



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

Caracterización del daño producido por protones de alta energía en silicio

Autor:

D. Pablo Armenteros Cosme

Tutores:

D. Pedro López Martín

D. Iván Santos Tejido

Año 2022

Índice

1. Introducción	1
2. Mecanismos físicos de generación de daño por irradiación	4
2.1. Introducción	4
2.2. Cascadas de irradiación	5
2.3. Irradiación con partículas energéticas ligeras	6
2.4. Defectos generados en los procesos de cascada	7
3. Técnicas de simulación	9
3.1. Spectra-PKA	10
3.2. Aproximación de colisiones binarias	11
3.3. Dinámica molecular clásica	12
3.4. Recursos computacionales	14
4. Irradiación con protones en silicio	15
5. Simulación de cascadas de baja energía con técnicas BCA	19
6. Caracterización del daño producido en colisiones de baja energía con técnicas MD	25
6.1. Condiciones de las simulaciones	25
6.2. Características del daño producido	29
6.2.1. Átomos desplazados (<i>ADs</i>) y retículos vacíos (<i>RVs</i>)	29
6.2.2. Agrupación de defectos	30
6.2.3. Clasificación de los grupos según su neto	32
6.2.4. Conclusiones	33
6.3. Análisis de las transferencias de energía y del tipo de colisiones	34
7. Conclusiones y líneas futuras	38
7.1. Líneas futuras	39
Anexo	41
Bibliografía	44

Índice de figuras

1.	Distribución de energía de los PKAs generados por segundo y unidad de volumen en una irradiación de protones con 70 MeV sobre un sustrato de Si formado por los 3 isótopos fundamentales.	16
2.	Distribución de energía de los PKAs generados por segundo y unidad de volumen al irradiar un sustrato de ^{28}Si con neutrones de 1 MeV , y protones y partículas alfa de 70 y 199 MeV	17
3.	Porcentaje acumulado de PKAs generados al irradiar un sustrato de ^{28}Si con neutrones de 1 MeV , y protones y partículas alfa de 70 y 199 MeV	17
4.	Fracción de la energía destinada a <i>binding</i> , <i>subthreshold</i> y <i>remaining</i> en función de la energía del PKA en simulaciones con Marlowe.	21
5.	Número promedio de defectos por PKA o recoil en función de la energía inicial. Los resultados corresponden a simulaciones con Marlowe, simulaciones de MD con los potenciales de Tersoff y Stillinger-Weber y cálculos con los modelos de Kinchin-Pease y NRT.	21
6.	Número promedio de defectos generado por recoil en función de la energía del recoil para simulaciones con Marlowe, simulaciones de MD con los potenciales de Tersoff y Stillinger-Weber y cálculos con los modelos de Kinchin-Pease y NRT. Los valores de MD corresponden a los netos de los grupos de defectos formados.	22
7.	Coste energético en producir un defecto para simulaciones con Marlowe, simulaciones de MD con los potenciales de Tersoff y Stillinger-Weber y cálculos con los modelos de Kinchin-Pease y NRT. Los valores de MD corresponden a los netos de los grupos de defectos formados.	23
8.	Simulación de 10.000 cascadas con una energía de 100 eV en una celda de 150Å de lado con el código SRIM.	26
9.	Número de átomos desplazados (<i>ADs</i>) para cada energía y potencial.	30
10.	Número y tamaño promedio de grupos por recoil, para cada energía y potencial.	31
11.	Número promedio de grupos con tamaños unidad, pequeños y grandes por recoil para cada energía y potencial.	32
12.	Número promedio de grupos según neto, para cada energía y potencial.	32
13.	Tamaño promedio de grupos según neto, para cada energía y potencial.	33
14.	Número de HPs promedio según el criterio de energía cinética para cada potencial.	35
15.	Número promedio de <i>HPs</i> según los criterios de energía cinética y energía potencial para el potencial de Tersoff.	35
16.	Histograma de la energía cinética máxima de los ADs para cada potencial, empleando un rango de energías de 10 eV	36
17.	Histograma de la energía cinética máxima de los ADs para recoils de 50 , 100 y 200 eV y para cada potencial, empleando un rango de energías de 1 eV	37

Índice de tablas

1.	Dimensiones de la celda, número de átomos y temperatura final en función de la energía inicial del recoil, para las simulaciones de MD.	26
----	---	----

Lista de acrónimos

AD:	Átomo Desplazado
BCA:	Binary Collision Approximation
CERN:	Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire
DADOS:	Diffusion of Atomistic Defects Object-oriented Simulator
DPA:	Displacements Per Atom
E_d:	Displacement Energy threshold (for damage generation)
ENDF:	Evaluated Nuclear Data File
FCC:	Face-Centered Cubic
HP:	Hot Particle
I:	Interstitial
kMC:	Kinetic Monte Carlo
LAMMPS:	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
LHC:	Large Hadron Collider
MD:	Molecular Dynamics
NIEL:	Non-Ionizing Energy Loss
NRT:	Norgett-Robinson-Torrens
PKA:	Primary Knock-on Atom
RV:	Retículo Vacío
SRIM:	Stopping and Range of Ions in Matter
SW:	Stillinger-Weber (empirical potential)
TRIM:	Transport of Ions in Matter
V:	Vacante
ZBL:	Ziegler-Biersack-Littmark (empirical potential)

1. Introducción

Los dispositivos electrónicos se ven expuestos a radiación de alta energía durante los procesos tecnológicos de fabricación (implantación iónica de dopantes) o bien al trabajar en entornos con radiación en el ambiente. Existen múltiples aplicaciones en las que los dispositivos deben soportar radiación de partículas energéticas ligeras. La electrónica embebida en aplicaciones aeroespaciales se ve sometida a la radiación cósmica, tanto galáctica (procedente de los restos de supernovas lejanas) como solar [1]. El campo magnético de la Tierra nos protege en gran parte de estos rayos cósmicos, pero la tecnología presente en el espacio exterior carece de esta protección, viéndose mucho más expuesta a radiaciones muy energéticas.

El uso civil de la energía nuclear en instalaciones industriales de producción de energía eléctrica es también una fuente de generación de radiación altamente energética que puede afectar a la electrónica de control que integra. En la medicina nuclear se emplea la emisión de partículas de alta energía (partículas alfa, beta, protones, ...) por parte de una sustancia radiactiva para atacar las células tumorales y tratar distintos tipos de enfermedades, como el cáncer o el hipertiroidismo [2]. Otro claro ejemplo son los detectores de radiación y toda la electrónica de apoyo presente en los aceleradores de partículas, tales como el *Gran Colisionador de Hadrones* (también conocido como *LHC*, por sus siglas en inglés) del *CERN*. Uno de los desafíos operacionales más importantes de las nuevas actualizaciones del LHC (*High Luminosity-LHC*) es la utilización de altas dosis de radiación, compuesta principalmente por neutrones y protones. Estas dosis elevadas pueden degradar las prestaciones de los dispositivos electrónicos y reducir su vida útil [3].

Los protones son una de las partículas energéticas más relevantes en las aplicaciones mencionadas anteriormente. Los protones son un componente importante de la radiación cósmica y constituyen una fracción significativa de la dosis total de radiación a la que se ven sometidos los detectores de partículas del CERN. Por otro lado, la irradiación de protones puede tener también un uso medicinal. Con la ayuda de ciclotrones y sincrotrones, los protones pueden ser acelerados hasta una energía concreta, con la que se obtiene la penetración en el tejido deseada. Este tipo de radioterapia localiza mucho más el efecto de la radiación que la terapia de rayos *X*, que afecta no solo al tejido tumoral, sino también a tejidos sanos cercanos, produciendo efectos secundarios no deseados [4]. Además los protones son partículas elementales con carga, y el estudio de la irradiación con protones puede servir como punto de partida para el análisis de los efectos producidos por otras partículas cargadas.

La irradiación en general tiene un efecto negativo en las prestaciones, rendimiento y vida útil de los dispositivos electrónicos. La interacción de las partículas energéticas con el sustrato de silicio (elemento base en la tecnología electrónica actual) genera defectos en la red. Estos defectos son causantes de múltiples efectos adversos, como la difusión y desactivación de los dopantes [5], el aumento de las corrientes de fuga [6] o el fenómeno de la inversión de tipo en detectores de radiación [7]. Existe por tanto un gran interés en diseñar dispositivos resistentes a la radiación, que puedan presentar unas buenas prestaciones incluso tras recibir altas dosis de radiación. Para ello es necesario poseer un conocimiento profundo de los efectos de la radiación en los dispositivos semiconductores, para poder entonces diseñar estrategias de fabricación de dispositivos que minimicen sus efectos nocivos.

El estudio experimental de los efectos de la radiación en los dispositivos es costoso. Implica entre otras cosas la utilización de fuentes de radiación (reactores o aceleradores de partículas) y de diferentes métodos para caracterizar eléctricamente los dispositivos irradiados. En este sentido, el uso

de técnicas de simulación permite analizar los mecanismos físicos responsables de la degradación de los dispositivos y poder predecir el comportamiento de los dispositivos irradiados. Gracias al rápido desarrollo de la tecnología, los ordenadores son cada vez computacionalmente más potentes, lo que permite simular dimensiones y tiempos macroscópicos con un coste mucho menor que el estudio experimental.

Las técnicas de simulación atomísticas que utilizan un esquema multi-escala permiten describir a nivel microscópico los efectos de la radiación en dispositivos semiconductores y predecir su comportamiento en escalas macroscópicas. Esto se consigue combinando varias técnicas de simulación que abarcan distintas escalas temporales y espaciales, con diferentes grados de exactitud. Para poder simular los efectos de la radiación sobre las prestaciones de un dispositivo se debe determinar, en primer lugar, la cantidad y distribución del daño generado por la radiación. Existen herramientas computacionalmente eficientes que proporcionan los defectos producidos por la radiación, pero solo son válidas cuando las interacciones entre los átomos son de alta energía ($> 200 - 500 \text{ eV}$) [8]. En condiciones de baja energía deben usarse otras técnicas computacionalmente más costosas, lo que limita su aplicación práctica. Una vez se ha obtenido la distribución de defectos se puede simular el comportamiento de estos defectos durante un recocido térmico y su interacción con los dopantes, para poder así predecir las características eléctricas del dispositivo.

El estudio de los efectos de la irradiación con partículas energéticas ligeras (como los protones) presenta notables diferencias frente a, por ejemplo, la simulación de la implantación iónica, donde las partículas incidentes presentan una masa similar a la de los átomos del sustrato. Los protones son partículas mucho más pequeñas que los átomos de Si, con lo que la probabilidad de una colisión directa con los átomos del sustrato es mucho menor. Debido a su alta energía y baja masa, la colisión de los protones con los átomos de Si puede dar lugar a la formación de diferentes isótopos de Si, o a fenómenos de transmutación cuando el átomo objetivo pierde uno o varios protones y se transforma en otro elemento diferente (Mg, Al, ...). Para poder modelar los efectos de la irradiación con protones en Si se deben utilizar códigos específicos que tengan en cuenta los mecanismos físicos que gobiernan las interacciones de estas partículas cargadas y muy energéticas con el sustrato de Si. Estas herramientas proporcionan la energía de aquellos átomos de Si que han recibido el impacto directo de los protones (conocidos como *Primary Knock-on Atoms*, o *PKAs*) y que pueden haber adquirido la suficiente energía cinética como para producir más colisiones y generar defectos en la red. La distribución en energía de los PKAs es un elemento esencial para poder simular la cantidad y distribución del daño producido por la irradiación.

La simulación del daño generado en irradiaciones con protones presenta algunas dificultades comparada con la irradiación con neutrones. La mayoría de los PKAs originados por los neutrones son superiores al keV [5]. Sin embargo, al ser los protones partículas cargadas, se espera que las interacciones coulombianas con los átomos del sustrato de Si produzcan un gran número de PKAs con baja energía. En estas condiciones las herramientas de simulación habituales pueden no describir adecuadamente el daño producido, y las técnicas que modelan correctamente las interacciones de baja energía son demasiado costosas computacionalmente. La falta de una descripción atomística correcta (y computacionalmente eficiente) del daño generado por protones es uno de los principales elementos que limitan la aplicación de técnicas de simulación atomísticas a la irradiación con protones en el campo de la Física de Alta energía.

Uno de los pocos casos de utilización de un esquema atomístico multi-escala para el estudio de los efectos de la radiación es el análisis del fenómeno de eliminación de aceptores (*acceptor*

removal) en dispositivos tipo p irradiados con neutrones [5]. La eliminación de aceptores es una de las principales limitaciones en el desarrollo de sensores de radiación en sustratos de Si tipo p para su utilización en el CERN. Consiste en la desactivación de los átomos de B (que dejan de comportarse como aceptores) debido a la interacción con los defectos generados por la irradiación de neutrones (intersticiales de Si). En este estudio se obtuvo en primer lugar el daño producido por neutrones de alta energía y posteriormente se simuló la interacción de los defectos con los átomos de B en las condiciones típicas de los detectores de radiación. El fenómeno de eliminación de aceptores también se ha observado experimentalmente al irradiar con protones, pero presenta unas características diferentes a la irradiación con neutrones. Para poder entender el comportamiento de los detectores frente a la irradiación de protones es necesario disponer *a priori* de una buena descripción del daño generado por los protones de alta energía.

En este Trabajo Fin de Grado utilizaremos técnicas de simulación atomísticas para analizar el daño producido por la irradiación de protones de alta energía en silicio. Emplearemos un entorno multi-escala de simulación, combinando herramientas para obtener el espectro de energía de los PKAs en la irradiación con protones, y para describir el daño causado por la irradiación. Analizaremos las características particulares de la generación de daño en colisiones de baja y media energía, en rangos de energía donde las técnicas habituales fallan. Los resultados obtenidos pueden contribuir a comprender mejor la generación de daño en condiciones de baja energía y a proporcionar una descripción más exacta del daño en irradiaciones con protones.

2. Mecanismos físicos de generación de daño por irradiación

2.1. Introducción

El silicio es el elemento químico de número atómico 14, situado en el grupo 14 y tercer período en la tabla periódica. Posee 23 isótopos conocidos, de los cuales tan solo 3 de ellos (^{28}Si , ^{29}Si y ^{30}Si) son estables, con proporciones de 92,23 %, 4,67 % y 3,1 %, respectivamente. Se encuentra en la naturaleza tanto en forma amorfa como cristalina, con características diferentes en cada caso. La red cristalina del silicio es similar a la del diamante [9], con dos celdas *FCC* desplazadas $\frac{a}{4}$ a lo largo de la diagonal del cubo. El parámetro de red a es de valor $a = 5,43 \text{ \AA}$, y su temperatura de fusión es de 1683 K ($1410 \text{ }^\circ\text{C}$). Todos los átomos de silicio en la red están unidos por enlaces covalentes de gran solidez, debido a que los electrones de valencia se encuentran fuertemente unidos a los átomos vecinos. La red cristalina del silicio puede presentar imperfecciones o defectos intrínsecos, que pueden abarcar desde defectos puntales hasta defectos extensos.

El Si es un elemento fundamental en la fabricación de los dispositivos electrónicos. Es un material semiconductor que precisa de otros elementos (dopantes) que lo doten de nuevas propiedades eléctricas útiles en la industria electrónica. Los elementos más utilizados como dopantes son el boro, el arsénico y el fósforo. El correcto dopado del silicio es un paso importante en la producción de circuitos integrados, y se realiza habitualmente mediante implantación iónica.

El proceso de implantación en un cierto sustrato se efectúa mediante bombardeo físico, es decir, mediante la colisión intencionada de ciertas partículas con energías generalmente altas sobre el sustrato que quiere doparse. La energía de implantación se elige en función de la profundidad de penetración de las partículas incidentes y de la distribución de defectos que se quiera tener en el material sobre el que se impacta. Habitualmente, se encuentra entre valores de 1 keV y 1 MeV . Los métodos de implantación sobre silicio generan defectos en el material y pueden producir la amorfización de ciertas regiones.

En irradiaciones con partículas energéticas ligeras (neutrones, protones, partículas alfa, ...) las energías utilizadas habitualmente son mucho mayores (generalmente, desde varios MeV hasta decenas de GeV) [10]. En la irradiación con partículas sin carga (como los neutrones) las partículas no pueden acelerarse y no hay control sobre su energía. Por este motivo, la irradiación se produce con todo el espectro de energías emitidas por el reactor, y no solo con una energía en concreto.

