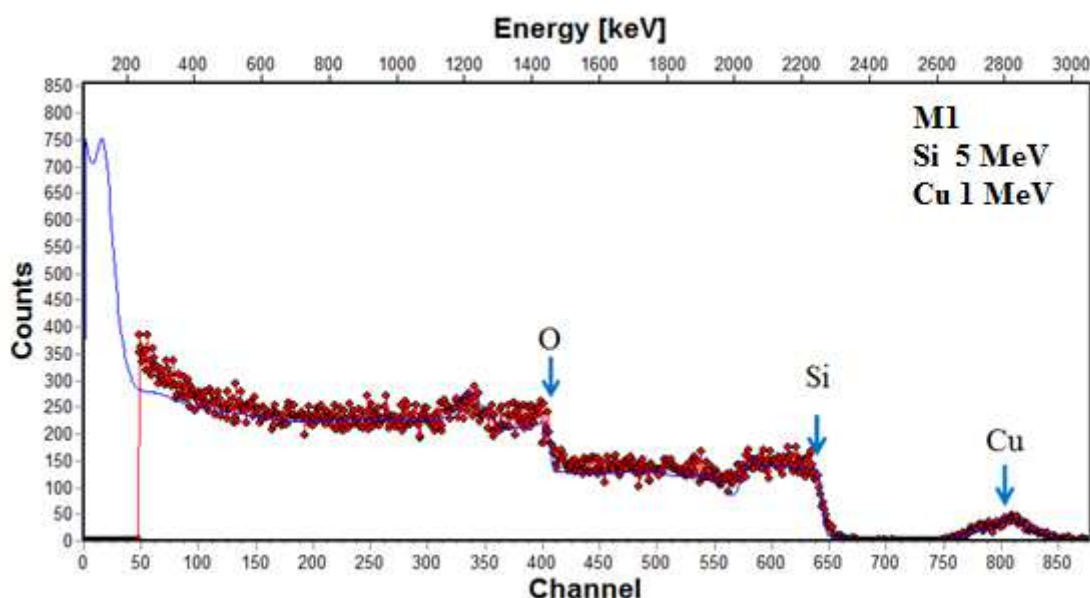


Figura 5.1 Espectro RBS de la muestra M1 compuesta por una matriz de SiO₂ implantada con iones de silicio a 5 MeV y de cobre a 1 MeV. Debido a que el poder de frenado de los iones cobre es mayor que el del silicio, se observa una mayor penetración de los iones de silicio en el dióxido de silicio. Para realizar el análisis RBS se utilizaron partículas α con una energía de 4 MeV

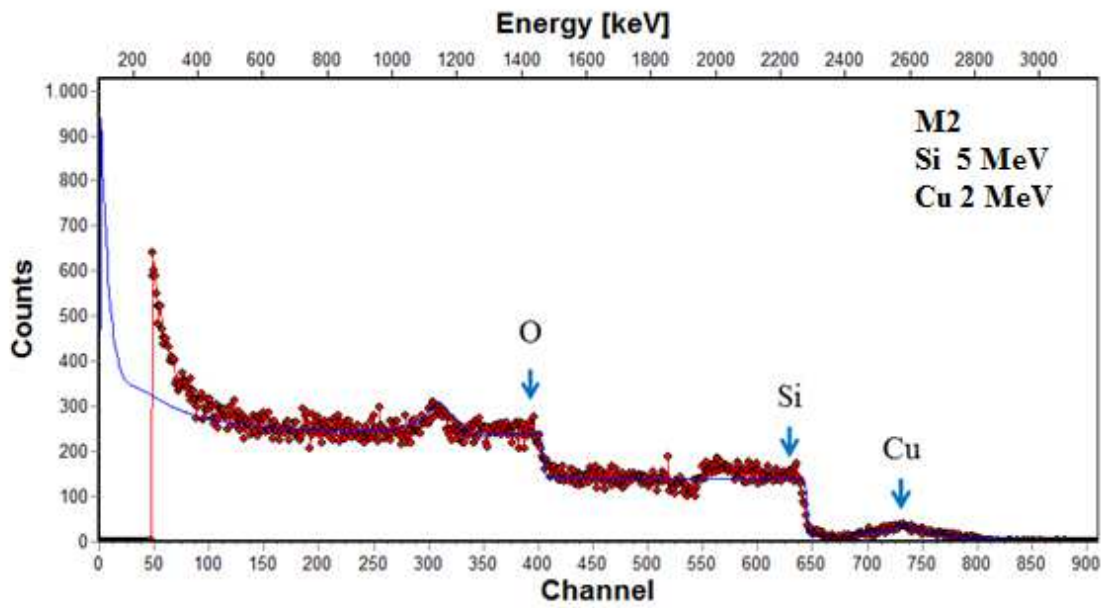
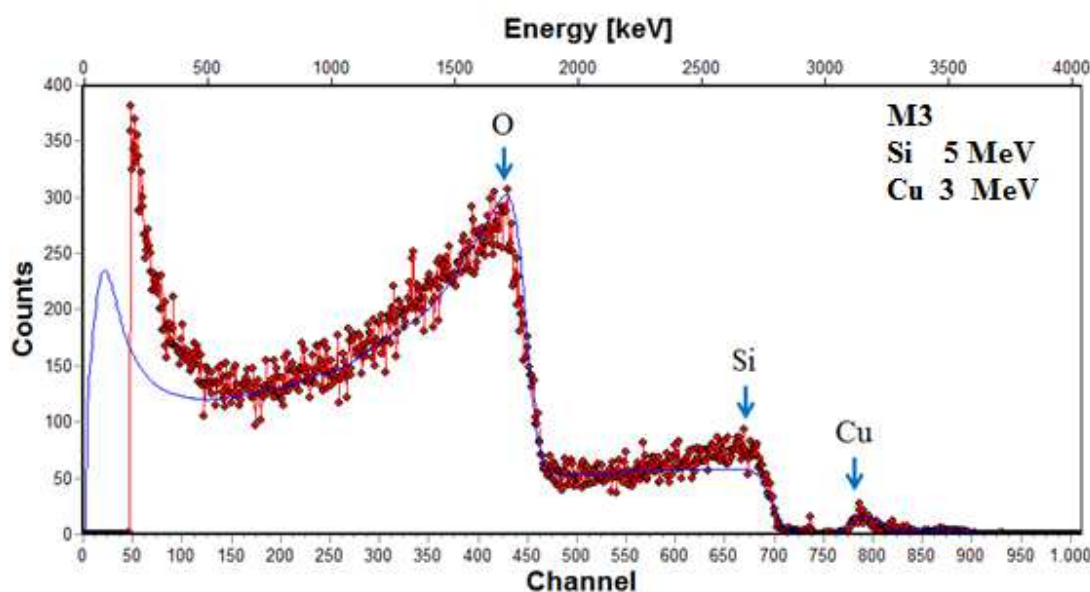


Figura 5.2 Espectro RBS de la muestra M2 implantada con iones de silicio y cobre. La energía de implantación de los iones de cobre y de silicio fue de 2 MeV y 5 MeV, respectivamente. Para obtener el espectro RBS se utilizaron partículas α con una energía de 4 MeV. En este espectro se observa que los iones de cobre se implantaron más cerca de los iones de silicio, pues su energía de implantación fue mayor que en el caso presentado en la Figura 5.1



|| Figura 5.3 Espectro RBS de la muestra M3 implantada con iones de silicio y cobre. La energía de implantación de los iones de cobre fue de 3 MeV. Para este caso fue necesario cambiar la energía de las partículas α a 5 MeV para poder observar el cobre en el sustrato dado que está implantado a un mayor profundidad.