Durante este proceso de irradiación, la pérdida de energía cinética del átomo incidente puede producirse tanto por procesos inelásticos como elásticos.

Los procesos inelásticos son importantes en la irradiación con partículas cargadas (iones, hadrones, ...) y adquieren vital importancia cuando la partícula incidente posee mucha energía. Existen diferentes tipos de interacciones inelásticas en procesos de este tipo, tales como las interacciones coulombianas entre partículas e interacciones con la nube electrónica de la red del sustrato. Ciertas modelos, como la ecuación de *Bethe-Bloch* [11], dan cuenta del promedio de la pérdida de energía por distancia recorrida por partículas cargadas. Estos modelos pierden precisión a bajas energías de incidencia de las partículas. Es habitual que parte de la energía incidente se transmita a la red en forma de *fonones*, lo que conlleva a un aumento de la temperatura del material.

Los procesos elásticos conservan la energía total y el momento entre las partículas interactuantes.

Para una partícula cargada incidente de energía E y masa m , la máxima energía que puede ser transferida al átomo del sustrato es

$$E^{max} = 4E \frac{mm_{Si}}{(m + m_{Si})^2} \quad (1)$$

donde m_{Si} es la masa del átomo de silicio. Los valores estimados de la energía mínima que debe recibir el átomo de la red de Si para generar un desplazamiento (*energía de desplazamiento*, E_d) oscilan entre 10 y 30 eV [12].

2.2. Cascadas de irradiación

Durante el proceso de irradiación sobre un material, las partículas incidentes interactúan con los átomos del sustrato. La energía inicial de las partículas incidentes se va disipando mediante la transferencia de energía a los átomos del sustrato, generando a su vez daño en el material. Se denomina *cascada de irradiación* al resultado de este proceso, formada por los átomos desplazados y los defectos generados en el sustrato.

En un primer lugar, la partícula energética incide contra el material objetivo. Esta partícula puede penetrar una cierta distancia en el material antes de impactar de manera elástica contra alguno de los átomos de la red de la muestra. Las partículas irradiadas que penetran en el material en una dirección en la red en la que no hay átomos pueden producir fenómenos de canalización o *channelling*, desplazándose grandes distancias sin colisionar con otros átomos del material y pudiendo penetrar mucho en el material antes de colisionar. Como resultado de la colisión contra átomos de la muestra, estos pueden verse desplazados de sus posiciones de red. Generalmente, estos PKAs adquieren suficiente energía como para producir choques contra otros átomos de la red.

Debido a estos procesos los PKAs van sufriendo un frenado en el material, lo que aumenta su sección transversal de interacción y los va haciendo más propensos a sufrir una colisión con otros átomos, continuando con el proceso de la generación de la cascada de daño. Se entra por tanto en la segunda fase de la *cascada*, en el que se producen las colisiones entre los PKAs y los átomos de la red, provocando la formación de átomos desplazados secundarios, que a su vez serán energéticos y podrán seguir el proceso anterior.

Este proceso puede modelarse aproximando las colisiones entre partículas por colisiones binarias independientes del resto de partículas, análogamente a como lo harían las bolas en una mesa de billar. Se considera que las colisiones binarias son elásticas puesto que, pese a que los electrones pueden intervenir en el proceso de colisión, su pequeña masa frente a la del PKA evita que adquieran un momento relevante [13]. El daño generado por estas colisiones es variado: comúnmente el *recoil* (o átomo energético del material irradiado) desplaza a un átomo de la red y genera otro *recoil*. Sin embargo, en ocasiones puede producirse un fenómeno de sustitución, en el que el recoil incidente desplaza a un átomo de la red y ocupa su posición.

A medida que la cascada va formándose, la energía de los recoils generados es cada vez menor y, por lo tanto, la aproximación de colisiones binarias entre los recoils y los átomos de la red va siendo cada vez más imprecisa. Cuando la energía de los recoils es baja pueden interactuar con varios átomos de la red simultáneamente, produciéndose un fenómeno de colisiones múltiples. Durante este proceso tienen lugar interacciones atractivas (debida a las propiedades del material) y repulsivas

(cuando la separación interatómica entre núcleos es pequeña). Estas interacciones afectan a varias partículas del material al mismo tiempo. Dependiendo del tipo de cascada y de la energía de la partícula irradiada, las colisiones múltiples y el correspondiente dañado generado tendrá mayor o menor peso en el dañado total.

En la etapa final de la cascada, la energía de la partícula incidente está por debajo de la energía umbral de desplazamiento E_d , lo que impide que se produzcan desplazamientos de los átomos de su posición de red. En este punto pueden producirse fenómenos de fusión local de la red o *thermal spike* [14]. En ellos, la energía de la cascada excita a muchos átomos de la red próximos al recoil, produciendo una región con movimiento de los átomos alrededor de sus posiciones de equilibrio. Este fenómeno puede producirse incluso cuando la energía transferida es inferior al umbral de energía de desplazamiento [15]. El movimiento de los átomos provoca un calentamiento de la red en esa región, alcanzando localmente una temperatura mayor que la de fusión y produciendo una zona de material fundido. El posterior enfriamiento de las zonas fundidas da lugar a la recombinación de ciertos defectos y a la formación de regiones dañadas o, incluso, de pequeñas zonas amorfas conocidas como *amorphous-pockets* o *a-pockets*. Este fenómeno genera desorden en la red, pero no suele producir intersticiales o vacantes.

2.3. Irradiación con partículas energéticas ligeras

La irradiación con partículas ligeras posee ciertas diferencias frente a la irradiación con partículas de tamaño semejante a los átomos que forman la red del material. Debido al menor tamaño de estas partículas frente al tamaño de los átomos constituyentes del material, disminuye la probabilidad de colisión directa, favoreciéndose el fenómeno de *channeling* y el desplazamiento de grandes distancias en el material antes de producirse una colisión. En el caso de que las partículas ligeras posean carga (protones, partículas alfa, ...) el proceso de frenado se produce principalmente por interacciones coulombianas entre las partículas irradiadas y los átomos del material. En caso de que sean neutras (neutrones) no están sujetas a interacciones electrostáticas, pudiendo penetrar en el interior del núcleo con mayor facilidad. Este tipo de irradiación puede producir fenómenos tales como la ruptura de núcleos (al absorber estas partículas energéticas y volverse más inestables) y la emisión de partículas pequeñas, la creación de isótopos y otros elementos, etc.

Algunas reacciones comunes en la irradiación con protones son:

- Scattering, donde el protón colisiona con el núcleo y rebota en una dirección diferente (en general). Este proceso puede ser elástico si se produce una ligera transferencia de energía del neutrón al núcleo sin alterarse la estructura atómica del átomo; e inelástico si se produce la excitación electrónica del átomo, promocionando alguno de los electrones de la capa más externa a capas de mayor energía.
- Ionización, donde el protón produce la emisión de uno o varios electrones del átomo como resultado de la colisión entre ambos.
- Captura protónica, donde el núcleo de un cierto elemento ${}^A_Z X_N$ se transforma en otro elemento distinto ${}^{A+1}_{Z+1} X'_N$ tras la absorción del protón.

Para el caso del silicio, las distintas reacciones nucleares con neutrones pueden producir la formación de distintos isótopos en el material, transformando los núcleos de ${}^{28}\text{Si}$ en ${}^{27}\text{Si}$ cuando el

núcleo pierde un neutrón y ^{29}Si cuando lo capta. También pueden generarse átomos de Al y Mg , o mantenerse como ^{28}Si , absorbiendo parte de la energía del neutrón incidente.

En el ámbito de la física de alta energía el término *NIEL* (*non-ionising energy loss*) se refiere a la parte de la interacción de las partículas cargadas sobre el material objetivo, que resulta en un desplazamiento de las posiciones de red de la muestra. El valor de NIEL es una medida del número de defectos que puede generar una irradiación. La hipótesis NIEL asume que los efectos causados por la irradiación se escalan linealmente con el valor de NIEL [16]. Se asume por tanto que dos irradiaciones son equivalentes en términos de daño si poseen el mismo NIEL. Como referencia se utiliza el valor del NIEL para una irradiación de neutrones con 1 MeV . La hipótesis NIEL es muy utilizada para poder comparar el efecto de la irradiación de diferentes partículas y energías.

2.4. Defectos generados en los procesos de cascada

El sustrato que recibe la irradiación puede verse afectado por la formación de defectos en su estructura. En función de su tamaño, los defectos pueden clasificarse en defectos puntuales y extensos.

Los defectos elementales básicos son los átomos desplazados (*ADs*), formados por átomos o iones que ocupan posiciones no periódicas en el cristal, y los retículos vacíos (*RVs*), formados por posiciones en la red vacías, donde no se encuentra el átomo. En ocasiones, un átomo puede desplazarse en la red y posicionarse en otra zona de la misma, formando de esta forma un RV y un AD. Este tipo de defectos reciben el nombre de *par de Frenkel*, y su formación se debe principalmente a la irradiación de partículas sobre la red cristalina.

Los defectos puntuales (*intersticiales*, *Is* y *vacantes*, *Vs*) pueden existir en diferentes configuraciones y estar formados por varios ADs y RVs. Se denomina *intersticial* (*I*) al conjunto de defectos que posee un AD más que RV. Para el caso del Si, es probable encontrar distintas configuraciones de pequeño tamaño (*tetraédrica*, formada por un único AD; *dumbbell*, formada por 2 ADs y 1 RV; extendida, formada por 4 ADs y 3 RVs, ...) [17] que formen un defecto intersticial. De manera análoga, se denomina *vacante* (*V*) al conjunto de defectos que posee un RV más que AD. Las configuraciones de *Is* y *Vs* conocidas tienen un número reducido de ADs y RVs. En el caso del intersticial de Si, la configuración con un mayor número de defectos es la configuración extendida. Tanto los *Is* como las *Vs* son defectos puntuales *móviles*, es decir, poseen la capacidad de difundir incluso a temperatura ambiente. Múltiples estudios indican que no solo el mono-intersticial (*I*) puede difundir, sino que también tienen una alta movilidad el di-intersticial (*I*₂) y el tri-intersticial (*I*₃). [5].

Los defectos puntuales en la red pueden interactuar entre ellos. En caso de interactuar vacantes e intersticiales, puede producirse una aniquilación mutua, situándose el átomo intersticial en la posición vacante de la red. También puede producirse la interacción de dos o más defectos del mismo tipo, formando *clusters* de defectos que pueden alcanzar diferentes tamaños. Si alcanzan un tamaño elevado se forman defectos extensos, observables con microscopía. Cuando la red está muy dañada puede perderse la estructura cristalina, formándose regiones amorfas. Las regiones amorfas son zonas donde se ha perdido la estructura cristalina y están, por tanto, formadas por varios ADs y RVs. Algunos modelos utilizan el denominado par IV (formado por 2 ADs y 2 RVs) para simular las regiones amorfas [18]. En ocasiones, estas regiones amorfas pueden alcanzar gran tamaño, siendo posible incluso la formación de capas amorfas continuas.

Existen diversos modelos simplificados para estimar el daño generado que proporcionan fórmulas que estiman el daño generado. El modelo de Kinchin-Pease da cuenta del número de defectos puntuales generados por un proceso de implantación iónica en función de la energía transferida del ión al átomo del sustrato. Para ello, se asume que el número de defectos puntuales generados por un PKA es proporcional a dicha energía transferida. Se ha determinado, por ejemplo, una fórmula que calcula (de manera aproximada) el número de *pares de Frenkel* generados. Esta fórmula de *Kinchin y Pease* [19] resulta ser:

$$N_d = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < E < E_d \\ 1 & \text{si } E_d < E < 2E_d \\ \frac{E}{2E_d} & \text{si } 2E_d < E < E_1 \\ \frac{E_1}{2E_d} & \text{si } E_1 < E \end{cases} \quad (2)$$

donde N_d es el número de *pares de Frenkel* generados, E es la energía de la partícula incidente, E_d es la energía umbral de desplazamiento y E_1 es la energía por debajo de la cual los recoils generados pierden energía solo por colisiones elásticas [20].

Un estudio posterior, conocido como el *modelo de Norgett-Robinson-Torrens (NRT)*, propone una única fórmula simplificada para calcular el número de pares de Frenkel generados [20]:

$$N_d = \frac{\kappa(E - \hat{Q})}{2E_d} = \frac{\kappa}{2E_d} \hat{E}, \quad \text{con } \hat{E} > \frac{2E_d}{\kappa} \quad (3)$$

donde ahora κ es la eficiencia de desplazamiento del material, \hat{Q} es la energía perdida en la cascada por excitación electrónica y \hat{E} es la energía de daño.

Gracias a estos modelos puede obtenerse información cuantitativa acerca del daño. No obstante, no aportan información sobre la distribución espacial del mismo. Para simular el daño producido y su evolución durante un proceso de recocido se necesita saber no únicamente los tipos de defectos generados y su número, sino también sus posiciones. Para ello, se recurre al uso de las técnicas de simulación atomísticas.

3. Técnicas de simulación

Para calcular el dañado generado en los procesos de irradiación se pueden aplicar diversas técnicas de simulación.

Para obtener un alcance macroscópico (tanto espacial como temporalmente) del estudio del dañado generado, es común la aplicación de diferentes técnicas combinadas. Las técnicas que alcanzan escalas macroscópicas deben aplicar muchas simplificaciones. Por el contrario, las técnicas más fundamentales proporcionan una descripción más precisa del proceso, pero están limitadas a tiempos y dimensiones mucho más cortos, pues son computacionalmente muy costosas.

Una simulación correcta debe tomar como punto de partida la simulación de la generación del dañado por el proceso de irradiación. Para ello, se pueden utilizar técnicas *BCA* (*Binary Collision Approximation*), que aplica la aproximación de colisiones binarias entre las partículas. Las coordenadas de los pares de Frenkel proporcionadas por *BCA* se transfieren a códigos de Monte Carlo cinético (*kMC*, *kinetic Monte Carlo*), mediante los cuales se estudia la dinámica de los defectos durante los procesos de recocido térmico. Las herramientas *kMC* utilizan números aleatorios para simular la dinámica del sistema atendiendo a las energías de activación de los diferentes procesos que pueden ocurrir. Aquellos procesos con bajas energías de activación tienen una alta probabilidad de ser elegidos y ocurrirán frecuentemente, mientras que los procesos con altas energías son mucho menos probables. De esta forma, los métodos *kMC* pueden simular procesos de recocido dinámico y un gran número de procesos activados térmicamente como la difusión y evolución de defectos intrínsecos, la amorfización y recristalización, difusión y desactivación de dopantes, etc.

En el caso de la irradiación de Si con partículas energéticas ligeras (neutrones, protones, etc.) debe conocerse en primer lugar la interacción de estas partículas con el sustrato de Si. Las herramientas de simulación específicas para estas interacciones tienen en cuenta la sección transversal de interacción del átomo de Si con la partícula incidente de una determinada energía, y pueden determinar los átomos de Si que como resultado de la interacción tienen suficiente energía para generar una cascada. Como datos de salida se proporciona el número de recoils de Si generados en cada rango de energía. Esos recoils de Si pueden ser simulados por técnicas *BCA*.

Un ejemplo de la aplicación de estas técnicas de simulación es el estudio del proceso de eliminación de aceptores en Si tipo p irradiado con neutrones. En él se utilizó el código *Spectra-PKA* para obtener el espectro de PKAs resultante de la irradiación con neutrones. Estos recoils fueron simulados posteriormente con el código *BCA Marlowe* [8], que proporcionó las coordenadas de los defectos generados. Estos se trasladaron al código *kMC DADOS* [21] (del inglés *kinetic Monte Carlo - Diffusion of Atomistic Defects Object-oriented Simulator*, desarrollado por el Departamento de Electrónica de la Universidad de Valladolid). Este código es una herramienta para el modelado de procesos atómicos mediante el uso de la técnica de simulación Monte Carlo cinético, empleado en este trabajo para realizar la simulación de las cascadas y extraer los resultados de las simulaciones. *kMC DADOS* incluye modelos de evolución de defectos y de difusión y desactivación de dopantes. De esta forma se pudo simular la desactivación de los átomos de B provocada por la irradiación con neutrones y validar los resultados de la simulación con datos experimentales [22].