Resulta oportuno aclarar que en los experimentos RBS, los elementos más ligeros aparecen posicionados más hacia la izquierda del espectro; es decir, a energías menores, tal como es el caso de las tres muestras en las cuales aparece primero el oxígeno, seguido del silicio y por último el cobre. Esto se debe a que cuando interactúan las partículas alfa con el material, pierden más energía al dispersarse por elementos con menor masa.

5.2 Distribución de las nanopartículas de cobre en la matriz de SiO₂ implantada con iones de silicio.

Con las simulaciones realizadas en el programa SIMRA se obtuvo la distribución y profundidad de los iones de Cu implantados en la matriz de SiO₂. Es de suma importancia conocer la distribución y profundidad de los iones para determinar la relación con respecto a la fotoluminiscencia.

El proceso realizado para obtener los datos que nos permiten determinar la distribución de iones se explica en el apéndice A.

De las gráficas RBS (Fig. 5.1, 5.2 y 5.3) se observa que conforme se aumenta la energía de implantación, también se incrementa la profundidad alcanzada de las nanopartículas de Cu en la muestras de SiO₂.

En la figura 5.4 se muestra el perfil de concentración de la muestra M1 para el caso del Cu. En ella se observa que la profundidad máxima de las nanopartículas de Cu alcanzada durante la implantación y después del tratamiento térmico es de aproximadamente 1.27 μm y el máximo de la concentración se encuentra en 0.66 μm .

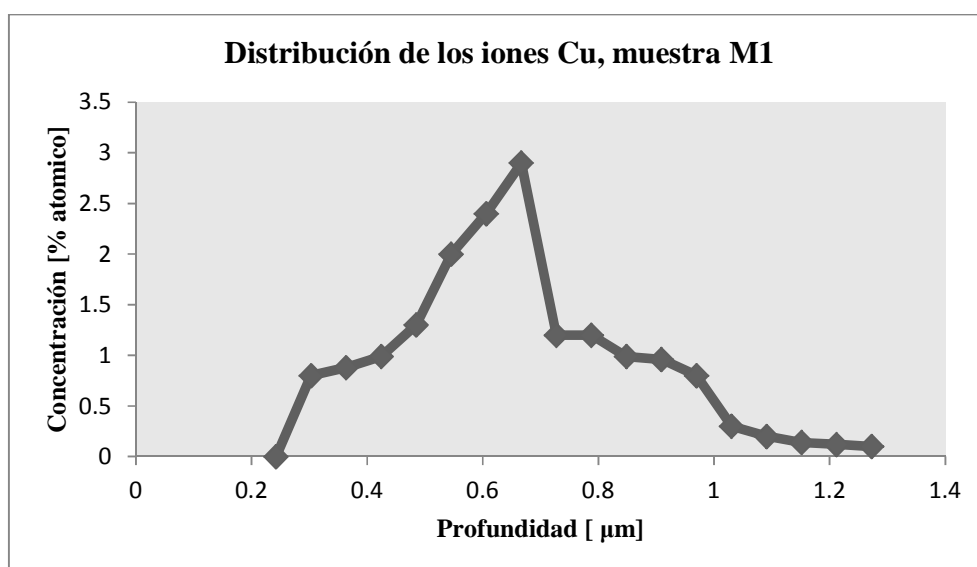


Figura 5.4 Perfil de concentración y profundidad de Cu, para la muestra implantada con una energía de 1MeV. La fluencia fue de $\phi = 6 \times 10^{16}$ [iones de cobre/ cm^2] y el ángulo de incidencia del haz fue de 0° .

La figura 5.5 muestra la distribución de los iones de Cu en la muestra M2. La profundidad máxima alcanzada por las nanopartículas de Cu es de 1.9 μm , mientras que el máximo de concentración se encuentra a 1.53 μm de profundidad.

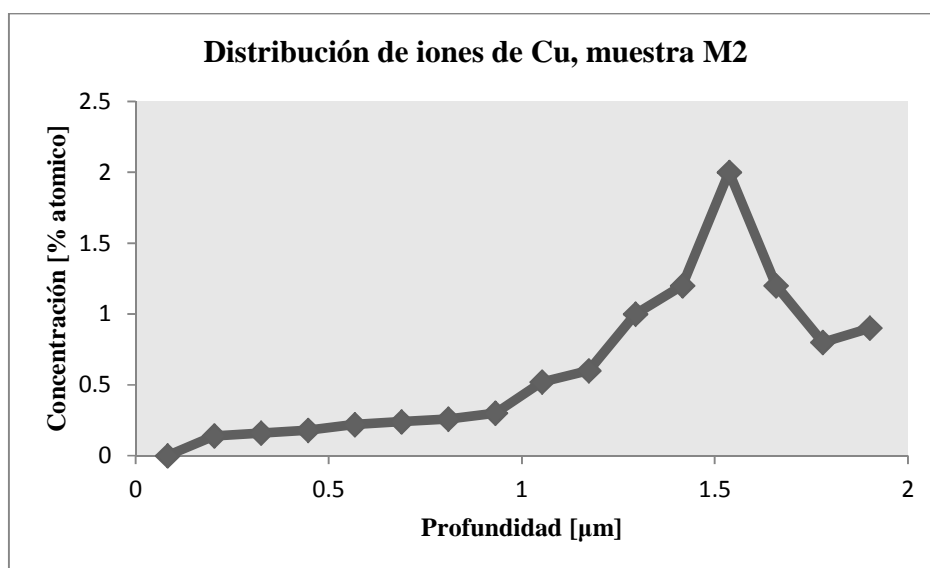


Figura 5.5 Perfil de concentración y profundidad de Cu, para la muestra implantada con una energía de 2 MeV. La fluencia fue de $\Phi = 6 \times 10^{16}$ [iones de cobre/ cm^2] y ángulo de incidencia del haz de 0°

La distribución de los iones de Cu implantados a 3 MeV (muestra M3) en el sustrato de SiO_2 se observa en la figura 5.6. La profundidad máxima de las nanopartículas de Cu en el sustrato es de 2.75 μm y el máximo de concentración se encuentra a 1.96 μm .

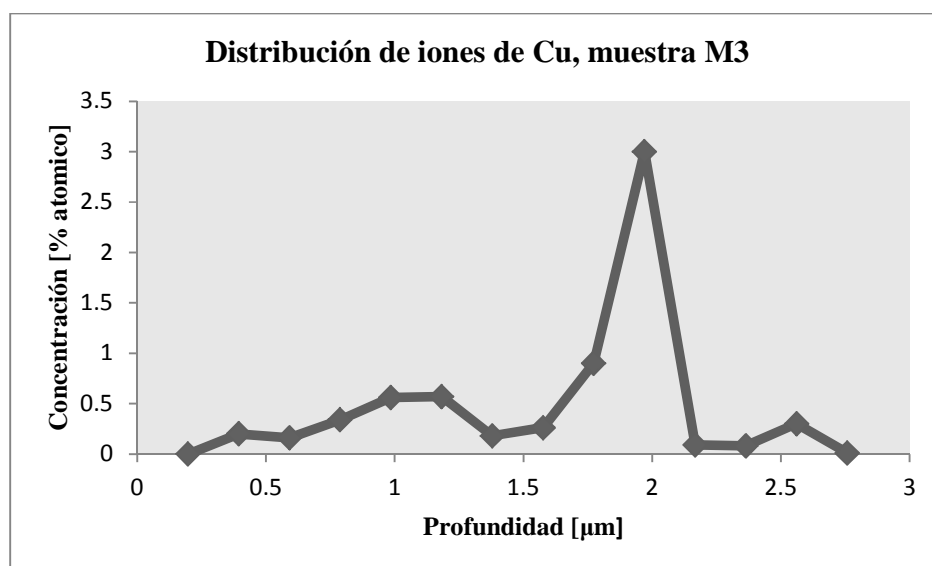


Figura 5.6 Perfil de concentración y profundidad del Cu para la muestra implantada con una energía de 3 MeV. La fluencia fue de $\Phi = 6 \times 10^{16}$ [iones de cobre/ cm^2] y ángulo de incidencia del haz fue de 0° .