A continuación, se detallan las diferentes técnicas utilizadas.

3.1. Spectra-PKA

Spectra-PKA [23] es un programa en línea de comandos que proporciona el espectro de energía de los PKAs producidos al irradiar un material con neutrones o partículas ligeras cargadas. El espectro de energías de los PKAs indica la tasa de generación de PKAs (por unidad de tiempo y volumen) en función de la energía del PKA resultante. Estos PKAs incluyen todos los productos primarios de las reacciones nucleares, que pueden ser isótopos o elementos distintos del material sustrato, pero también otros productos secundarios que podrían ser emitidos (partículas ligeras como protones, neutrones, partículas alfa, etc.). Para evaluar todos los eventos que producen PKAs se tienen en cuenta no solo las colisiones elásticas e inelásticas, sino también interacciones no elásticas donde la partícula incidente puede ser capturada seguida de la emisión de una o más partículas ligeras (neutrones, protones, partículas alfa, radiación gamma, etc.).

Spectra-PKA utiliza el código de procesamiento de datos nucleares NJOY [24]. A partir de las bases de datos nucleares existentes NJOY genera las matrices de las secciones transversales (que poseen información sobre el área efectiva para las colisiones entre partículas) de las interacciones nucleares entre diferentes partículas incidentes y átomos del sustrato, para un amplio rango de energías. *Spectra-PKA* combina estas matrices de secciones transversales con el espectro de energías de la partícula energética incidente, obteniendo el espectro de energías de los PKAs producidos. Los espectros de energía contienen un total de 709 valores o intervalos [24]. La base de datos utilizada en este TFG es TENDL-2017 que puede descargarse directamente en un formato pre-compilado para poder ser leído por *Spectra-PKA* [25].

El rango de aplicación de *Spectra-PKA* está limitado por los datos disponibles en las base de datos de reacciones nucleares. *Spectra-PKA* puede simular la interacción de neutrones, protones, partículas alfa y tritones (2 neutrones y 1 protón) de hasta 200 MeV de energía con un gran número de átomos objetivo distintos. *Spectra-PKA* también simula sustratos que están compuestos por distintos isótopos, considerando para Si los isótopos ^{28}Si , ^{29}Si y ^{30}Si . *Spectra-PKA* es una herramienta desarrollada específicamente para determinar el espectro de energía de los PKAs producidos utilizando las bases de datos nucleares existentes. Existen otros códigos (como *Geant4* [26]) que incluyen también la generación de PKAs y pueden considerar energías incidentes mayores, pero utilizan diferentes modelos para estimar los PKAs generados y no se basan ya en los datos disponibles sobre reacciones nucleares.

Para lanzar una simulación con *Spectra-PKA* se debe indicar en el archivo de entrada, el tipo de partícula incidente y la composición química del elemento objetivo (especificando los isótopos más abundantes que lo componen y su peso relativo, entre otros parámetros). En otro archivo se detalla el espectro de energías de la partícula incidente, indicando el flujo o velocidad con que se realiza la irradiación (número de partículas por unidad de tiempo y superficie en cada rango de energía). Este flujo puede incluir simplemente una única energía (como en la irradiación con protones) o bien todo un espectro de energías para simular, por ejemplo, el espectro de energías de neutrones proporcionado por un determinado reactor. Para la simulación se debe contar también con los archivos que especifican las secciones eficaces entre las partículas incidentes y los diferentes elementos del material objetivo (un archivo para cada isótopo del sustrato considerado). Estos archivos son los incluidos en la base de datos TENDL-2017.

Al finalizar la simulación, *Spectra-PKA* proporciona el espectro en energía de los diferentes PKAs producidos, que incluyen los diferentes isótopos del sustrato, nuevos elementos con distinto

número atómico, partículas ligeras, etc. Además de la tasa de generación de los PKAs, se muestra también la suma acumulada de PKAs o la tasa del número de desplazamientos por átomo (dpa/s), entre otros.

3.2. Aproximación de colisiones binarias

La aproximación de colisiones binarias (o *Binary Collision Approximation*, *BCA*) es una técnica basada en la hipótesis de la secuencia de colisiones binarias producidas por los proyectiles en un material, cuando estos tienen una energía mucho mayor que la de los átomos del objetivo. Al colisionar se produce una pérdida de energía del proyectil, y una transferencia de energía a posibles *recoils*, que siguen una trayectoria determinada por un potencial de corto alcance. De esta forma, los recoils generados interactúan sólo con el átomo de la red más próximo a su trayectoria.

El código de BCA puede utilizar distintos potenciales de interacción entre partículas. Es común el uso del potencial *Ziegler-Biersack-Littmark* (*ZBL*) [27] para modelar la interacción interatómica con BCA, aunque también existen otros potenciales distintos empleados según el material que se use como sustrato de las simulaciones.

Existen diferentes códigos BCA que modelan las cascadas generadas por las partículas incidentes en un material:

- SRIM [28] emplea el código TRIM basado principalmente en las simulaciones Monte-Carlo de procesos de colisiones binarias. Posee una interfaz gráfica intuitiva, y permite simular cascadas para multitud de partículas incidentes (hasta una energía de $1 GeV$), debido a su extensa base de datos de materiales objetivo y de pérdida de energía electrónica. Utiliza el potencial universal de interacción ZBL, la *fórmula mágica de Biersack* [29] para resolver la integral de scattering y considera blancos amorfos. Resulta ser una buena aproximación, aunque no tiene en cuenta distintos mecanismos de daño tales como el daño por excitación electrónica. La comparación con los resultados experimentales muestra ciertos inconvenientes de este código, como una sobreestimación del rendimiento de la pulverización catódica o *sputter* para grandes ángulos de incidencia. [30]
- MARLOWE es un código que modela el lanzamiento del proyectil tanto desde un haz externo como desde el interior del material objetivo. Posee varios potenciales interatómicos, que rigen la dispersión elástica producida [31]. Diversos efectos inelásticos (como la excitación de electrones) se encuentran incluidos en una aproximación de baja energía ($E \lesssim 25 keV/uma$) [32]. Está escrito en *Fortran*, aunque algunos procedimientos están escritos en *C* para la versión de *Unix*. En las simulaciones BCA que hemos realizado se ha utilizado Marlowe a través del código DADOS.

BCA modela de manera razonable el proceso de colisiones binarias durante la simulación, dado que en esta primera fase las colisiones son más energéticas y, por tanto, la aproximación es más acertada. El límite de validez de esta hipótesis BCA se encuentra en las colisiones de energía suficientemente baja, donde el recoil experimenta colisiones múltiples con los átomos de su entorno, que no están bien descritas por el método BCA. A muy bajas energías, se espera que BCA no modele bien las colisiones entre partículas debido a que las fuerzas de red de los átomos del material objetivo son comparables a la energía de los recoils. BCA no considera las fuerzas reticulares del material, aproximando la interacción de los proyectiles con el material objetivo por colisiones binarias

independientes [33], cuando en realidad se está produciendo un fenómeno de colisiones múltiples. De igual forma, BCA tampoco es capaz de modelar correctamente fenómenos como la fusión local y la creación de regiones amorfas, propias de las colisiones de baja energía donde BCA pierde validez.

Existe cierta incertidumbre en la determinación del valor umbral de validez de la técnica BCA. El rango de validez se estudia por comparación con otros modelos que describen mejor las colisiones entre partículas a bajas energías como, por ejemplo, la dinámica molecular MD [34]. Teóricamente, BCA es aplicable siempre que la velocidad del proyectil sea significativamente mayor que la velocidad del sonido en el material [8, 35]. Para el caso del silicio, la energía cinética asociada a la velocidad del sonido es de unos 10 eV , lo que fijaría el límite de validez de BCA en varias decenas de eV. Sin embargo, se ha determinado que el umbral mínimo de energía para la validez de BCA en irradiación sobre Si es de $30M^{0.55}$, donde M es la masa del proyectil, que en caso de recoils en Si equivale aproximadamente a 188 eV [36]. Algunos autores se basan en comparaciones entre BCA y MD para validar la utilización de BCA sobre los 100 eV [37] o los 500 eV [38]. Los métodos combinados BCA-MD consiguen una mejor descripción del daño que el método BCA, pero supone un incremento del coste computacional frente a los modelos exclusivamente BCA. Este aumento es debido a la utilización de MD para simular la parte final de las cascadas, que es precisamente la que más tiempo consume. Otros autores han propuesto modelos mejorados de BCA con el objetivo de mantener la eficiencia computacional de este método, pero proporcionando una descripción más precisa del daño [36, 39].

3.3. Dinámica molecular clásica

La técnica de dinámica molecular clásica (o *Molecular Dynamics*, *MD*) es un método que simula la interacción entre átomos o moléculas de un material y, en concreto, simula con precisión las colisiones de baja energía, debido a que usa potenciales de largo alcance que modelan las fuerzas que ejercen colectivamente los átomos de la red sobre el recoil. No obstante, el coste computacional de esta técnica aumenta considerablemente en comparación a la técnica BCA. Este método resuelve las ecuaciones del movimiento por integración numérica de las N partículas que forman el sistema, empleando un potencial de interacción interatómico y unas condiciones de contorno específicas.

La interacción entre las partículas del sistema está dada por un cierto potencial. A grandes distancias la interacción es ligeramente atractiva, debido a diversos efectos (fuerzas de Coulomb y de Van der Waals, enlaces covalentes, metálicos o de puentes de hidrógeno,...). A cortas distancias la interacción es fuertemente repulsiva, debido principalmente a la repulsión coulombiana entre los núcleos (y entre los electrones) de los átomos y al solapamiento de los orbitales electrónicos. Existe una cierta distancia r_0 a la cuál el potencial presenta un mínimo, y se corresponde con la distancia de equilibrio entre los átomos de la red del material.

Una manera sencilla de describir el potencial de interacción es bajo la aproximación de la interacción por pares de partículas, lo que da lugar a los *potenciales a pares*. Existen también potenciales que describen la interacción en metales, considerando los átomos como cargas iónicas positivas, embebidas en un gas de electrones circundante. Muchas descripciones de potenciales en metales utilizan actualmente la forma funcional de los modelos *EAM* (*Embedded Atom Method*).

Respecto a potenciales de materiales semiconductores son destacables los siguientes potenciales:

- Stillinger-Weber (*SW*) [40]: es un potencial a tres cuerpos en el que se tiene en cuenta la

dependencia angular entre los átomos. Este potencial no reproduce de manera adecuada estructuras superficiales y politípicas del silicio, aunque describe correctamente multitud de propiedades, como la fusión del material.

- Tersoff [41-43]: es un potencial que considera que la fuerza de enlace de los átomos depende de la posición y del número de átomos vecinos en la fuerza de enlace de los átomos. Además de las propiedades descritas anteriormente para Stillinger-Weber, el potencial de Tersoff es capaz de describir de manera razonable las configuraciones de enlace no-tetraédricas.

Ambos potenciales fueron descritos inicialmente para el silicio. No obstante, posteriores actualizaciones de estos potenciales permitieron describir propiedades de otros elementos semiconductores (como el Ge [44]) y compuestos (como el Si-C o el Si-Ge [45]) cambiando los valores de los parámetros utilizados en los potenciales.

El potencial de Stillinger-Weber calcula de manera correcta la temperatura de fusión del Si, obteniendo un valor muy próximo al experimental. Por el contrario, Tersoff sobreestima esta temperatura de fusión, obteniendo valores mucho mayores a los experimentales. Se ha estudiado esta sobreestimación, obteniendo valores de la temperatura de fusión de $T_m = 2431 K$ para Tersoff, frente a $T_m = 1653 K$ para SW, mucho más cercanos al valor experimental ($T_m = 1685 K$) [12]. Este hecho puede introducir errores en el modelado de los procesos de fusión local, al utilizar una temperatura de fusión del material muy alejada de la experimental.

Los potenciales de Tersoff y de Stillinger-Weber no simulan de manera correcta las fuertes interacciones repulsivas que suceden cuando un recoil se aproxima mucho a un átomo. Estas situaciones son muy comunes al irradiar un material, dado que los recoils pueden tener una energía cinética muy elevada, llegando a aproximarse mucho a los átomos de la red. Es conveniente, por lo tanto, combinar los potenciales semi-empíricos usuales (Tersoff, Stillinger-Weber, ...) con potenciales repulsivos que describen de manera más precisa las colisiones de altas energías. Un potencial interatómico repulsivo que modela correctamente las interacciones a corto alcance es el potencial ZBL. El acoplo se realiza mediante una función *tipo Fermi* $f_F(r_{ij})$ [12]

$$f_{total} = f_F(r_{ij}) \cdot f_{pot} + (1 + f_F(r_{ij})) \cdot f_{ZBL}, \quad \text{con} \quad f_F(r_{ij}) = \frac{1}{1 + e^{-A_F(r_{ij}-r_C)}} \quad (4)$$

en la que r_{ij} es la distancia entre las partículas interactuantes, f_{pot} es el potencial SW o Tersoff, f_{ZBL} el potencial ZBL, A_F el parámetro que controla la brusquedad de la transición entre los potenciales y r_C el punto de transición, en el cual cada potencial contribuye un 50 % a describir la interacción.

Con la técnica MD se puede simular la formación y difusión de defectos puntuales. Para la generación de dañado por irradiación resulta también adecuada, pero en escalas espaciales de (como mucho) decenas de miles de átomos y tiempos del orden de nanosegundos. No obstante, se encuentra limitada por las aproximaciones realizadas en las simulaciones, que deben ser evaluadas de manera exhaustiva para cada problema considerado. Este método no tiene en cuenta posibles efectos cuánticos. Por lo tanto, cuando estos sean relevantes, la descripción dada por MD puede perder precisión o, incluso, ser errónea. Tales son los casos de las fuerzas y enlaces del material con naturaleza cuántica, la transferencia de electrones y la formación/ruptura de enlaces. Esta técnica no simula las interacciones electrónicas específicamente, solo las interacciones nucleares. No obstante, los potenciales interatómicos modelan de forma global las interacciones entre los átomos, lo que recoge hasta cierto punto el efecto de los núcleos y los electrones. Por otra parte, aumentar

la dimensión del problema a estudiar conlleva un incremento del coste computacional, que puede hacer inabarcable la resolución del problema mediante este tipo de simulaciones.

3.4. Recursos computacionales

Hemos realizado las simulaciones en el *cluster Beta* del Laboratorio de Simulación situado en el Departamento de Electrónica de la Universidad de Valladolid, dado que la capacidad de computación de un ordenador personal no permitiría la realización de las simulaciones en un periodo de tiempo útil. Esta máquina consta de 16 nodos con 8 procesadores de 8 GB de memoria RAM cada uno. *Beta* posee un sistema de alimentación ininterrumpida para evitar la pérdida del trabajo realizado en caso de producirse un corte de suministro eléctrico; e incluye varios discos duros para almacenar la información obtenida durante las simulaciones.

Para realizar la conexión a *Beta*, se usaron distintos programas, tales como *SSH Secure Shell Client* y *X-Win32* en el sistema operativo Windows y una conexión directa desde el *Terminal* en Linux.

Hemos seguido la monitorización de las simulaciones mediante un enlace privado, que informaba tanto de la capacidad de los nodos de *Beta* como de su carga de trabajo y tiempo de cómputo empleado.

4. Irradiación con protones en silicio

Al irradiar un material, las partículas incidentes generan daño desplazando los átomos de la red. No obstante, los proyectiles ligeros (neutrones, protones y partículas alfa) pueden además fragmentar el núcleo de los átomos del material objetivo, produciendo la emisión de nucleones o *espalación*. Este fenómeno puede dar lugar a la formación de isótopos (al captar/emitir neutrones) o nuevos elementos de número atómico menor (al emitir protones o partículas alfa), lo que se conoce como *transmutación*.

La interacción de hadrones o partículas cargadas (como los protones) con el sustrato es diferente a la de neutrones, pues en las primeras tienen un peso importante las interacciones coulombianas. La sección transversal de las interacciones electromagnéticas es, normalmente, órdenes de magnitud mayor que la de la fuerza nuclear. Esto implica que las partículas cargadas poseen un camino libre medio mucho menor que las partículas no cargadas. Las partículas cargadas interactúan eléctricamente con los orbitales electrónicos (pudiendo excitar e ionizar los átomos) y con los núcleos, haciendo a estas partículas menos penetrantes que otras partículas neutras (como los neutrones).

Las condiciones de irradiación utilizadas en experimentos con partículas cargadas y no cargadas son también diferentes. Los neutrones no pueden ser discriminados por energía, pues no están cargados. En experimentos de irradiación con neutrones se somete a la muestra a todo el espectro de neutrones que emite el reactor, que abarca entre 10^{-8} hasta 10 MeV [10]. Es decir, el sustrato recibe el impacto de neutrones con un rango muy amplio de energías. Sin embargo, las condiciones de irradiación con protones están mucho más controladas, pues al ser partículas cargadas se puede irradiar una muestra con protones de una energía concreta. Habitualmente, las energías de los protones usadas en distintas aplicaciones varían a lo largo de un amplio rango. En las instalaciones del *CERN East Area* donde se sitúa el sincrotrón de protones, la intensidad del haz de protones posee un valor de $24 \text{ GeV}/c$ (donde GeV/c es una unidad de momento lineal) [46]. En las instalaciones canadienses *TRIUMF* [47], el ciclotrón permite trabajar con haces de protones que alcanzan los 500 MeV , aunque para la mayoría de experimentos desarrollados se han usado energías de $10 - 100 \text{ MeV}$. En el *Helmholtz Zentrum Berlin (HZB)* [48] el haz de protones estándar tiene una energía de 68 MeV .

Para estudiar los efectos de la irradiación de protones en Si se debe conocer en primer lugar el espectro de PKAs resultante. Para ello es necesario utilizar herramientas de simulación específicas que consideren todas las interacciones posibles entre los protones y los átomos de Si que describimos anteriormente y que reproduzcan los fenómenos de espalación y transmutación. El código *SPECTRA-PKA* utiliza bases de datos nucleares donde se recogen las secciones transversales para la interacción de protones de hasta 200 MeV con Si, y puede proporcionar el espectro de los PKAs generados así como de las partículas ligeras emitidas. En nuestro estudio hemos utilizado *Spectra-PKA* para simular la irradiación con protones de 70 MeV , energía típica empleada en los aceleradores de *Karlsruhe*, *Birmingham* y *Los Álamos* [49] o en instalaciones como el *CYRIC* en *Tohoku* [50]. También hemos simulado la irradiación con protones de energía 199 MeV , límite máximo con el que el programa permite trabajar.

En primer lugar hemos simulado la irradiación con protones 70 MeV de energía de una muestra de Si compuesta por los 3 isótopos más abundantes (^{28}Si , ^{29}Si , ^{30}Si) en las proporciones habituales del 92,23 %, 4,67 % y 3,1 %, respectivamente. En la figura 1 se muestra el espectro de energía de las principales partículas emitidas como consecuencia de la irradiación con protones: protones (núcleos

de H), partículas alfa (núcleos de He), y núcleos de ^{28}Si , ^{29}Si y ^{30}Si .

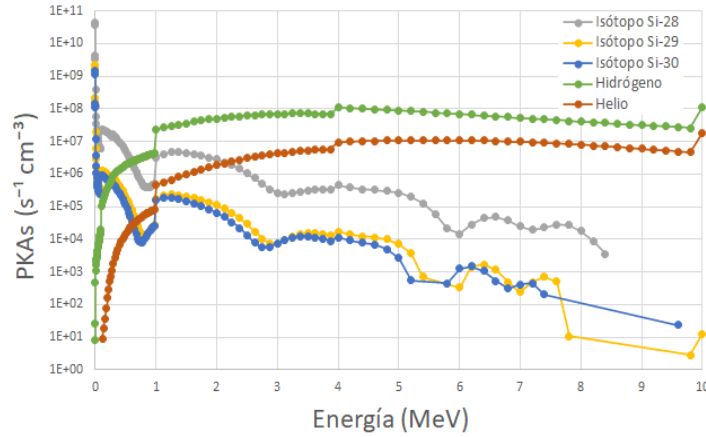


Figura 1: Distribución de energía de los PKAs generados por segundo y unidad de volumen en una irradiación de protones con 70 MeV sobre un sustrato de Si formado por los 3 isótopos fundamentales.

Spectra-PKA proporciona el número de PKAs generados por segundo y por unidad de volumen en cada rango de energía. Los rangos de energía se escogen de manera logarítmica en función de la energía de los PKAs, abarcando un intervalo de energía mayor según la energía de los PKAs aumenta. Por ese motivo se observan algunos escalones en las curvas (como a 1 y 4 MeV) cuando cambia el tamaño del rango de energía. El espectro de energías de los PKAs producidos al irradiar con protones de 70 MeV llega hasta los 10 MeV . Los PKAs más abundantes a alta energía son los núcleos de H y He. Entre los isótopos de Si, el número de los PKAs de ^{28}Si es casi dos órdenes de magnitud superior a los otros dos isótopos. La emisión de ^{28}Si es la interacción predominante a bajas energías.

Las partículas ligeras emitidas son muy poco másicas y de poca energía ($< 10\text{ MeV}$) por lo que el daño generado por estos PKAs en la red de Si será despreciable. En relación a los isótopos de Si, los PKAs de ^{28}Si son claramente predominantes. Además, los tres isótopos poseen una masa muy similar, con lo que se puede esperar que generen una cantidad y tipología del daño muy parecida. Por estos motivos, utilizaremos en nuestro estudio sustratos compuestos exclusivamente por ^{28}Si , y analizaremos el espectro de los PKAs de Si producidos, sin tener en cuenta la emisión de partículas ligeras.

En la figura 2 mostramos el espectro de energía de los PKAs producidos al irradiar con distintas partículas un sustrato formado exclusivamente por ^{28}Si . Hemos simulado la irradiación con neutrones de 1 MeV , y con protones y partículas alfa de 70 y 199 MeV . El valor de referencia utilizado en la hipótesis NIEL para comparar el daño producido por diferentes tipos de partículas es de 1 MeV de neutrones.

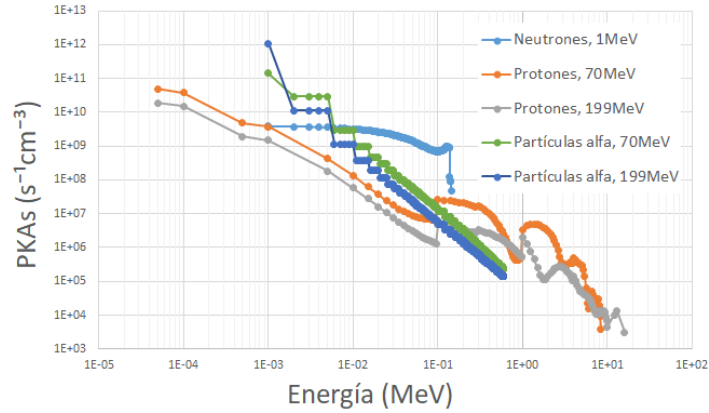


Figura 2: Distribución de energía de los PKAs generados por segundo y unidad de volumen al irradiar un sustrato de ^{28}Si con neutrones de 1 MeV , y protones y partículas alfa de 70 y 199 MeV .

Los espectros de la irradiación con protones de distinta energía son similares y abarcan un amplio rango de energías, desde decenas de eV hasta alrededor de 10 MeV . Con 70 MeV se produce un mayor número de PKAs mientras que el espectro obtenido con 199 MeV se extiende a energías algo mayores. La irradiación con partículas alfa de 70 y 199 MeV da lugar a un espectro de energías más reducido, con una distribución similar en ambas pero diferencias en el número de PKAs producidos. Una característica común de la irradiación con protones y con partículas alfa es que los PKAs de baja energía son predominantes y el espectro de energías posee una pendiente elevada. Al aumentar la energía de los PKAs su número se reduce notablemente, llegando a haber diferencias en el número de los PKAs generados de hasta 6 órdenes de magnitud.

El espectro de PKAs resultante al irradiar con neutrones de 1 MeV es diferente al obtenido con protones o partículas alfa. El espectro de energías es más estrecho (de 1 a 150 keV) y más uniforme, pues el número de los PKAs producidos no se reduce de forma tan marcada con la energía de los PKA. En la figura 3 representamos el porcentaje acumulado de PKAs producidos en función de su energía, para las irradiaciones analizadas en la figura 2.

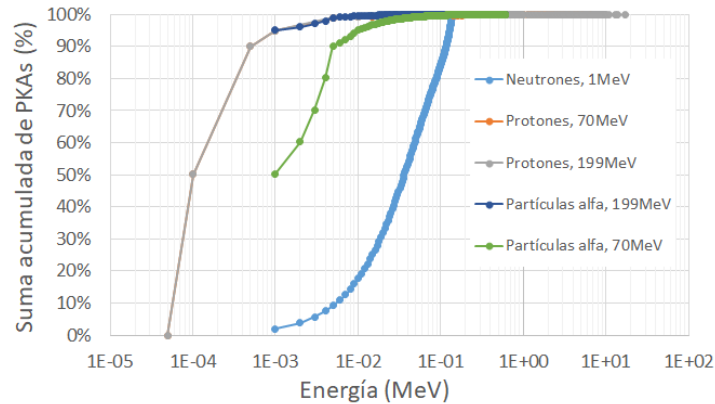


Figura 3: Porcentaje acumulado de PKAs generados al irradiar un sustrato de ^{28}Si con neutrones de 1 MeV , y protones y partículas alfa de 70 y 199 MeV .

Podemos apreciar cómo en las irradiaciones con protones, y también al irradiar con partículas alfa de alta energía (199 MeV), la mayor parte de los PKAs producidos son de baja energía. En particular, más del 90% de los PKAs generados tienen una energía inferior a 1 keV, y cerca de un 50% poseen energías por debajo de 100 eV. Esto tiene importantes implicaciones a la hora de simular el daño resultante al irradiar Si con protones, pues se deben utilizar herramientas de simulación que describan correctamente las interacciones de baja energía. Como la mayor parte de los PKAs son del orden de pocos centenares de eV, los PKAs pueden experimentar colisiones múltiples con los átomos de la red que deben ser adecuadamente simuladas. En la irradiación con protones (y en algunas condiciones, partículas alfa) los códigos BCA pueden no describir bien el daño, pues los PKAs son de baja energía, donde fallan los modelos BCA.

Conclusiones

Utilizando el código *Spectra-PKA* hemos obtenido la distribución de energía de los PKAs producidos al irradiar Si con diferentes partículas. La irradiación con protones de un sustrato de Si da lugar a la emisión de núcleos de H, He y diferentes isótopos de Si. Desde el punto de vista del daño, el principal PKA resultante son los núcleos del isótopo ^{28}Si , pues es mucho más abundante que el resto de isótopos y es mucho más másico que el H y el He. La irradiación con protones y partículas alfa de alta energía produce PKAs con un amplio rango de energías, siendo los PKAs de baja energía mucho más numerosos. Los protones de 70 MeV producen PKAs con energías que abarcan desde decenas de eV hasta decenas de MeV, pero más del 90% de los PKAs tienen una energía inferior a 1 keV y en torno a un 50% tienen una energía por debajo de 100 eV.

5. Simulación de cascadas de baja energía con técnicas BCA

Las técnicas BCA simulan las colisiones entre una partícula incidente y los átomos del sustrato, proporcionando una descripción de las cascadas de daño resultantes. Los códigos BCA permiten obtener de forma rápida y computacionalmente eficiente el daño causado por irradiación, al estar basados en la aproximación de colisiones binarias y no simular los efectos electrónicos ni las vibraciones de los átomos de la red. Además, los resultados proporcionados por BCA pueden ser transferidos a códigos Monte Carlo que simulan la dinámica de los defectos durante un recocido térmico y las interacciones entre los defectos y los dopantes e impurezas.

En este TFG hemos utilizado el código BCA Marlowe para simular el daño producido por PKAs de baja energía (entre 50 eV y 1 keV) en Si. De esta forma podemos caracterizar el daño resultante en irradiaciones de protones en Si, pues como vimos en el capítulo anterior más del 90% de los PKAs tienen energías inferiores a 1 keV .

Marlowe tiene en cuenta todas las colisiones en las que se produce una transferencia de energía entre el átomo incidente y el átomo objetivo. Si la energía transferida al átomo objetivo es superior a la energía umbral de desplazamiento, el átomo es desplazado de su posición de red. En esta interacción se genera un par de Frenkel, es decir, un átomo desplazado y un retículo vacío. El átomo desplazado puede a su vez contar con una energía lo suficientemente alta como para provocar más colisiones y generar más defectos. Marlowe sigue la trayectoria de todos los átomos energéticos que tengan una energía lo suficientemente elevada como para producir más daño. Por otro lado, en aquellas colisiones en las que la energía transferida es menor que la energía umbral de desplazamiento no se generan defectos: el átomo objetivo no es desplazado y Marlowe simplemente registra la energía depositada en esa colisión.

Estos procesos están controlados mediante tres parámetros de entrada que deben definirse antes de lanzar una simulación:

- *ebind*: energía de enlace o energía umbral de desplazamiento necesaria para producir un par de Frenkel. Se generará un par de Frenkel siempre que en una colisión se transfiera una energía superior o igual a *ebind*. En nuestras simulaciones utilizamos el valor standard para Si:
 $ebind = 15\text{ eV}$
- *equit*: energía cinética mínima que deben tener las partículas para que Marlowe haga un seguimiento de su trayectoria y posibles colisiones. A este parámetro se le asignó un valor de $equit = 10\text{ eV}$ en nuestras simulaciones. Esto significa que si una partícula posee una energía cinética inferior a 10 eV , Marlowe deja de seguir esa partícula pues no va a generar más daño.
- *emintrans*: Energía mínima que puede transmitirse a una partícula objetivo en una colisión. Marlowe realiza un seguimiento de la energía transmitida en todas las colisiones, siempre que esa energía sea superior a *emintrans*. El valor empleado en las simulaciones es de
 $emintrans = 0,03\text{ eV}$

Como resultado de la simulación Marlowe genera varios archivos de salida. Por un lado, proporciona las coordenadas de todos los átomos desplazados y retículos vacíos producidos en cada cascada. Como dijimos anteriormente estas coordenadas pueden ser transferidas a otros códigos que simulan la difusión e interacciones de estos defectos. Marlowe proporciona además las coordenadas y energía de todos los átomos objetivo que han recibido una energía superior a *emintrans* e inferior

a *ebind*. Estos átomos, conocidos como Hot Particles (HPs) han recibido una energía que no es suficiente para desplazarlos de su posición de red. Sin embargo, esta energía se transfiere a la red en forma de fonones, produciendo un aumento local de la temperatura (y una fusión de la red si se supera localmente la temperatura de fusión del material).

Marlowe también proporciona una estadística de las colisiones producidas en cada cascada y de la cantidad de energía que se ha destinado a producir pares de Frenkel o ha sido simplemente transferida a los átomos objetivo. En particular, Marlowe especifica las siguientes energías:

- *binding loss*: energía que se ha destinado a producir pares de Frenkel. Esta energía se corresponde con el número de pares de Frenkel generado multiplicado por *ebind*.
- *subthreshold loss*: energía perdida en colisiones que no han dado lugar a la formación de *pares de Frenkel*.
- *remaining kinetic*: energía cinética de todas las partículas que Marlowe ha dejado de seguir pues su energía era menor que *equit*. Marlowe especifica la energía cinética tanto del ion o PKA *ionRemKinetic (eV)* como del resto de recoils *recRemKinetic (eV)*

Hemos simulado con Marlowe PKAs de 50, 100, 200, 500 y 1000 *eV*, cubriendo los rangos de energía típicos de los PKAs producidos por la irradiación de protones. La temperatura de la simulación fue de -200 °C para evitar la difusión e interacción de los defectos. Se utilizaron celdas con una superficie de $100 \times 100 \text{ nm}^2$ y una profundidad de 1000 nm con condiciones periódicas en los 3 ejes. Con estas dimensiones las cascadas de irradiación están enteramente contenidas en la celda, incluso las cascadas de mayor energía. La dosis de PKAs simulada fue de 10^{13} cm^{-2} y se usó una *dose rate* o velocidad de implantación de $10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Con la dosis de PKAs considerada y teniendo en cuenta la superficie de la celda, se simularon un total de 1000 cascadas para cada energía de PKAs.