5.3 Estudio de fotoluminiscencia (PL)

Las muestras que fueron sometidas a los experimentos de PL son las presentadas en la tabla 5.1. Para la muestra M1 se tomaron dos regiones, la primera (M1_R1) se tomó el centro y para M1_R2 un extremo de la muestra.

Tabla 5.1 Muestras sometidas a estudios de PL

Muestras	Energía de implantación	Impurezas implantadas
M1_R1	5 MeV	Si^{+2}
M1_R2	5 MeV	Si^{+2}
M2_R1	1 MeV	$Si^{+2} + Cu^{+2}$
M3_R1	2 MeV	$Si^{+2} + Cu^{+2}$
M4_R1	3 MeV	$Si^{+2} + Cu^{+2}$

A continuación en la figura 5.7 se muestra el espectro de emisión de las muestras M1_R1 (figura 5.7a) y M1_R2 (figura 5.7b). En la gráfica 5.7 (a) se observa que el máximo de intensidad de PL se encuentra en aproximadamente $\lambda = 415.606$ (nm) el cual corresponde de acuerdo al espectro visible al color violeta, también se ve un pico de menor intensidad en $\lambda = 691,544$ (nm) corresponde a color rojo.

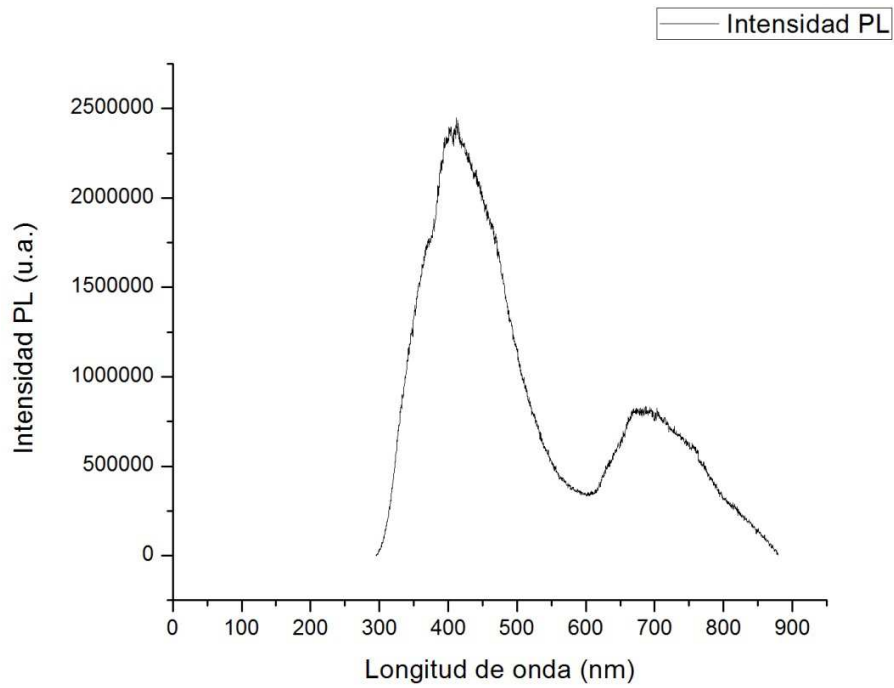


Figura 5.7 Espectro de PL (a) M1_R1

Para la figura 5.7 (b) la intensidad de PL disminuye sin embargo el máximo ocurre en aproximadamente la misma longitud de onda de la muestra M1_R1 siendo $\lambda = 412.337$ (nm); lo mismo sucede con el pico de menor intensidad $\lambda = 695.242$ (nm).

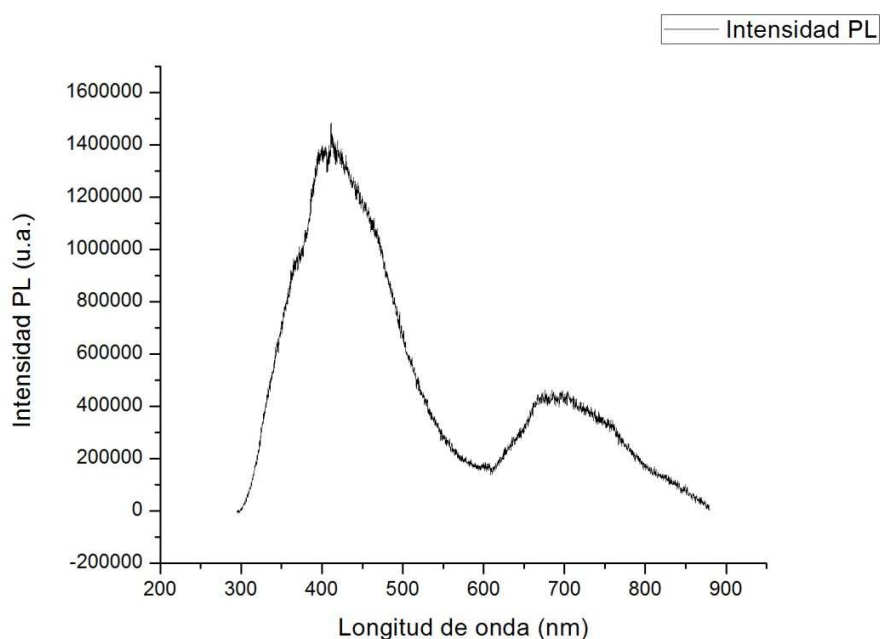


Figura 5.8 Espectro de PL (b) M1_R2

En la figura 5.8 (a) se observa el espectro original obtenido al realizar el experimento, en él se pueden ver los intervalos en los que la muestra emite dependiendo de cada región elegida.

En el espectro de PL de la muestra de SiO_2 implantada con iones de Cu (M2_R1) (figura 5.8 (b)) la intensidad es menor que en las muestras sólo implantadas con iones de silicio. El punto de mayor intensidad fotoluminiscente ocurre en la longitud de onda de $\lambda = 410.400 \text{ (nm)}$ y el pico de menor intensidad ocurre en $\lambda = 671.410 \text{ (nm)}$. Ambas longitudes de onda se encuentran en el mismo rango: violeta y rojo.

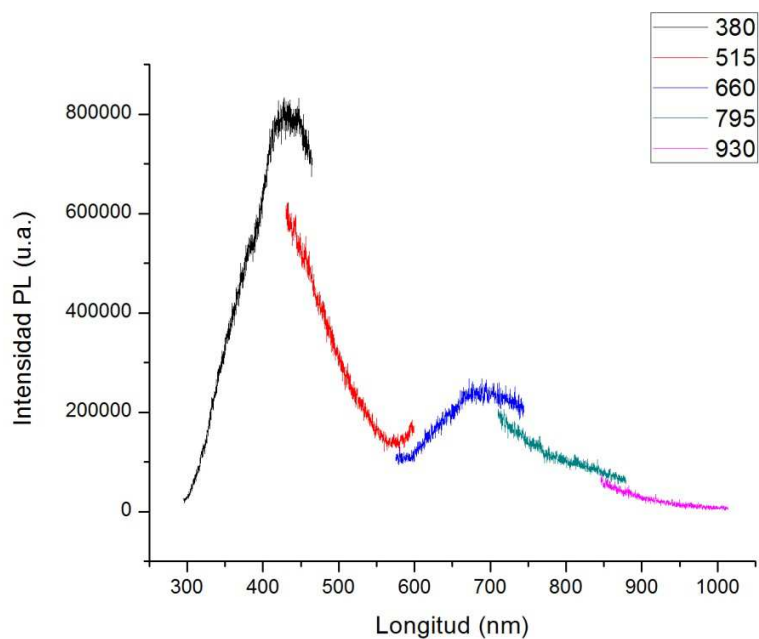


Figura 5.8 (a) Espectro PL M2_R1 original aun sin juntar todos los intervalos.

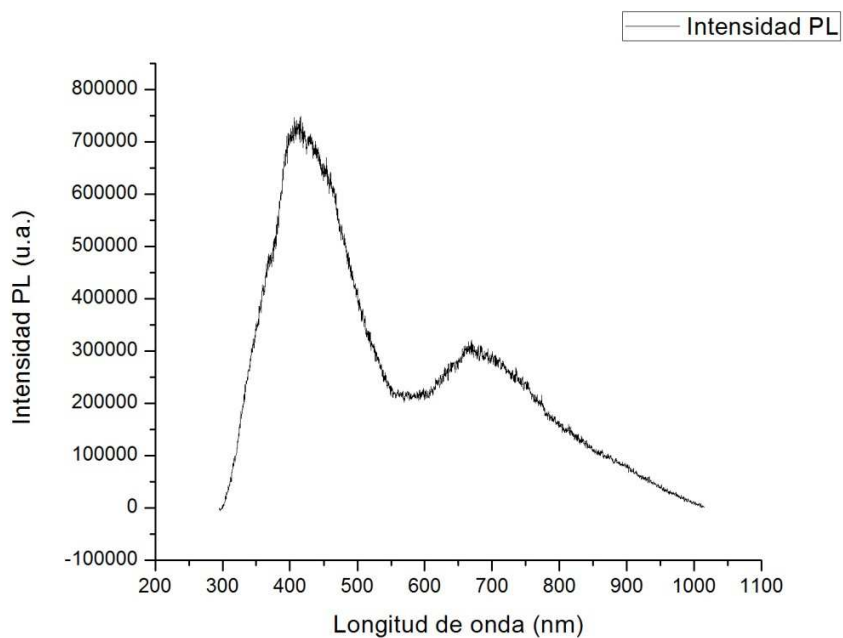


Figura 5.8 (b) Espectro PL de la muestra M2_R1

El espectro de emisión original obtenido para la muestra M3_R1 se presenta en la figura 5.9 (a).

Para la muestra M3_R1 (figura 5.9(a)) la intensidad de PL aumentó con respecto a la muestra M2_R1; sin embargo sigue siendo menor a la muestra M1_R1. El punto de mayor intensidad se localiza en $\lambda = 411.956$ (nm) y el segundo pico de menor intensidad en $\lambda = 685.229$ (nm).

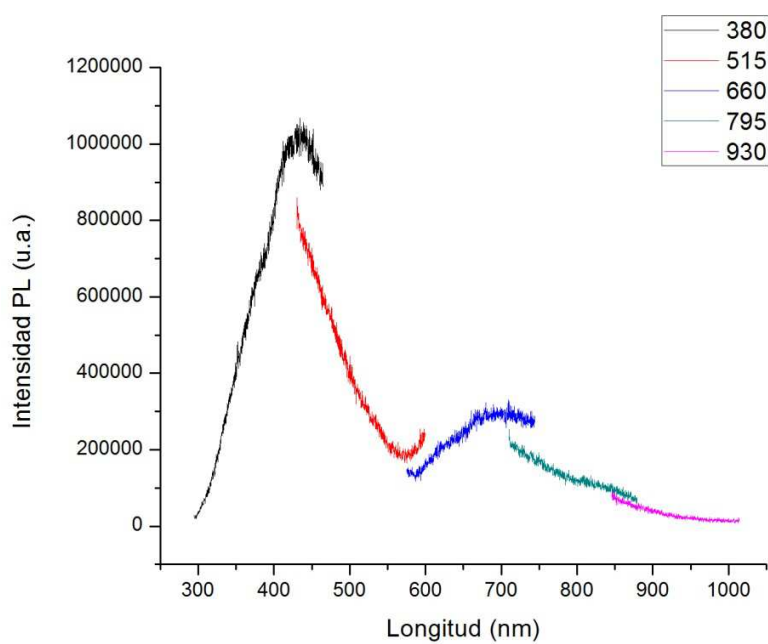


Figura 5.9 (a) Espectro de PL muestra M3_R1

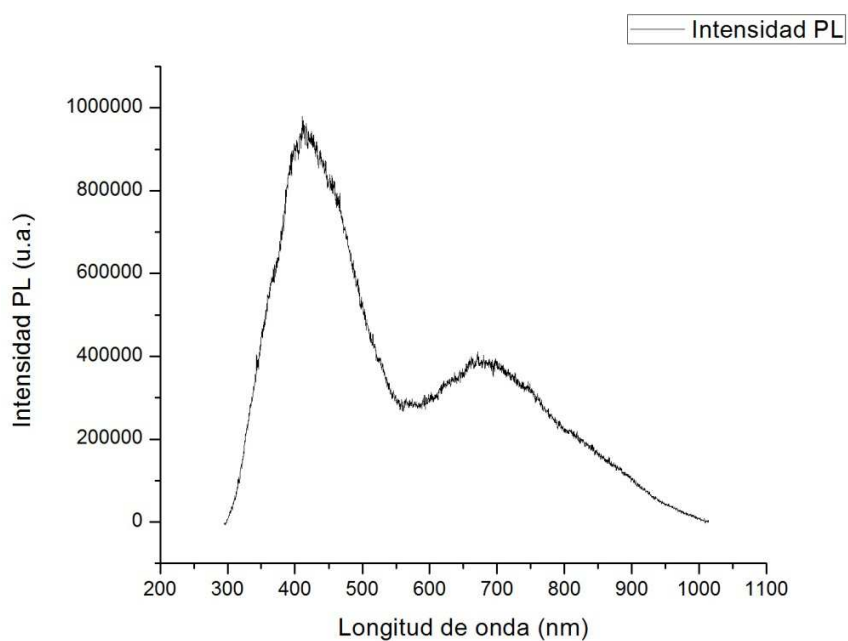


Figura 5.9 (b) Espectro de PL muestra M3_R1

En el espectro de PL de la muestra M4_R1 (figura 5.10) se observa una intensidad similar a M3_R1, en donde el pico de mayor intensidad se encuentra localizado en $\lambda = 410.402$ (nm), mientras que el pico de menor intensidad está en $\lambda = 671.410$ (nm).