En la figura 4 mostramos el porcentaje de la energía inicial del PKA destinado a producir pares de Frenkel (*binding loss*), transferido en colisiones que no generan daño (*subthreshold loss*) o que permanece como energía cinética de las partículas que Marlowe deja de monitorizar (*remaining kinetic*). Los datos corresponden a todas las energías de PKAs analizadas y son promedios de los 1000 PKAs simulados en cada energía. También se muestra la desviación standard de los promedios calculados.

Si las energías de los PKA son elevadas (por encima de 200 eV) las curvas son planas, es decir el reparto de las energías no cambia con la energía inicial del PKA. Vemos que solo un 30% de la energía inicial del PKA se emplea en generar pares de Frenkel, y que la gran mayoría (un 60%) se ha transferido en colisiones que no producen daño. Esto indica que la generación de defectos no es un proceso muy eficiente, pues una gran parte de la energía se acaba disipando en forma de fonones sin producir defectos.

Si las energías de los PKAs son bajas (aproximadamente menores que $200 - 300 \text{ eV}$) la distribución de energías es diferente. El porcentaje de energía destinado a producir pares de Frenkel se reduce y aumenta la fracción de energía que no produce desplazamiento o que se pierde en partículas que dejan de seguirse. Recordemos que los parámetros que controlan la generación de cascadas en Marlowe (*ebind* y *equit*) tienen valores constantes en nuestras simulaciones de 15 y 10 eV , respectivamente. Cuando la energía del PKA es baja, estos valores son comparables a la energía inicial

del PKA y suponen una fracción significativa de la energía del PKA. Por ejemplo, si durante la cascada el PKA adquiere una energía inferior a 10 eV , deja de seguirse y esa energía no se emplea en producir daño. Si la energía inicial del PKA es de 1 keV , esta energía es solo el 1% de la energía inicial, pero representa el 20% de la energía inicial de los PKA de 50 eV . Por este motivo, Marlowe puede subestimar la generación de daño en PKAs de baja energía, pues solo considera colisiones binarias, y la fracción de energía disipada sin generar pares de Frenkel es elevada.

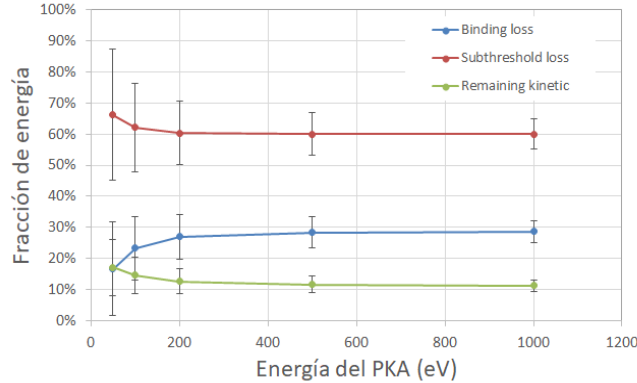


Figura 4: Fracción de la energía destinada a *binding*, *subthreshold* y *remaining* en función de la energía del PKA en simulaciones con Marlowe.

Hemos comparado los resultados de Marlowe con los obtenidos con modelos predictivos y simulaciones de dinámica molecular clásica. Los modelos de Kinchin-Pease y NRT permiten predecir el número de defectos generados en base a la energía depositada utilizando para ello parámetros obtenidos mediante ajustes a datos experimentales. Para estos cálculos empleamos una energía umbral de desplazamiento de 15 eV . Hemos realizado simulaciones de dinámica molecular clásica de recoils con energías de 50 a 1000 eV , utilizando los potenciales de Tersoff y SW. Las condiciones y los detalles de estas simulaciones se explican en el capítulo 6. En la figura 5 mostramos el número promedio de defectos por PKA o recoil proporcionado por Marlowe y el obtenido con MD para ambos potenciales, así como el número de defectos calculado con las fórmulas de Kinchin-Pease y NRT.

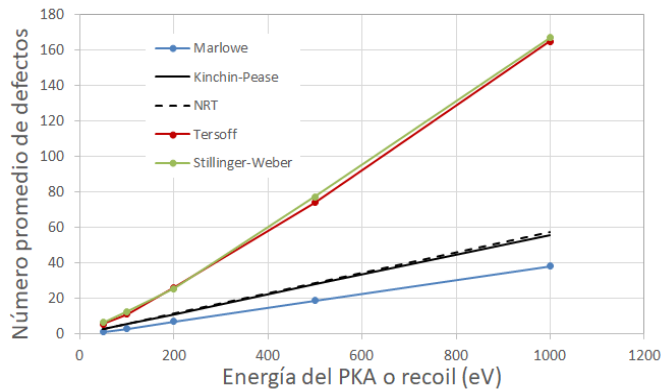


Figura 5: Número promedio de defectos por PKA o recoil en función de la energía inicial. Los resultados corresponden a simulaciones con Marlowe, simulaciones de MD con los potenciales de Tersoff y Stillinger-Weber y cálculos con los modelos de Kinchin-Pease y NRT.

Lo que se representa es el número de defectos, es decir átomos desplazados o retículos vacíos, que se corresponde con el doble del número de pares de Frenkel. La técnica de MD genera un número muy elevado de defectos comparado con Kinchin-Pease y NRT (que dan valores similares) y los resultados de Marlowe. Recordemos que, de las técnicas empleadas en este TFG, MD es la que proporciona los resultados más precisos y es capaz de modelar los fenómenos de colisiones binarias, múltiples y la fusión local de la red.

La técnica de MD genera un gran número de átomos desplazados y retículos vacíos que en muchas ocasiones están próximos entre sí y pueden llegar a recombinarse incluso a temperatura ambiente. Para estudiar los procesos de difusión, desactivación de dopantes, etc. es importante analizar el número de defectos netos (ADs o RVs) que puedan permanecer tras la recombinación local de los defectos. Por ejemplo, para el estudio de la eliminación de aceptores en Si tipo p, los elementos más importantes son los intersticiales de Si que puedan existir, pues son los que van a interactuar con los dopantes (el boro en este caso) y desactivarlos. Por ese motivo, hemos agrupado los átomos desplazados y retículos vacíos obtenidos con MD que se encuentren próximos y hemos calculado el neto del grupo (número de ADs – número de RVs). Por ejemplo, un grupo formado por 4 átomos desplazados y 3 retículos vacíos que estén próximos tiene un neto de +1. Si estos defectos se recombinaran entre sí solo sobreviviría un átomo desplazado (el neto). Los detalles de estos cálculos se explican en el capítulo 6.

En la figura 6 mostramos el número promedio de defectos por PKA o recoil proporcionado por MD, Marlowe y los modelos teóricos, igual que en la figura 5, pero en el caso de MD representamos el neto de los grupos formados. Observamos que, de esta forma, MD es la que genera un menor número de defectos netos, y que existen notables diferencias entre los resultados obtenidos con los potenciales de Tersoff y Stillinger-Weber. En los datos obtenidos de las simulaciones de MD se observan dos comportamientos distintos en función de la energía del PKA.

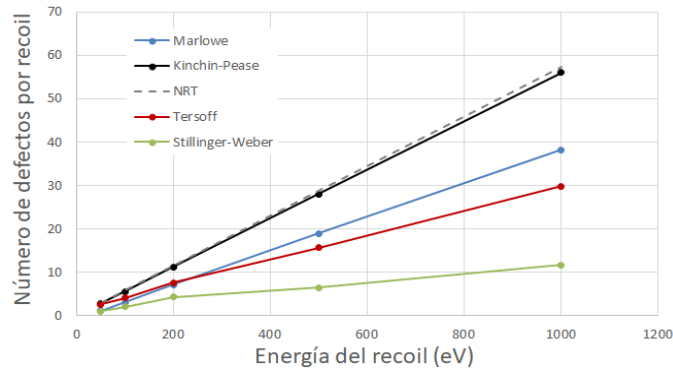


Figura 6: Número promedio de defectos generado por recoil en función de la energía del recoil para simulaciones con Marlowe, simulaciones de MD con los potenciales de Tersoff y Stillinger-Weber y cálculos con los modelos de Kinchin-Pease y NRT. Los valores de MD corresponden a los netos de los grupos de defectos formados.

Para comparar mejor la generación de defectos según las diferentes técnicas conviene estimar el gasto energético que supone producir un defecto. Este gasto energético se calcula dividiendo la energía inicial del PKA entre el número promedio de defectos generados por cada PKA. El gasto energético en la producción de defectos ($eV/defecto$) para las diferentes técnicas se muestra en la figura 7, considerando el neto de los grupos de defectos en las simulaciones de MD. El coste

energético de los modelos de Kinchin-Pease y NRT es constante, pues la producción de defectos se estima en base a la energía umbral de desplazamiento (que es un valor constante). En la técnica BCA (Marlowe) el coste energético es elevado cuando la energía inicial del PKA es baja (menor a 200 eV). Como vimos anteriormente, en estas condiciones la fracción de energía destinada a producir pares de Frenkel es reducida, pues un porcentaje significativo de la energía inicial del PKA se pierde en transferencias que no generan daño o en partículas con baja energía cinética.

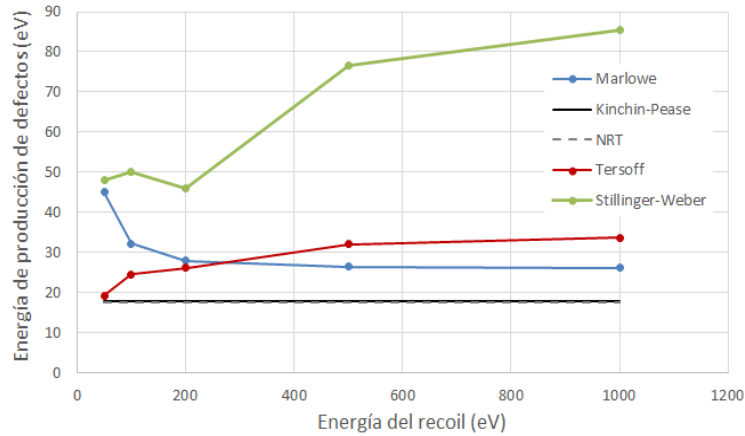


Figura 7: Coste energético en producir un defecto para simulaciones con Marlowe, simulaciones de MD con los potenciales de Tersoff y Stillinger-Weber y cálculos con los modelos de Kinchin-Pease y NRT.. Los valores de MD corresponden a los netos de los grupos de defectos formados.

En las simulaciones de MD, el coste energético aumenta con la energía del PKA y se estabiliza para energías superiores a unos 200 – 500 eV. Este comportamiento puede reflejar la existencia de diferentes mecanismos de generación de daño. Con PKAs de baja energías las colisiones múltiples pueden contribuir a generar daño reduciendo el coste energético de producir un defecto. Si la energía del PKA es superior, la producción del daño ocurrirá predominantemente mediante colisiones binarias y el peso de las colisiones múltiples será poco relevante. En esta situación, el coste energético es algo mayor y ya no depende de la energía inicial del PKA. También se observan diferencias entre ambos potenciales, con un coste energético muy superior con Stillinger-Weber.

Conclusiones

Hemos utilizado el código BCA Marlowe para analizar el daño producido por PKAs de baja energía (50 – 1000 eV), que son los PKAs predominantes en la irradiación con protones de Si. Los resultados de Marlowe muestran que solo el 30 % de la energía inicial del PKA se destina a generar defectos. Este porcentaje es todavía menor para PKAs con energía inferiores a 200 eV, pues aumenta la cantidad de energía disipada en colisiones que no generan daño o en partículas con baja energía cinética. Estos resultados sugieren que Marlowe y, por extensión, las técnicas BCA, pueden subestimar el daño producido por PKAs de baja energía.

Hemos comparado los resultados de Marlowe con aquellos obtenidos con los modelos de Kinchin-Pease y NRT para estimar la cantidad de daño y con simulaciones de MD. Marlowe produce un menor número de defectos que los modelos teóricos y que las simulaciones de MD. Calculando el coste energético que supone generar un defecto, se observa un punto de inflexión en los resultados

de MD en torno a $200 - 500 \text{ eV}$. La generación de defectos con MD es más eficiente a energías de los PKAs bajas, lo que podría indicar que las colisiones múltiples facilitan la producción de daño en estas condiciones.

6. Caracterización del dañado producido en colisiones de baja energía con técnicas MD

La dinámica molecular clásica utiliza las leyes de Newton para calcular las fuerzas existentes entre los átomos de la red y los desplazamientos a los que dan lugar. MD simula la vibración de los átomos de la red y reproduce correctamente los diferentes mecanismos físicos que pueden dar lugar a la producción de dañado, tanto colisiones binarias o múltiples como la fusión y enfriamiento local. Utiliza potenciales semi-empíricos para determinar las fuerzas interatómicas que han sido ajustados para reproducir un conjunto de propiedades físicas del material. Los resultados de MD dependen por tanto de la exactitud con la que el potencial semi-empírico describe las interacciones entre átomos. Los principales potenciales utilizados para Si son los desarrollados por Tersoff y Stillinger-Weber. MD es una técnica adecuada para simular la generación de dañado por procesos de irradiación. Proporciona una descripción más detallada que BCA de las cascadas de irradiación, pero es computacionalmente costosa. Por ese motivo, los estudios con MD se limitan a tiempos cortos (del orden de nanosegundos) y a celdas de simulación con miles de átomos. Aun así es una técnica de referencia para validar los resultados obtenidos con BCA o modelos más descriptivos.

En este TFG hemos realizado simulaciones de MD con el código paralelo *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)* para analizar el dañado producido por recoils de baja energía, desde 50 eV hasta 1 keV . De esta forma simulamos rangos de energía donde las colisiones múltiples son predominantes, y energías del orden de keV donde las colisiones son mayoritariamente binarias. Utilizaremos las simulaciones de MD para analizar por una parte la cantidad y tipo de dañado producido, pero también la evolución de las cascadas mediante el seguimiento de los átomos más energéticos.

6.1. Condiciones de las simulaciones

Hemos simulado recoils con energías de 50, 100, 200, 500 y 1000 eV con los potenciales de Tersoff y Stillinger-Weber. Las condiciones de las simulaciones (tamaño de la celda, temperatura, tipo de simulación, condiciones de finalización, etc.) deben definirse *a priori* de forma que se pueda simular correctamente las cascadas de implantación para las distintas energías y potenciales. Se debe garantizar que las cascadas están enteramente contenidas en las celdas, que no hay difusión ni interacción entre defectos y que, cuando concluya la simulación, la cascada ya haya terminado y la energía se haya disipado en la celda de simulación.

En el Anexo se incluye un archivo de entrada utilizado en las simulaciones de MD con LAMMPS. Ese archivo corresponde en concreto a la simulación de recoils de 100 eV con el potencial de Tersoff.

Las condiciones de las simulaciones utilizadas fueron las siguientes:

- **Temperatura**

La temperatura a la que se realiza la simulación debe ser baja para evitar que los defectos puedan difundir y recombinarse al interactuar entre sí. De esta forma obtenemos una imagen de la cascada de dañado tal y como se ha producido. Normalmente se considera que a temperaturas inferiores a 30 K la difusión y recombinación de defectos es despreciable. En nuestras simulaciones fijamos una temperatura inicial de 0 K , pero no se aplicó ningún baño térmico ni se reguló la temperatura durante la simulación. Hay que tener en cuenta que al finalizar

la cascada la energía cinética inicial del recoil se ha transferido a la celda lo que provocará un aumento de su temperatura. La temperatura final que alcance la celda dependerá de la energía inicial del recoil y del número de átomos de la simulación.

- **Tamaño de la celda de simulación**

La celda de simulación debe ser lo suficientemente grande como para contener enteramente las cascadas, evitando que una cascada pueda solaparse consigo misma debido a las condiciones periódicas en las 3 dimensiones. A la vez debe tenerse en cuenta que al aumentar las dimensiones de la celda y el número de átomos que contiene se incrementa notablemente el tiempo de simulación. Para tener una idea *a priori* de la extensión de las cascadas, simulamos con el código BCA SRIM 10.000 cascadas para cada una de las energías que hemos utilizado. SRIM muestra gráficamente el resultado de las cascadas y de esta forma podemos estimar el tamaño de celda adecuado para contenerlas, tal como puede verse en la siguiente imagen.