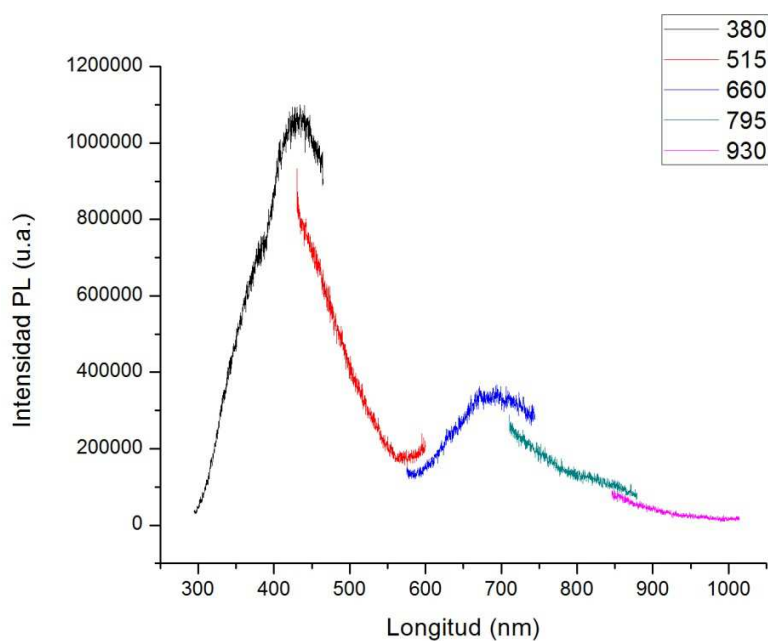


Figura 5.10 (a) Espectro de PL muestra M4_R1

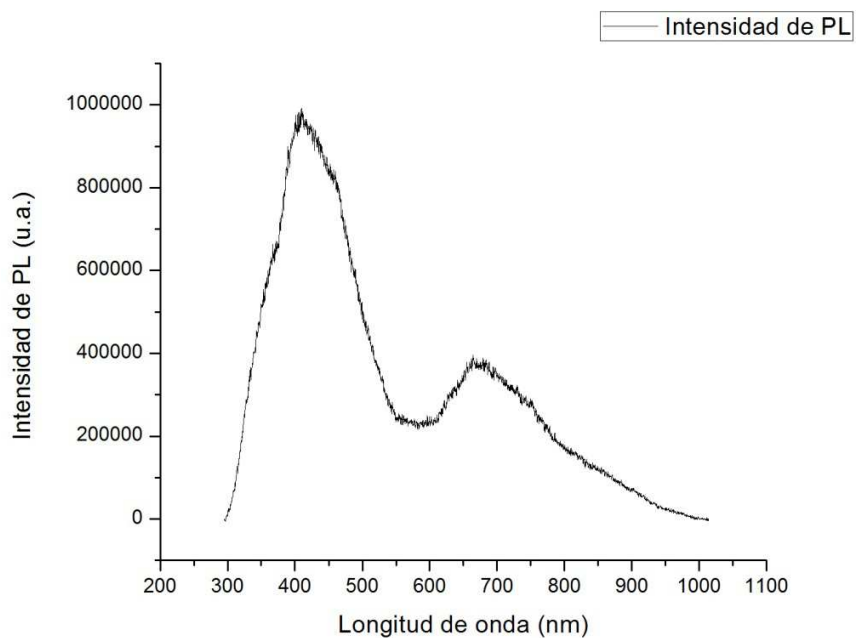


Figura 5.10 (b) Espectro de PL muestra M4_R1

En la gráfica 5.11 se presenta una comparación de los espectros de PL de todas las muestras experimentales, como ya se había mencionado la muestra que presenta mayor intensidad fotoluminiscente es la M1_R1.

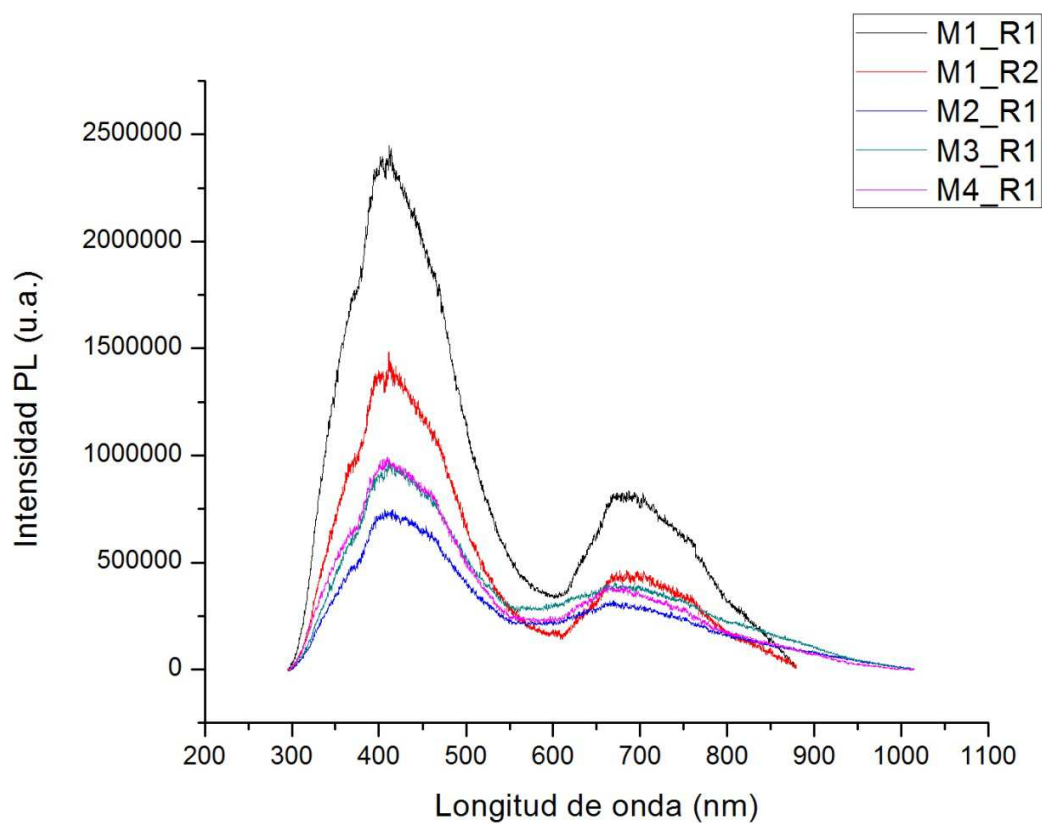


Figura 5.11 Comparación de espectros de PL

Todas las muestras caracterizadas presentan el pico de fotoluminiscencia aproximadamente en la misma longitud de onda no hubo corrimiento de la señal se mantuvo aun cuando solo se tenían solo nanocristales de silicio y sucedió lo mismo con los nanopartículas de cobre. La figura 5.12 muestra la comparación de todas las muestras analizadas.

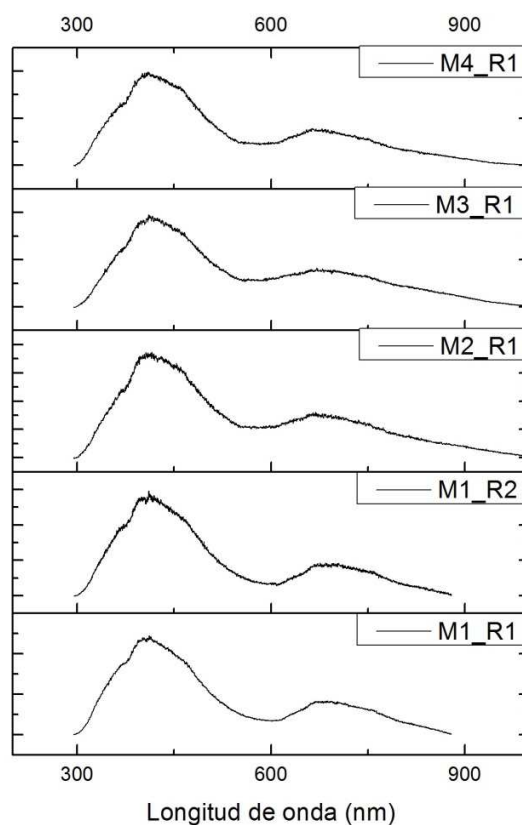


Figura 5.12 Comparación de espectros de PL, donde se muestra que no hay corrimiento en el pico de intensidad.

En el siguiente apartado se presentan las gráficas de comparación de la distribución de los iones de cobre en cada una de las muestras y la señal fotoluminiscente producida.

Las figuras 5.13, 5.14 y 5.15 presenta los resultados de la caracterización de la muestras M2_R1, M3_R1 y M4_R1 implantada con una energía de 1 MeV, 2 MeV y 3 MeV respectivamente.

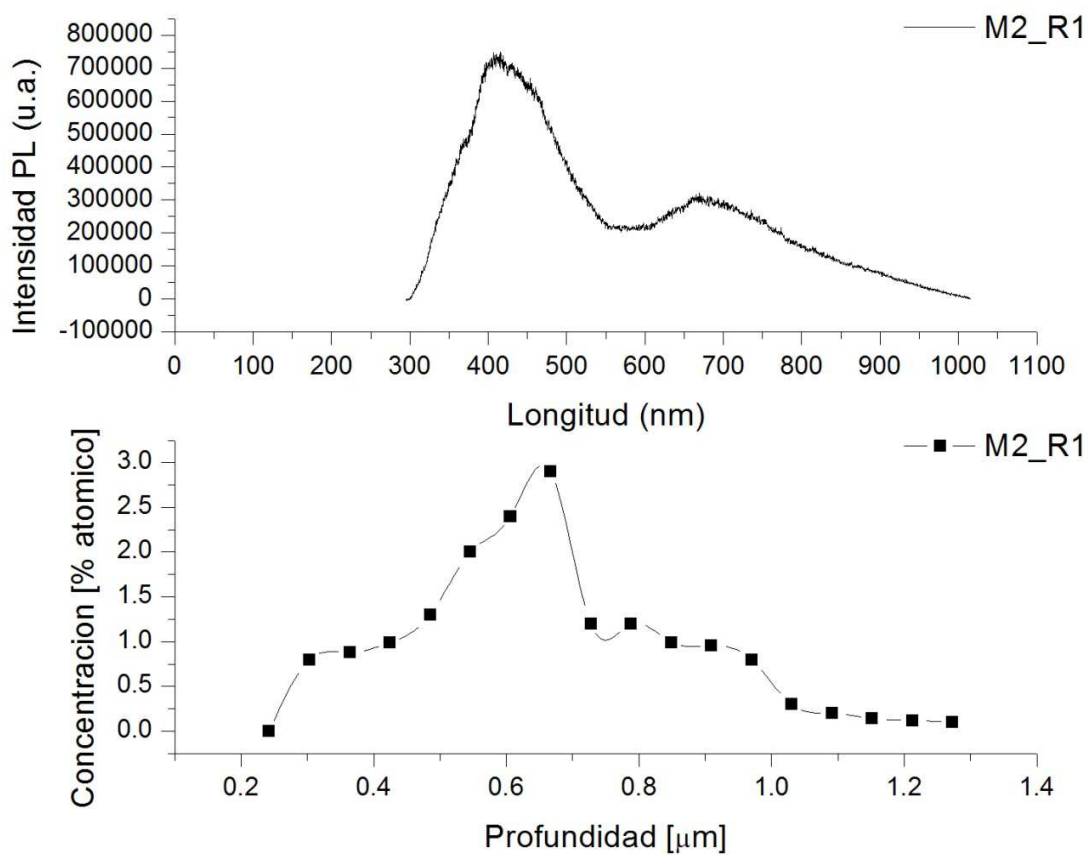


Figura 5.13 Comparación de las gráficas de la señal fotoluminiscente y concentración de las nanopartículas de cobre.
 Muestra M2_R1 implantada con iones de cobre a una energía de 1 MeV
 $Si^{+2} + Cu^{+2}$

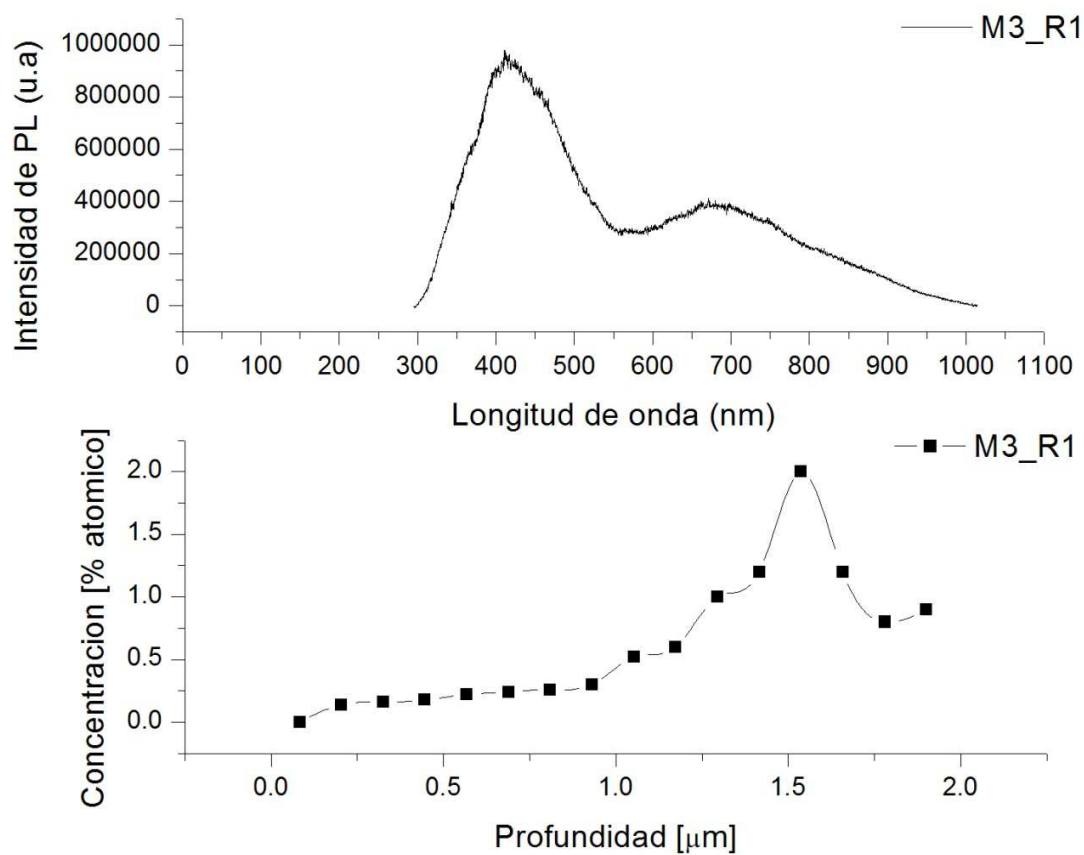


Figura 5.14 Comparación de las gráficas de la señal fotoluminiscente y concentración de las nanopartículas de cobre.
 Muestra M3_R1 implantada con iones de cobre a una energía de 2 MeV
 $Si^{+2} + Cu^{+2}$