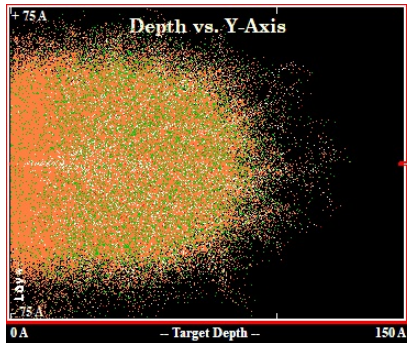


Figura 8: Simulación de 10.000 cascadas con una energía de 100 eV en una celda de 150 Å de lado con el código SRIM.

Las dimensiones de la celda son un múltiplo entero de la distancia de red del Si. Como distancia de red a 0 K utilizamos 5,432 Å para el potencial de Tersoff y 5,430 Å para el de Stillinger-Weber, pues con estos valores concretos la presión hidrostática de la celda es próxima a cero. Las dimensiones totales de la celda varían por tanto ligeramente con el potencial.

Teniendo en cuenta la energía inicial de los recoils, y las dimensiones mínimas de la celda estimadas de las simulaciones con SRIM, determinamos las dimensiones finales de la celda de simulación para que la temperatura final después de las cascadas no superara 30 K. Las dimensiones de la celda para cada energía inicial del recoil, el número de átomos simulado y la temperatura final de la celda se muestran en la tabla 1. Para cumplir los criterios anteriores, la celda de simulación para recoils de 1 keV incluye cerca de 250.000 átomos.

Energía del recoil (eV)	Tamaño de la celda 1D (Å)	Número de átomos	Temperatura (K)
50	70	15552	12,44
100	70	15552	24,87
200	85	29040	26,64
500	125	94208	20,53
1000	175	247808	15,61

Tabla 1: Dimensiones de la celda, número de átomos y temperatura final en función de la energía inicial del recoil, para las simulaciones de MD.

- **Número y energía de los recoils**

Para cada una de las energías consideradas se simularon 50 recoils diferentes para así tener una estadística relativamente buena. Aumentar el número de recoils incrementa el tiempo total de las simulaciones, por eso se decidió no simular un número mayor de recoils.

Todos los recoils se generan en el centro de la celda de simulación. El módulo de la velocidad del recoil se calcula para que su energía cinética coincida con la energía que se quiera simular. Para una energía determinada, los 50 recoils poseen todos el mismo módulo de la velocidad pero una dirección aleatoria. Esto se consigue modificando las componentes de la velocidad en cada uno de los 3 ejes.

- **Tipo de simulación**

El tipo de simulación que se realizó se denomina conjunto microcanónico o NVE, pues se mantiene constante el número de átomos (N), el volumen de la celda (V) y la energía total de la celda (E). Durante el desarrollo de la cascada puede modificarse tanto la temperatura como la presión de la celda. Con las dimensiones escogidas, tanto la temperatura como la presión hidrostática se mantuvieron próximas a cero para todas las energías de recoils y potenciales que usamos.

- **Paso temporal**

La resolución de las ecuaciones de movimiento y la actualización de las posiciones y velocidades de los átomos se realiza tras un intervalo de tiempo denominado paso temporal. El paso temporal se especifica al comienzo de la simulación. En simulaciones de irradiación existen partículas energéticas que se desplazan a gran velocidad. El paso temporal debe ser lo suficientemente corto como para poder seguir gradualmente la trayectoria de la partícula energética según se aproxima a los átomos de la red. Si el paso temporal es demasiado grande podría darse la situación de que dos átomos se encontraran muy próximos lo que daría lugar a fuerzas repulsivas muy elevadas. Por otro lado, pasos temporales muy cortos aumentan considerablemente el tiempo de simulación.

En nuestras simulaciones fijamos inicialmente un paso temporal reducido de $0,01 fs$, pues al principio el recoil posee una gran energía cinética. Sin embargo, el paso temporal se ajusta automáticamente durante la simulación aumentando su valor según se va reduciendo la velocidad de las partículas energéticas. El criterio escogido es asegurar que la partícula más energética en cada momento tarde al menos 100 pasos temporales en recorrer un cuarto de la distancia de red.

- **Finalización de la simulación**

La simulación de una cascada de irradiación debe terminar cuando no exista ninguna partícula lo suficientemente energética como para producir más colisiones y más dañado. En este momento se dice que la celda se ha termalizado, y la energía depositada con el recoil inicial se ha distribuido dando lugar a defectos (con energía potencial) y a un aumento de la temperatura de la celda.

Nuestras simulaciones se realizan en bucles de 1000 pasos temporales y se detienen cuando no hay ningún átomo con una energía cinética superior a $0,1 eV$. Para ello, cada 1000 pasos de simulación se analiza la energía cinética de todos los átomos, se identifica al más energético y se compara su energía cinética con el valor umbral. Si se supera ese umbral se vuelven a

simular otros 1000 pasos. Solo cuando la energía cinética máxima es inferior al umbral se detiene la simulación. Para escoger este umbral de energía se debe tener en cuenta que cuanto más bajo sea más aumentará la duración de las simulaciones. En simulaciones de control comprobamos que al detener la simulación con el criterio de $0,1 \text{ eV}$, las variables termodinámicas como la temperatura, presión, energía total, etc. ya habían alcanzado valores estacionarios.

■ Realización de las simulaciones

Las simulaciones se realizaron en el cluster Beta del grupo de Investigación *Multiscale Materials Modeling* (MMM) [51] de la Universidad de Valladolid, utilizando el código MD LAMMPS. El acceso al cluster para preparar los archivos de entrada, ejecutar las simulaciones y analizar los resultados se realizó de forma remota. Debido al gran número de simulaciones que llevamos a cabo y la gran cantidad de archivos de resultados generados utilizamos scripts en Linux para preparar y gestionar las simulaciones. También se usaron varios programas desarrollados en C para generar los recoils o procesar los resultados de las simulaciones.

En primer lugar utilizamos un programa desarrollado en C para generar 50 recoils para cada energía simulada, todos con el mismo módulo de velocidad pero con direcciones diferentes producidas aleatoriamente. Los recoils se guardaban en un archivo de texto, cada uno con una etiqueta diferente y con las tres componentes de la velocidad calculadas. Utilizando LAMMPS generamos una red de Si a 0 K con las dimensiones adecuadas para cada energía del recoil y potencial. Esta red será el punto de partida para simular los recoils, pues asignaremos a un átomo central de la red las velocidades calculadas para cada recoil. Mediante el uso de un script se crearon 50 carpetas distintas, cada una con los archivos necesarios para lanzar las simulaciones. En cada carpeta, el script creaba el archivo de entrada para esa simulación, que era diferente de una carpeta a otra. Cada uno de estos archivos accedía a un recoil en concreto de la lista de 50 recoils que generamos anteriormente.

Desarrollamos otro script para recorrer una a una todas las carpetas e ir lanzando las simulaciones. Para ello, utilizamos un sistema de colas, de manera que las simulaciones quedaban a la espera hasta que existiera un nodo libre del cluster donde ejecutarse. Finalizadas todas las simulaciones de una energía y potencial concreto, otro script recorría todas las carpetas y copiaba a otra carpeta los archivos de resultados para su posterior análisis.

Durante la simulación se generan diferentes archivos de salida. En primer lugar, las principales variables termodinámicas se imprimen conjuntamente cada 1000 pasos en un archivo que denominamos “*globals.txt*”. Este archivo incluye el paso de la simulación, el paso temporal usado en ese instante, el tiempo, la temperatura, la energía potencial, la energía cinética, la energía total, la presión, y la energía cinética de la partícula más energética.

La posición de todos los átomos se almacena y promedia cada 1000 pasos temporales. De esta forma se elimina el efecto de las vibraciones térmicas de los átomos (aunque no son muy relevantes a temperaturas menores de 30 K) y se obtiene su posición promedio. Las posiciones se almacenan cada 1000 pasos en archivos denominados *avg.step* donde *step* indica el paso temporal en que se han creado. Estos archivos son fundamentales para analizar las posiciones de los átomos tras simular la cascada y poder identificar los defectos que se han formado.

Para poder estudiar la evolución de las cascadas y las energías de las partículas implicadas creamos otro archivo al que denominamos *enAtom.step*. En este archivo se almacena cada 100 pasos la energía cinética instantánea y la energía potencial promediada de cada partícula. La energía potencial se promedia cada 100 pasos pues su valor depende de la posición concreta de la partícula, y de esta forma se evitan las fluctuaciones debido a las vibraciones térmicas.

6.2. Características del dañado producido

La principal consecuencia de la irradiación en Si es la producción de defectos, responsables en gran medida de la degradación de las prestaciones de los dispositivos irradiados. El efecto que los defectos puedan tener en el funcionamiento de los dispositivos dependerá de la cantidad de defectos, su distribución y del tipo de defectos generados. Los defectos elementales son átomos que han sido desplazados de las posiciones de red (átomos desplazados, ADs) y posiciones de red que están vacías (retículos vacíos, RVs).

Las simulaciones de MD proporcionan la posición promediada de todos los átomos de la celda una vez que ha finalizado la cascada de irradiación. Para identificar los defectos elementales se pueden seguir varios criterios. En nuestro caso comparamos la red perfecta inicial (sin irradiar) con la red después de la cascada de irradiación y de esta forma identificamos los ADs y RVs. Si un átomo se encuentra cerca de una posición de red a una distancia inferior a 0,125 veces la distancia de red del Si se considera que ese átomo ocupa esa posición de red [52]. Tras recorrer todos los átomos y todas las posiciones de red, aquellos átomos a los que no se les ha asignado ninguna posición de red se consideran ADs, y todas las posiciones de red vacías se consideran RVs. Esto se realiza mediante un programa escrito en C que recorre de forma iterativa todas las simulaciones para cada energía del recoil y potencial simulados, identificando los defectos producidos en cada una de ellas. Este programa ya existía previamente, pero tuvimos que adaptarlo a las condiciones particulares de nuestras simulaciones.

6.2.1. Átomos desplazados (ADs) y retículos vacíos (RVs)

En nuestras simulaciones asignamos una energía cinética inicial a uno de los átomos de la celda, pero no simulamos la implantación o irradiación con ningún átomo externo a la celda. La generación de dañado tiene lugar mediante la creación de pares de Frenkel, formados por un átomo desplazado y un retículo vacío. Como no estamos introduciendo elementos externos en nuestras simulaciones, y los átomos no abandonan la celda al haber condiciones periódicas, el número de ADs y RVs será siempre el mismo.

En la figura 9 mostramos el número de ADs obtenido para cada energía del recoil y cada potencial. El número de ADs es el promedio de las 50 simulaciones realizadas en cada energía, y la desviación standard se muestra en la gráfica 9. Con recoils de baja energía (50 eV) se generan muy pocos defectos (unos 3 – 4 defectos) y existe una gran dispersión de los datos, pero esta dispersión se reduce para energías mayores. Como es de esperar, el número de defectos aumenta con la energía del recoil. Este aumento es casi lineal, aunque los datos se ajustan mejor a una curva polinómica de orden 2 (incluida en la figura). El potencial de Stillinger-Weber proporciona un número de defectos algo mayor (~ 15 %) para bajas energías (50 – 100 eV), pero los valores son muy similares en ambos potenciales para energías mayores.

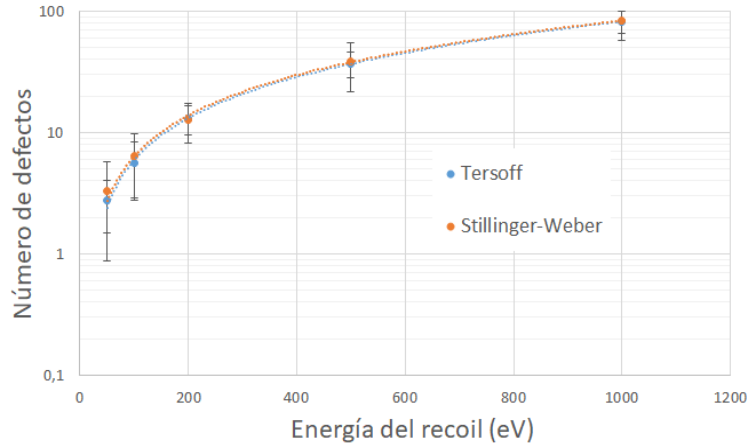


Figura 9: Número de átomos desplazados (ADs) para cada energía y potencial.

6.2.2. Agrupación de defectos

Durante los procesos de generación de daño es habitual que los defectos elementales (ADs y RVs) se encuentren próximos entre sí, lo que puede afectar a su estabilidad y evolución. En un recocido térmico los defectos elementales interaccionan fundamentalmente con aquellos defectos que tengan en su proximidad, con lo que una fracción significativa de ellos puede recombinarse (un AD ocupa un RV). Si el recocido es intenso solo sobrevivirán aquellos defectos que no tengan con quien recombinarse en sus alrededores. En el caso de que varios defectos de un mismo tipo (ADs o RVs) se encuentren próximos se pueden formar *clusters* o grupos de defectos. Los *clusters* de defectos en general no difunden (solo los más pequeños pueden difundir) y son mucho más estables que los defectos aislados.

El programa en C que utilizamos para identificar los ADs y RVs tras las cascadas también permite formar grupos de defectos. En nuestro caso seguimos un criterio de vecindad: aquellos defectos elementales (ADs o RVs) que se encuentren a una distancia menor que un umbral se consideran vecinos y forman parte del mismo grupo. Como distancia de corte utilizamos el primer mínimo de la función de distribución radial del Si amorfo a 300 K , que equivale a $0,285\text{ nm}$ [18]. Una vez formado los grupos estos se pueden caracterizar por su tamaño y su neto. El tamaño es el número total de defectos elementales que contiene ($ADs + RVs$), mientras que el neto es la diferencia entre ambos tipos de defectos ($ADs - RVs$) y puede ser por tanto positivo, negativo o nulo. El análisis de los grupos formados nos permitirá identificar posibles defectos puntuales (intersticiales o vacantes), *clusters* de defectos o incluso regiones amorfas.

En la siguiente figura se muestra el número promedio de grupos formados (Figura 10a) y el tamaño promedio de los grupos (Figura 10b) para cada energía y potencial simulados. Siguiendo la tendencia del número de ADs , el número y tamaño de los grupos se incrementa con la energía del recoil. Sin embargo existen importantes diferencias entre los dos potenciales considerados. Con el potencial de SW se forma un menor número de grupos pero de mayor tamaño que los obtenidos con Tersoff. Una de las posibles causas pueden ser las diferentes temperaturas de fusión que proporcionan ambos potenciales para el Si y el efecto que puede tener en los mecanismos de fusión local conocidos como *thermal spike*. La temperatura de fusión obtenida con SW (1653 K) es similar a la experimental (1685 K) mientras que con Tersoff se obtiene un valor muy superior (2431 K) [12]. En las colisiones de baja energía donde no se generan pares de Frenkel la energía se deposita en la red

aumentando la temperatura local. Si la temperatura en esa zona supera la temperatura de fusión y se mantiene elevada durante un tiempo suficiente, la región puede llegar a fundirse. Al enfriarse posteriormente da lugar a la formación de regiones amorfas [15]. SW presenta una temperatura de fusión bastante menor que Tersoff lo que puede favorecer el proceso de fusión local y enfriamiento. Como consecuencia se formarán regiones dañadas de mayor tamaño que las obtenidas con Tersoff.

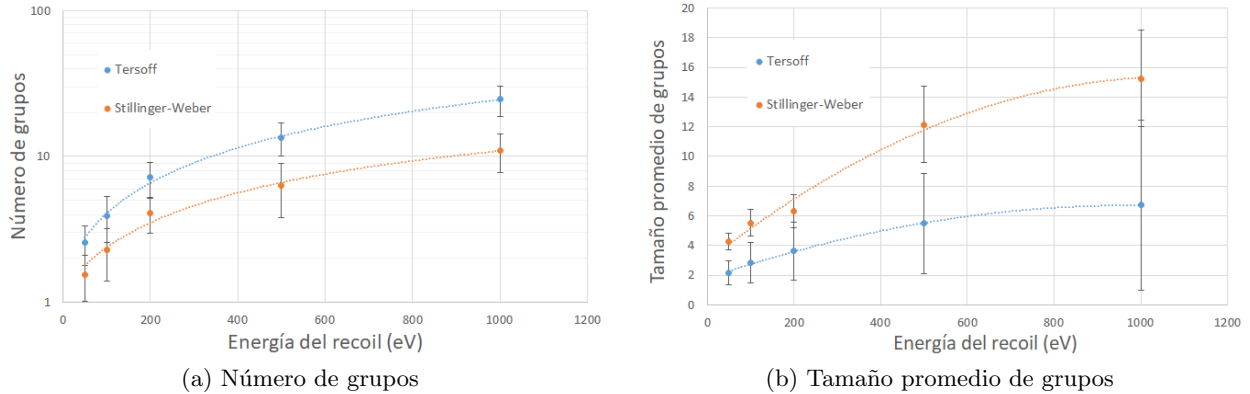


Figura 10: Número y tamaño promedio de grupos por recoil, para cada energía y potencial.