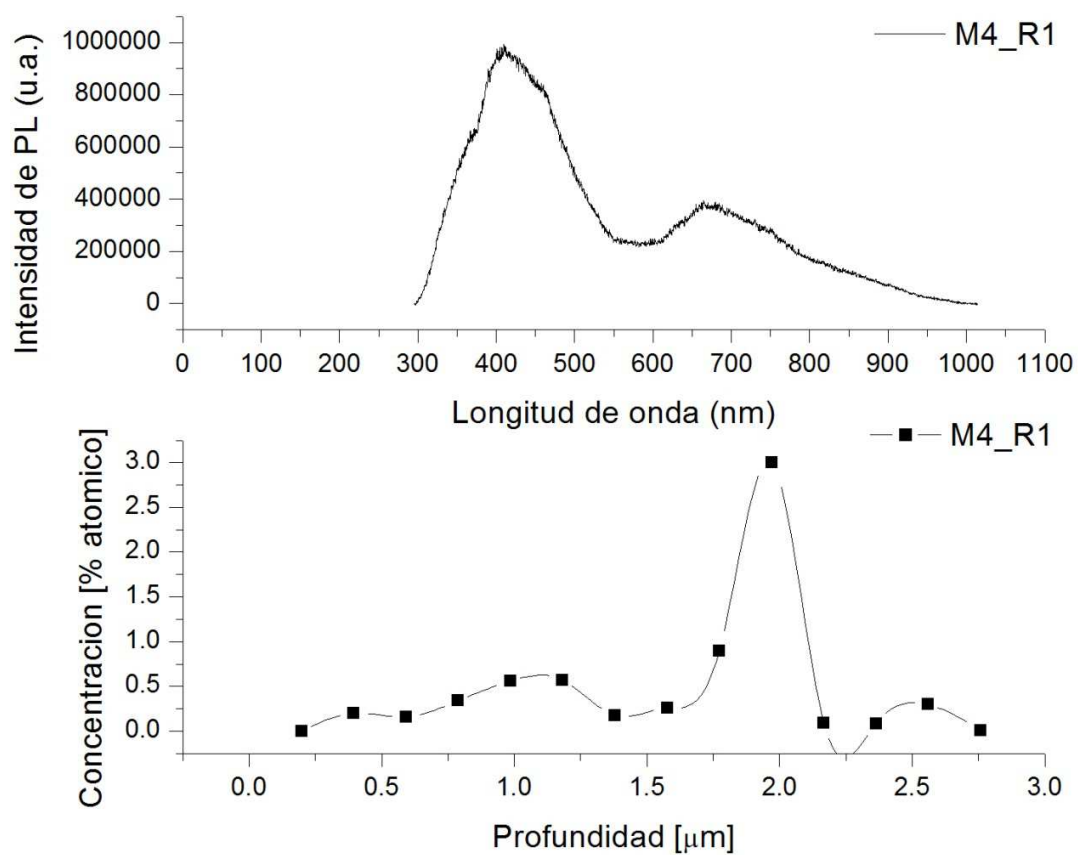


Figura 5.15 Comparación de las gráficas de la señal fotoluminiscente y concentración de las nanopartículas de cobre.
 Muestra M4_R1 implantada con iones de cobre a una energía de 3 MeV
 $Si^{+2} + Cu^{+2}$

CAPÍTULO 6

6.1 Conclusiones

En este trabajo de tesis se presentó la construcción y diseño de un dispositivo nanoestructurado el cual consta de un matriz de dióxido de silicio que en su interior contiene nanopartículas de Cu y Si. Cabe mencionar que ya se han construido dispositivos similares con metales como la plata y el oro; sin embargo esta es la primera vez que se estudian y caracterizan muestras de Cu + Si. Las conclusiones obtenidas son:

Todas las muestras emiten una señal fotoluminiscente. Las muestras M1_R1 y M1_R2 presentaron las señales más intensas de PL, siendo la primera de mayor intensidad que la segunda. Esto se atribuye a que en el centro de la muestra se presenta la mayor concentración de nanocristales de silicio.

Las muestras formadas de nanopartículas de Cu y Si; dentro de un matriz de dióxido de silicio presentaron una señal fotoluminiscente la cual, como se esperaba, varió de acuerdo a la distancia en que se encontraban implantados los iones de silicio y cobre. De esta manera se obtuvieron tres sistemas a estudiar:

- a) Las distribuciones de los iones de silicio y cobre están totalmente separados.
- b) Las colas de las distribuciones de los iones de silicio y cobre están ligeramente juntas.
- c) Las distribuciones de silicio y cobre se traslapan.

Para el sistema del inciso a) los iones de cobre se implantaron a una energía menor (1 MeV), alcanzaron una profundidad máxima de 1.27 μm y mientras que los iones de silicio implantados a 5 MeV están presentes en la matriz de SiO_2 desde 2 μm hasta 3.6 μm ; entonces hay una separación significativa entre ambos elementos. Este sistema fue el que presentó la menor intensidad de PL, de todas las muestras debido a la poca interacción entre las nanopartículas metálicas y los nanocristales de silicio por la distancia que existe entre ambos.

En el caso del sistema b) la energía de implantación de los iones de cobre se realizó a una energía mayor y la profundidad máxima alcanzada fue de $\approx 1.9 \mu\text{m}$ dando como resultado que el espectro de PL aumentara.

En el sistema c) se presentó la señal más intensa de PL comparado con los dos sistemas anteriores; lo que hace suponer que al acoplarse las nanopartículas de cobre con las de silicio, se incrementa la señal PL.

Todos los sistemas descritos anteriormente presentaron el pico de mayor intensidad en una longitud de onda promedio de $\lambda_{prom} = 412.140 \text{ [nm]}$, el cual corresponde al color violeta en el espectro visible. Lo anterior implica que la longitud de emisión no se modificó en ningún sistema se mantuvo en todas las muestras aún en las que solamente se implantaron con silicio. La presencia de nanopartículas de cobre no produjo ningún corrimiento con respecto a la longitud de onda de emisión.

Todas las muestras presentaron un pico de menor intensidad en $\lambda_{prom} = 683.167 \text{ [nm]}$ esta longitud pertenece al color rojo.

Es importante mencionar que solo se realizaron cuatro muestras debido al tiempo que toma construir el material nanoestructurado, las sesiones en el Pelletron para implantar los iones de silicio y cobre fueron de 12 horas por día, en total fueron 10 sesiones lo cual implica 120 horas sin contar el proceso térmico y la caracterización (fotoluminiscencia y RBS).

Respecto al objetivo planteado se logró plenamente y con logros adicionales ya que se caracterizó satisfactoriamente al material nanoestructurado y como ya se había mencionado anteriormente estas son los primeros estudios de caracterización de silicio implantada con iones de cobre, por lo tanto los resultados obtenidos ayudaran a futuros estudios de este mismo material sobre la variación de los parámetros tomados en cuenta como: la fluencia la energía utilizada o el sustrato mismo.

Se esperaba que la presencia de nanopartículas de cobre en la matriz de dióxido de silicio aumentara la intensidad de la señal fotoluminiscente con respecto al sistema formado por sólo nanopartículas de silicio; sin embargo no fue así.

Lo anterior podría ser debido a que la interacción química del cobre con los elementos de la matriz de sílice es fuerte lo que ayudaría la posibilidad de que se formen óxidos. Los óxidos de cobre son: óxido cuproso (Cu_2O) y cúprico (CuO) por lo tanto es de esperar que su presencia afecte las propiedades ópticas [1].

Para obtener un resultado concluyente y que sea de utilidad para construir dispositivos nanoestructurados capaces de modificar la señal fotoluminiscente, es necesario realizar más experimentos y dispositivos con diferentes características.

Se pretende continuar con los experimentos de estos sistemas, variando algunos otros parámetros, tales como la afluencia de los iones de cobre y el número de tratamientos térmicos.

Referencias

- [1] Tesis de doctorado Ovidio Yordanis Peña Rodríguez (2007) “*Estudio de las propiedades ópticas de la sílica de alta pureza implantada con iones de cobre*” Universidad Nacional Autónoma de México. Instituto de Investigación en Materiales.

APÉNDICE A.

Programa de simulación SIMNRA

En este apartado se explica con más precisión la realización de las simulaciones hechas con el programa SIMNRA para obtener la concentración de Cu en las muestras de SiO₂, implantadas también con iones de silicio. Como ya se había mencionado, el programa SIMNRA calcula y simula espectros RBS usando como base una propuesta elemental del material, la calibración y los parámetros experimentales proporcionados.

El primer paso fue convertir los datos provenientes del multicanal a un formato txt. Para calibrar el sistema se utiliza una muestra testigo, que en este caso fue SiO₂ puro, a la cual se le realiza un análisis RBS y este es el archivo que se analiza primero. Se introducen los datos experimentales, tales como: iones incidentes (⁴He), energía de los iones incidentes (4 y 5 MeV) y ángulo de dispersión utilizado (167°).

El sistema de obtención de datos del acelerador Pelletron proporciona los valores de los iones retrodispersados en una gráfica de Número de cuentas contra Número de canal; sin embargo, para realizar las simulaciones con el programa SIMNRA, es necesario que el Número de canal sea transformado a Energía, lo cual se conoce como calibración del sistema de detección. Para realizar esta calibración se necesita calcular la energía por canal de cada uno de los elementos presentes en la muestra; oxígeno y silicio. Para hacerlo se toma el número de canal de cada elemento en su superficie; es decir, en la sección donde presenta la mayor energía. Este punto se toma a la mitad de la altura del escalón que forma cada elemento. Después se calcula directamente del programa la energía de retrodispersión de los dos elementos. De esta manera se tendrán 4 datos: un número de canal y una energía de retrodispersión tanto para el O como el Si.

Posteriormente se grafica la energía contra el canal de cada elemento para obtener la pendiente y la ordenada al origen. Estos datos son ingresados al programa SIMNRA: la ordenada representa el Offset de Calibración y la pendiente la energía por canal.

Una vez completado lo anterior se prosigue a ingresar la composición teórica de la muestra, el número de elementos que la componen y la concentración de cada elemento. La suma total de esta concentración debe de dar como resultado 1 (ó 100%); en nuestro caso la composición para la muestra testigo de SiO₂ es silicio= 0.32 y oxígeno= 0.68. Otro valor importante durante la simulación es el espesor de la muestra o de la película que se esté analizando; éste está dado en múltiplos de unidades de 1×10^{15} at/cm², que equivale a una capa atómica.

Con todos los datos ingresados ahora se calcula el espectro y se eligen las reacciones nucleares que se producen durante la interacción entre el proyectil y cada uno de los elementos de la muestra.

Cuando el espectro teórico coincide con el espectro experimental, la calibración ha finalizado; de lo contrario se tienen que modificar los datos hasta que los dos espectros coincidan.

Una vez calibrada la muestra testigo, este archivo se usa como base para analizar las demás muestras implantadas que contienen al SiO₂ como sustrato. Las muestras implantadas contienen cobre, por lo que se simula el pico de este metal colocando diversas capas del elemento y variando la concentración de cada capa hasta hacer coincidir el espectro experimental con el teórico. El procedimiento explicado anteriormente se realizó para cada una de las tres muestras analizadas.

El procesamiento de los datos se realizó utilizando el programa Excel. Los datos se presentan en las tablas A1.1, A1.2 y A1.3, que corresponden a las muestras M1, M2 y M3, respectivamente. La primera columna de cada tabla representa el número de capas en que se dividió la muestra, la segunda columna corresponde al espesor de la capa (o capas atómicas) multiplicado por un factor de 1×10^{15} at/cm²; mientras que la tercera columna es la profundidad, y se compone de la suma sucesiva del espesor de cada capa. La cuarta, quinta y sexta columna representan la concentración de oxígeno, silicio y cobre para cada capa; de tal manera que la capa 1 tiene un espesor de 3200×10^{15} at/cm² y está compuesta de oxígeno y silicio únicamente.

Apéndice A

Tabla A1.1 Perfil de Concentración MI

Número de capa	Espesor 10 ¹⁵ at/cm ²	Profundidad 10 ¹⁵ at/cm ²	Normalizada			% atómico	Profundidad micrómetros
			O	Si	Cu		
1	3200	3200	0,68	0,32	0	0	0,24242424
2	400	3600	0,669	0,323	0,008	0,8	0,3030303
3	400	4000	0,6682	0,323	0,0088	0,88	0,36363636
4	400	4400	0,6671	0,323	0,0099	0,99	0,42424242
5	400	4800	0,664	0,323	0,013	1,3	0,48484849
6	400	5200	0,657	0,323	0,02	2	0,54545455
7	400	5600	0,653	0,323	0,024	2,4	0,60606061
8	400	6000	0,648	0,323	0,029	2,9	0,66666667
9	400	6400	0,665	0,323	0,012	1,2	0,72727273
10	400	6800	0,665	0,323	0,012	1,2	0,78787879
11	400	7200	0,6671	0,323	0,0099	0,99	0,84848485
12	400	7600	0,6674	0,323	0,0096	0,96	0,90909091
13	400	8000	0,669	0,323	0,008	0,8	0,96969697
14	400	8400	0,674	0,323	0,003	0,3	1,03030303
15	400	8800	0,675	0,323	0,002	0,2	1,09090909
16	400	9200	0,6756	0,323	0,0014	0,14	1,15151515
17	400	9600	0,6758	0,323	0,0012	0,12	1,21212121
18	400	10000	0,676	0,323	0,001	0,1	1,27272727

La séptima columna representa el porcentaje atómico de cobre en la muestra y se obtiene multiplicando la sexta columna por 100.

Para calcular la profundidad en unidades de longitud se utilizó la siguiente ecuación:

$$\frac{\text{Espesor de la monocapa} \cdot 10^{15} \left[\frac{\text{at}}{\text{cm}^2} \right] \cdot 10^4 [\mu\text{m}]}{\rho [\text{atom}/\text{cm}^3]} \quad (1)$$

De la ecuación (1): $\rho = 6.6 \times 10^{22}$ es la densidad atómica del dióxido de silicio utilizado. Con esta ecuación se calcularon las profundidades en $[\mu\text{m}]$ de las nanopartículas de cobre.

Apéndice A

Tabla A1.2 Perfil de Concentración M2

Número de capa	Espesor 10 ¹⁵ at/cm ²	Profundidad 10 ¹⁵ at/cm ²	Normalizada				Profundidad micrómetros
			O	Si	Cu	% atómico	
1	1090	1090	0,68	0,32	0	0	0,08257576
2	800	1890	0,6786	0,32	0,0014	0,14	0,20378788
3	800	2690	0,6784	0,32	0,0016	0,16	0,325
4	800	3490	0,6782	0,32	0,0018	0,18	0,44621212
5	800	4290	0,6778	0,32	0,0022	0,22	0,56742424
6	800	5090	0,6776	0,32	0,0024	0,24	0,68863636
7	800	5890	0,6774	0,32	0,0026	0,26	0,80984849
8	800	6690	0,677	0,32	0,003	0,3	0,93106061
9	800	7490	0,6748	0,32	0,0052	0,52	1,05227273
10	800	8290	0,674	0,32	0,006	0,6	1,17348485
11	800	9090	0,67	0,32	0,01	1	1,29469697
12	800	9890	0,668	0,32	0,012	1,2	1,41590909
13	800	10690	0,66	0,32	0,02	2	1,53712121
14	800	11490	0,668	0,32	0,012	1,2	1,65833333
15	800	12290	0,672	0,32	0,008	0,8	1,77954546
16	800	13090	0,671	0,32	0,009	0,9	1,90075758

Tabla A1.3 Perfil de Concentración M3

Número de capa	Espesor 10 ¹⁵ at/cm ²	Profundidad 10 ¹⁵ at/cm ²	Normalizada				Profundidad micrómetros
			O	Si	Cu	% atómico	
1	2600	2600	0,68	0,32	0	0	0,1969697
2	1300	3900	0,675	0,323	0,002	0,2	0,39393939
3	1300	5200	0,6754	0,323	0,0016	0,16	0,59090909
4	1300	6500	0,6736	0,323	0,0034	0,34	0,78787879
5	1300	7800	0,6714	0,323	0,0056	0,56	0,98484849
6	1300	9100	0,6713	0,323	0,0057	0,57	1,18181818
7	1300	10400	0,6752	0,323	0,0018	0,18	1,37878788
8	1300	11700	0,6744	0,323	0,0026	0,26	1,57575758
9	1300	13000	0,691	0,3	0,009	0,9	1,77272727
10	1300	14300	0,67	0,3	0,03	3	1,96969697
11	1300	15600	0,6991	0,3	0,0009	0,09	2,16666667
12	1300	16900	0,69918	0,3	0,00082	0,082	2,36363636
13	1300	18200	0,697	0,3	0,003	0,3	2,56060606
14	1300	19500	0,6999	0,3	0,0001	0,01	2,75757576