Por otra parte, las diferencias en las formulaciones de Tersoff y SW también afectan a la estabilidad de los defectos formados. En el caso del intersticial de Si, es conocido que Tersoff favorece la configuración tetraédrica del intersticial (1 AD) mientras que con SW la configuración más estable es la extendida (4 ADs, 3 RVs) [17]. En este sentido, la existencia de configuraciones extendidas de intersticiales de Si con SW daría lugar a un aumento de los grupos con tamaño 7.

Una forma habitual de representar los grupos de defectos es clasificarlos en defectos elementales (ADs o RVs) y en clusters de pequeño y de gran tamaño. Aunque la división es arbitraria, nosotros hemos considerado clusters pequeños a aquellos con un número de defectos entre 2 y 9, y clusters grandes a los que poseen 10 o más defectos. De esta forma, las diferentes configuraciones del intersticial y la vacante se englobarían dentro de los clusters pequeños.

En la siguiente figura 11 se muestra en un diagrama de barras el número promedio de grupos formados para cada energía y potencial, clasificados según su tamaño, siguiendo el criterio anterior. Con el potencial de Tersoff los grupos más abundantes son los de tamaño 1 (1 AD o 1 RV) y el número de grupos se reduce al aumentar su tamaño. Como dijimos anteriormente, la configuración tetraédrica del intersticial (1 AD) es la más estable con Tersoff, lo que puede contribuir a que haya muchos grupos con tamaño 1. Con SW, sin embargo, los grupos de tamaño 2 – 9 son los predominantes, lo que puede ser debido a que la configuración más estable del intersticial (extendida) tiene tamaño 7. En algunas ocasiones no se forma ningún defecto para las energías de recoils más bajas (50 – 100 eV) con SW. En estos casos, el recoil energético produce un desplazamiento de los átomos vecinos pero durante el mismo desarrollo de la cascada estos átomos vuelven a colocarse en su posición de red. Este efecto recuerda a una onda de choque causada por la energía depositada, que mueve ligeramente los átomos pero no lo suficiente como para desplazarlos permanentemente.

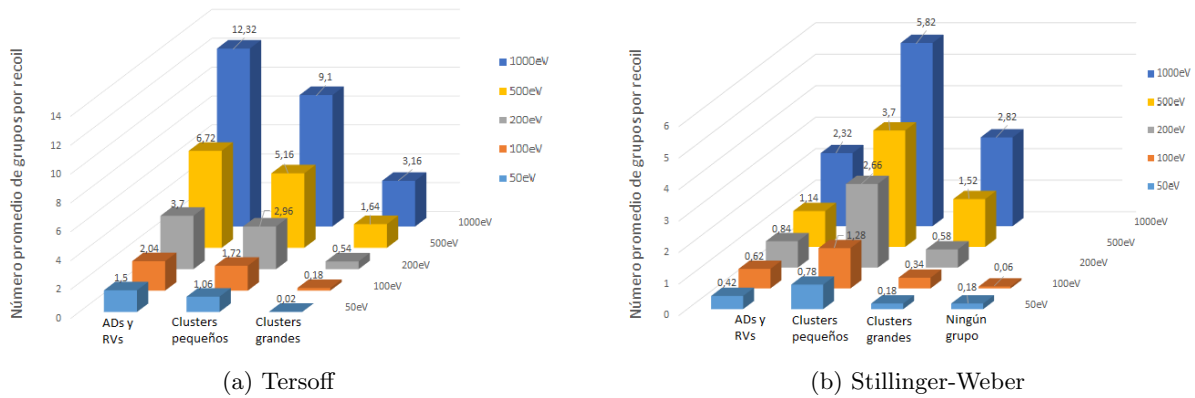


Figura 11: Número promedio de grupos con tamaños unidad, pequeños y grandes por recoil para cada energía y potencial.

6.2.3. Clasificación de los grupos según su neto

El neto de un grupo de defectos (la diferencia entre el número de ADs y RVs) junto con el tamaño del grupo, puede ayudar a identificar si un grupo corresponde a defectos de intersticiales, vacantes, regiones amorfas, etc. Cada tipo de defecto desempeña un papel en los diferentes fenómenos que degradan las prestaciones de los dispositivos. Por ejemplo, el proceso de eliminación de aceptores en Si tipo p irradiado con neutrones/protones se debe a la interacción de intersticiales de Si móviles con los átomos de B. Los defectos de intersticiales que pueden difundir e interaccionar con el B son el mono-intersticial (I), el di-intersticial (I_2) y el tri-intersticial (I_3) [5]. Para simular y analizar este proceso es importante por tanto poder cuantificar los intersticiales móviles que se generan en las cascadas de irradiación.

Hemos clasificado los grupos obtenidos en las diferentes simulaciones en función del neto del grupo. En la figura 12 se muestra el número promedio de grupos por recoil en función del neto para las distintas energías de recoils y potenciales.

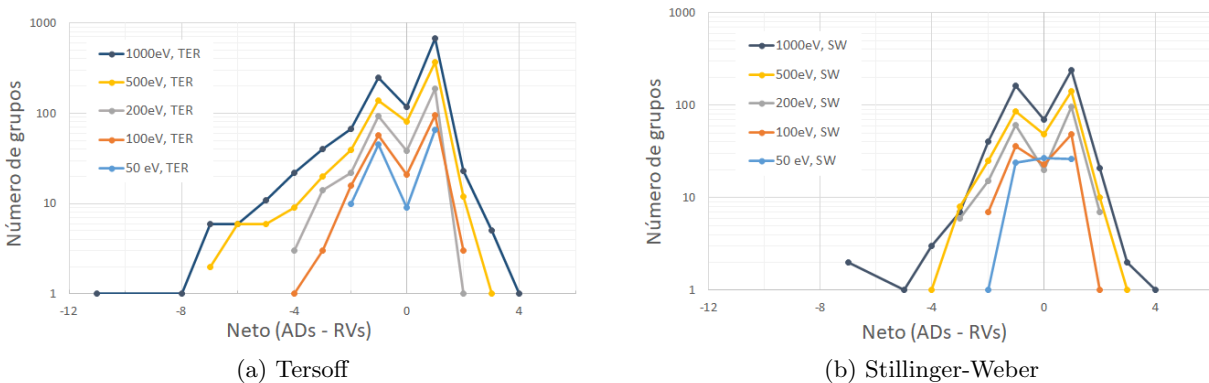


Figura 12: Número promedio de grupos según neto, para cada energía y potencial.

La distribución de grupos es asimétrica en función del neto. Mientras que los grupos con netos positivos (predominio de ADs) alcanzan un valor máximo de +4, los grupos con netos negativos

(predominio de RVs) llegan hasta -11. En los dos potenciales, los grupos más numerosos son los de neto +1 (que engloba las diferentes configuraciones de intersticiales), seguidos de los de neto -1 (que incluye las vacantes) y a continuación los de neto 0. Las regiones con neto 0 pueden ser pares IV (tamaño 4) o bien regiones desordenadas o amorfas sin exceso o defecto de átomos. Por otra parte los grupos con neto +2 y +3 son poco numerosos comparados con los grupos de neto +1. Esto quiere decir que los defectos di- y tri-intersticiales, que estarían incluidos como grupos con estos netos, apenas se forman durante el desarrollo de las cascadas.

En la siguiente figura 13 hemos representado el tamaño promedio por recoil de los grupos en función de su neto. Podemos ver que los grupos con netos más negativos son de un gran tamaño (superando los 100 defectos en las simulaciones de 1 keV). Teniendo en cuenta su gran tamaño, estos grupos pueden representar regiones amorfas con déficit de átomos (predominio de RVs) [52]. Las regiones amorfas con un neto en vacantes pueden jugar un papel importante en la reducción de las prestaciones de los detectores de radiación. Algunos estudios sugieren que estas regiones actúan como trampas para electrones, causando el efecto conocido como *inversión de tipo* en dispositivos tipo n: debido a la irradiación, el sustrato de Si tipo n acumula carga espacial negativa y se comporta como Si tipo p [53]. Si nos fijamos en el tamaño medio de los grupos con neto +1 podemos observar también las diferencias de ambos potenciales para describir el mono-intersticial. Con Tersoff los grupos con +1 tienen un tamaño pequeño pues predomina la configuración tetraédrica del intersticial (1 AD). Con SW la configuración menos energética es la extendida (4 ADs, 3 RVs) lo que hace aumentar el tamaño medio de los grupos con neto +1.

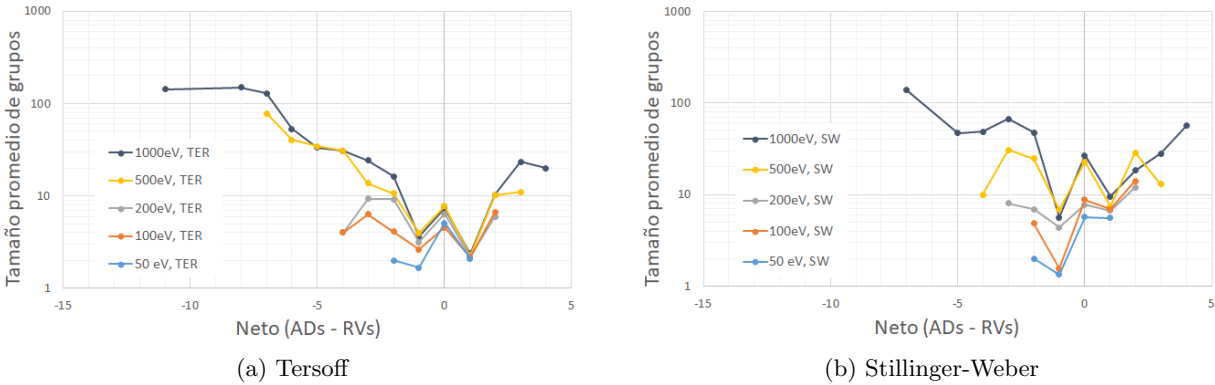


Figura 13: Tamaño promedio de grupos según neto, para cada energía y potencial.

6.2.4. Conclusiones

Hemos utilizado simulaciones de MD para analizar las características del dañado generado por irradiación con diferentes energías de recoil y para dos potenciales distintos. Hemos formado grupos de defectos agrupando los defectos elementales que están próximos y los hemos caracterizado mediante su tamaño y su número neto de defectos.

La cantidad de defectos formados aumenta de forma superlineal con la energía del recoil, y es ligeramente superior con el potencial de SW. Con el potencial de SW se obtiene un menor número de grupos pero de mayor tamaño que los proporcionados por el potencial de Tersoff. Hemos clasificado los grupos formados como defectos elementales y clusters pequeños y grandes. Mientras que en

Tersoff los defectos elementales son los más abundantes, en SW predominan los clusters pequeños (2-9 defectos). Esto podría deberse a la menor temperatura de fusión del potencial de SW y a la formación de regiones amorfas por fusión y enfriamiento. También puede reflejar el hecho de que con Tersoff la configuración tetraédrica del intersticial (1 AD) es la más estable, mientras que con SW lo es la configuración extendida con un tamaño de 7 (4 ADs, 3 RVs).

El análisis del número y tamaño de los grupos formados según su neto muestra que los grupos más abundantes son los de neto +1, -1 y 0, que pueden corresponder con defectos de intersticiales, vacantes y pares IV o regiones amorfas. Observamos también que se forman grupos de gran tamaño y con netos negativos altos. Estos grupos podrán ser regiones amorfas que incluyen vacantes a las que se les ha atribuido un papel como trampas de electrones en detectores de radiación. Por otra parte, el número de grupos con netos +2 y +3 es reducido, lo que implica que durante las cascadas de irradiación apenas se forman los defectos di- y tri-intersticiales.

6.3. Análisis de las transferencias de energía y del tipo de colisiones

Las simulaciones de MD pueden ayudarnos a entender mejor el proceso de generación de dañado durante una cascada de irradiación. En nuestras simulaciones el recoil inicial energético colisiona con otros átomos de la red y les transfiere energía. Los átomos con suficiente energía cinética pueden causar otras colisiones y generar a su vez más recoils. Cuando estos átomos han perdido gran parte de su energía cinética se detienen y pueden quedar como defectos de la red (formando ADs), por lo que poseen una energía potencial.

Si identificamos aquellos átomos que son energéticos (por tener una energía cinética o potencial elevada) y seguimos su evolución podemos identificar qué tipos de colisiones o transferencias de energía están ocurriendo. Etiquetamos como átomos energéticos o hot particles (HPs) a aquellos átomos que posean una energía cinética superior a 1 eV . Este valor (en cierto modo, arbitrario) está muy por debajo de la energía umbral de desplazamiento (típicamente 15 eV) necesaria para generar un par de Frenkel. De esta forma podemos monitorizar tanto los átomos que pueden generar desplazamientos como aquellos que transfieren la energía sin producir dañado. La energía cinética por átomo que obtenemos en nuestras simulaciones es la energía cinética traslacional, calculada a partir de la velocidad del átomo. Siguiendo el criterio usado en otros estudios, identificamos también como HPs aquellos átomos con una energía potencial superior en $0,2\text{ eV}$ a la energía cohesiva del Si a 0 K [18, 54]. La energía cohesiva es la energía potencial que posee cada átomo de una red perfecta (sin defectos) de Si a 0 K . Su valor depende del potencial utilizado, y en nuestras simulaciones equivale a $-4,630\text{ eV}$ con Tersoff y $-4,337\text{ eV}$ con SW.

En la figura 14 mostramos el número promedio por recoil de las HPs identificadas con el criterio de la energía cinética en función de los pasos de la simulación, para cada una de las energías de los recoils y para los dos potenciales usados. Durante la cascada, según se van produciendo colisiones, la energía cinética inicial del recoil se reparte entre un número cada vez mayor de átomos. Se reduce por tanto la energía cinética máxima pero se incrementa el número de átomos con una energía cinética superior a 1 eV , lo que se refleja en el rápido aumento del número de HPs en la figura. Los recoils van perdiendo energía según viajan por el material y debido a las colisiones, y llega un momento donde esas colisiones ya no generan más partículas energéticas. Como podemos ver en las figuras, el número de HPs se reduce hasta ser nulo.

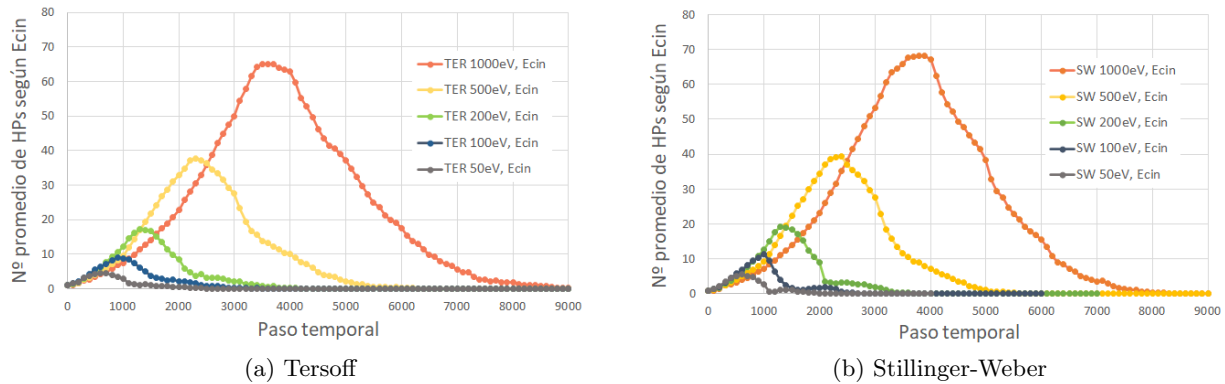


Figura 14: Número de HPs promedio según el criterio de energía cinética para cada potencial.

La velocidad con que aumenta el número de HPs (la pendiente de subida de las gráficas) puede indicar el tipo de colisiones que se están produciendo. Si las colisiones son binarias, en cada colisión una HP puede genera otra más. Sin embargo, en una colisión múltiple una HP puede transferir energía a varias partículas dando lugar a la formación de varias HPs. En la anterior figura vemos cómo al principio de las simulaciones el número de HPs aumenta rápidamente para los recoils de $50 - 200 \text{ eV}$ en ambos potenciales, siguiendo una pendiente similar. Con energías de $500 - 1000 \text{ eV}$ la pendiente inicial de la curva es menor y se incrementa al acercarse el final de la cascada cuando el número de HPs es máximo. Estos datos parecen indicar que las colisiones múltiples tienen un peso importante en recoils con energía menor o igual que 200 eV . Con energías superiores ($500 - 1000 \text{ eV}$), las colisiones son inicialmente binarias. Solo al final de la cascada (cuando los recoils tienen menos energía) se producen colisiones múltiples que aumentan la pendiente con que crece el número de HPs. En el capítulo 5 analizamos el coste energético de producir un defecto con BCA y MD y vimos en el rango de $200 - 500 \text{ eV}$ un cambio de tendencia en los resultados de MD, que podría reflejar la transición entre colisiones múltiples y binarias.

En la figura 15 hemos representado conjuntamente el número promedio de HPs por recoil que hemos identificado siguiendo los criterios de energía cinética y energía potencial.

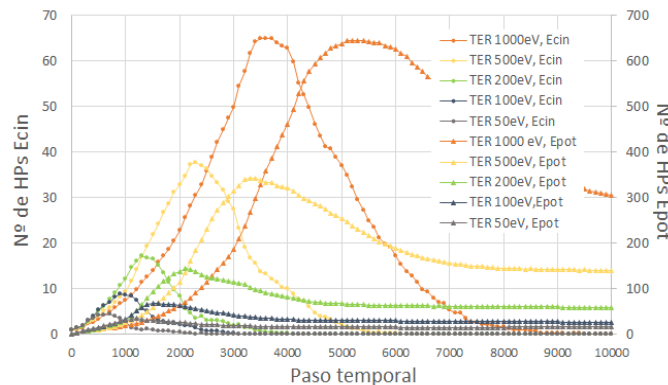


Figura 15: Número promedio de *HPs* según los criterios de energía cinética y energía potencial para el potencial de Tersoff.

Vemos que existe un desfase entre las curvas de HPs por energía cinética y potencial: el número

máximo de HPs por energía potencial ocurre más tarde que el máximo por energía cinética. Esto refleja los mecanismos de transferencia de energía. Al recibir un impacto, el átomo adquiere una gran energía cinética. Esta se transforma en parte en energía potencial cuando se aleja de su posición de red, donde su energía potencial era mínima (el valor de la energía cohesiva). Al finalizar la cascada las partículas han perdido toda su energía cinética y se paran, con lo que el número de HPs con energía cinética alta se reduce a cero. Sin embargo, el número de HPs con el criterio de energía potencial se estabiliza en un valor no nulo. Esto muestra la existencia de defectos, es decir, átomos desplazados y retículos vacíos, con una energía potencial superior a la de los átomos de la red.

Analizando los resultados proporcionados por las simulaciones de MD podemos obtener información de los procesos que dan lugar a la formación de daño durante las cascadas de irradiación. En particular, hemos determinado la energía cinética máxima que han llegado a tener durante la cascada aquellos átomos que terminan siendo ADs. Eso implica, en primer lugar, identificar los átomos desplazados en cada cascada, y posteriormente analizar la energía cinética que han tenido para determina su valor máximo. De esta manera podemos estimar el peso que tiene en la producción de defectos las colisiones de baja o alta energía.

En la figura 16 mostramos un histograma que representa el porcentaje del total de ADs generados en promedio en cada recoil cuya energía cinética máxima se encuentra en cada uno de los rangos de energía (de un tamaño de 10 eV). Los resultados corresponden a todas las energías de recoils simulados y para ambos potenciales. La mayoría de los ADs generados han tenido energías cinéticas máximas en el rango de 0 a 10 eV . Esto implica que la energía transferida en esas colisiones es ligeramente superior a la energía umbral de desplazamiento (típicamente 15 eV). A su vez, esos átomos con energías cinéticas inferiores a 10 eV no tienen energía suficiente para desplazar otros átomos y generar más defectos. El porcentaje de ADs con energías cinéticas máximas inferiores a 10 eV aumenta con la energía inicial del recoil. Esto podría deberse a que en recoils de baja energía hay pocos defectos y los propios recoils iniciales representan una fracción significativa de los ADs. Por ejemplo, en las simulaciones con Tersoff los recoils iniciales de 50 eV constituyen cerca del 15% de todos los ADs, porcentaje que se reduce para energías de recoils más altas.

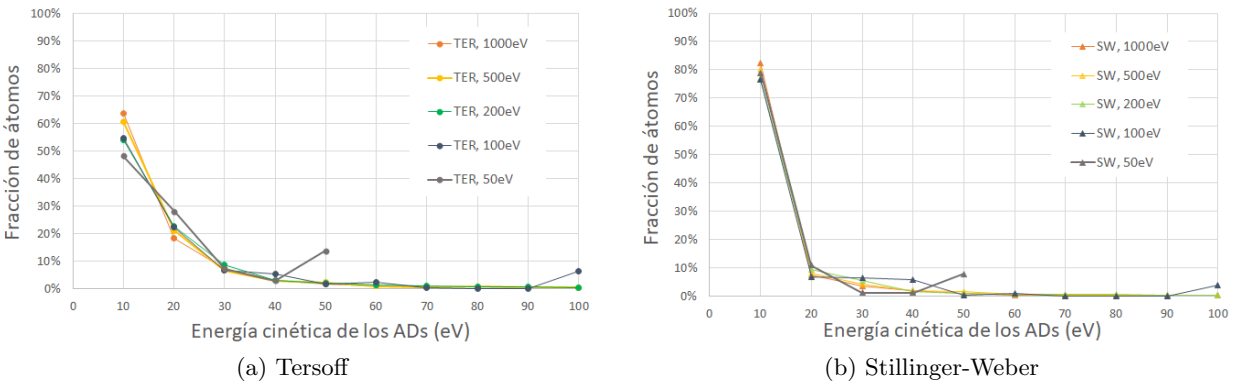


Figura 16: Histograma de la energía cinética máxima de los ADs para cada potencial, empleando un rango de energías de 10 eV .

Se aprecian también diferencias entre los resultados obtenidos con los dos potenciales. El porcentaje de ADs con energías cinéticas máximas inferiores a 10 eV es significativamente superior en SW (cerca de un 80% frente al $50 - 60\%$ obtenido con Tersoff). Esto puede reflejar el mayor peso

de la generación de dañado mediante la fusión local de la red con SW que con Tersoff, como ya indicamos anteriormente. En la figura 17 mostramos el histograma de energía cinética máxima de los ADs para los recoils de 50, 100 y 200 eV utilizando esta vez rangos de 1 eV. Con el potencial de Tersoff la mayoría de los ADs han tenido una energía cinética máxima entre 1 – 3 eV, además de los recoils iniciales que acaban siendo ADs. Con SW este porcentaje es todavía mayor, pues los la mayoría de ADs han tenido una energía cinética máxima de 1 eV. Con esto se evidencia que una fracción significativa del dañado en recoils de baja energía es consecuencia de colisiones donde la energía transferida es solo ligeramente superior a la energía umbral de desplazamiento.

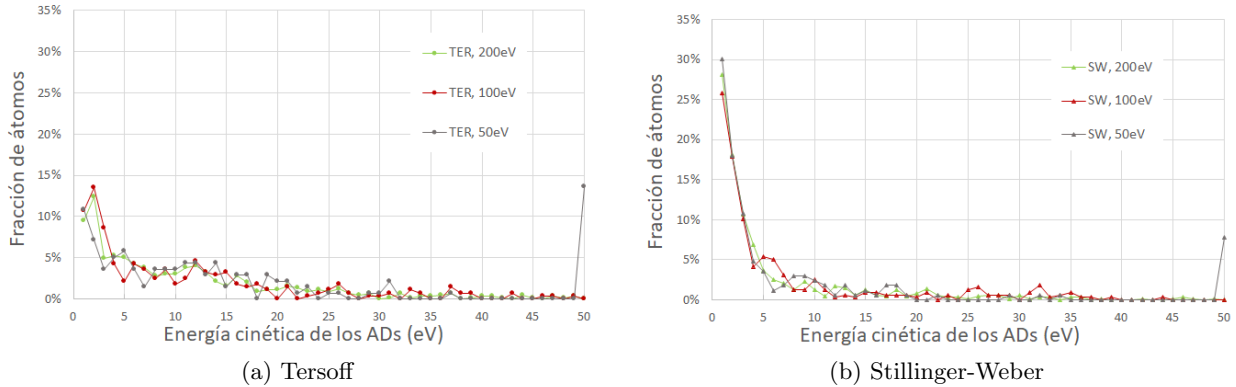


Figura 17: Histograma de la energía cinética máxima de los ADs para recoils de 50, 100 y 200 eV y para cada potencial, empleando un rango de energías de 1 eV.

Conclusiones

Analizando las partículas energéticas (con energía cinética o potencial elevada) que se forman durante la simulación hemos obtenido información sobre el desarrollo de las cascadas. El rápido aumento del número de partículas con energía cinética elevada en recoils de 50 – 200 eV es indicativo de un número alto de colisiones múltiples, donde el átomo incidente genera simultáneamente varios átomos energéticos. En recoils de mayor energía (500 – 1000 eV) el aumento del número de partículas es inicialmente menor, debido seguramente al predominio de las colisiones binarias. Solo cerca del final de las cascadas el incremento es mayor, pues las colisiones múltiples son más frecuentes. Hemos observado un desfase entre el número máximo de partículas con elevada energía cinética y potencial. Esto refleja el tiempo necesario para la transferencia de energía y el desplazamiento de un átomo de su posición de red, incrementando así su energía potencial.

Nuestros resultados muestran que alrededor del 60 – 80% de los ADs generados tuvieron una energía cinética máxima inferior a 10 eV durante el desarrollo de la cascada. Estos datos indican que los defectos se generan mayoritariamente en colisiones donde la energía transferida al átomo objetivo es solo ligeramente superior a la necesaria para desplazar el átomo y generar un par de Frenkel. En recoils de baja energía (50 – 200 eV) la mayoría de los ADs han tenido energías cinéticas máxima muy bajas, entre 1 – 3 eV.

7. Conclusiones y líneas futuras

En este TFG hemos combinado diferentes técnicas de simulación atomísticas dentro de un entorno multi-escala para estudiar el dañado producido por la irradiación de protones de alta energía en Si. Hemos identificado los rangos de energía relevantes de la irradiación con protones en Si, analizado la evolución de las cascadas de irradiación y caracterizando el dañado resultante.

Hemos obtenido la distribución en energía de los recoils iniciales o PKA resultantes al irradiar Si con protones energéticos (70–200 MeV), empleando para ello el código Spectra-PKA. Más del 90% de los PKAs producidos son de baja energía (inferiores a 1 keV), y cerca de un 50% poseen energías por debajo de 100 eV. Este resultado es muy diferente a lo obtenido con neutrones, donde la fracción de PKAs de menos de 1 keV es apenas del 5%. Estas diferencias pueden provocar que los procedimientos y técnicas de simulación usadas para neutrones no sean aplicables a la irradiación con protones.

Utilizado el código Marlowe, basado en la aproximación de colisiones binarias o BCA, hemos analizado la generación de dañado con los PKAs predominantes en la irradiación con protones (energías entre 50 eV y 1 keV). Solo alrededor del 30% de la energía inicial del PKA se utiliza para producir defectos, lo que implica que una gran parte de la energía se disipa en la red. Si la energía inicial del PKA es inferior a 200 eV este porcentaje se reduce todavía más, por lo que los códigos BCA pueden subestimar el dañado producido por PKAs de baja energía, y por tanto en irradiaciones con protones. Esta es una de las limitaciones conocidas de la técnica BCA, pues no considera las colisiones múltiples entre la partícula incidente y los átomos de la red que tienen lugar en interacciones de baja energía.

La técnica de dinámica molecular clásica nos ha permitido analizar el desarrollo de las cascadas de irradiación, y caracterizar la cantidad y tipología de los defectos formados. Este estudio se ha realizado para los dos potenciales más utilizados para describir Si (Tersoff y Stillinger-Weber). Hemos monitorizado el número de partículas con una energía cinética o potencial elevada durante la cascada. Con recoils de baja energía este número aumenta rápidamente en las fases iniciales de la cascada por el efecto de las colisiones múltiples. Sin embargo, con recoils de mayor energía este aumento se observa más tarde, cuando las partículas han perdido gran parte de la energía y comienza a haber interacciones múltiples.

Nuestros resultados muestran que un 50 – 80% de los átomos desplazados al finalizar la cascada han tenido energía cinéticas bajas (< 10 eV) durante el desarrollo de la misma. Esto indica que un número significativo del dañado se produce en colisiones donde se transfiere una energía ligeramente superior a la energía umbral de desplazamiento. Hemos analizado el dañado resultante tras las cascadas mediante la formación de grupos de defectos elementales (átomos desplazados, ADs y retículos vacíos, RVs) próximos. Caracterizamos los grupos por su tamaño (ADs + RVs) y su neto (ADs – RVs). Los grupos más numerosos tienen netos +1, -1 y 0, que incluyen entre otros las diferentes configuraciones de intersticiales, vacantes y pequeñas regiones dañadas o amorfas, respectivamente. Con recoils de alta energía se forman grupos con un tamaño elevado que en general poseen un déficit de átomos (son ricos en vacantes). Observamos también diferencias en los resultados obtenidos con ambos potenciales. Con el potencial de Stillinger-Weber se forman menos grupos de defectos, pero de mayor tamaño. Esto puede ser consecuencia de la menor temperatura de fusión que proporciona este potencial respecto al potencial de Tersoff, lo que favorece el fenómeno de fusión local y enfriamiento (*thermal spike*) que da lugar a pequeñas regiones amorfas.

En lo que me compete de manera individual, he aprendido además a trabajar en conexión a una máquina remota, lanzando y monitorizando las simulaciones mediante la elaboración de *scripts* y otros archivos necesarios. He profundizado y mejorado mis competencias en distintos lenguajes de programación, tales como *C* o *bash* mediante la modificación y ajuste de programas ya elaborados. He aprendido a manejar programas de simulaciones ejecutados en paralelo como LAMMPS, cuyo extenso manual [55] me sirvió de gran ayuda a la hora de elaborar y modificar el código de las simulaciones. También he aprendido a consultar y manejar artículos de bibliografía científica, y he aumentado mis conocimientos sobre la Física del Estado Sólido y la formación de defectos en Si.

7.1. Líneas futuras

La continuación de este trabajo sería desarrollar un modelo BCA mejorado que pudiera reproducir correctamente el daño generado por los recoils de baja energía que son característicos de la irradiación con protones. Para ello es necesario profundizar en la caracterización del daño producido por recoils de baja energía mediante la técnica de dinámica molecular, y comparar esos resultados con los obtenidos por BCA. De esta forma se podría adaptar el código BCA para que, en condiciones de recoils de baja energía, pudiera proporcionar una cantidad y distribución de daño similar a la que se obtiene con MD.

Este modelo BCA mejorado se podría utilizar para ampliar el estudio de la eliminación de aceptores en Si tipo p al caso de irradiación con protones. Al igual que se hizo con la irradiación con neutrones, el modelo BCA proporcionaría las coordenadas de los defectos generados, y el código Monte Carlo cinético simularía la interacción entre defectos y dopantes durante un recocido y, por consiguiente, la eliminación de aceptores.

Anexo

Archivo de entrada con LAMMPS

A continuación, presentamos el archivo de entrada utilizado en las simulaciones de MD con LAMMPS para el potencial de Tersoff y para una energía de los recoils de 100 eV.

La variable \$2 representa el número del recoil en cada simulación. En nuestro caso, simulamos 50 recoils para cada una de las energías, por lo que esta variable recorre cada uno de los recoils, desde el número 1 hasta el 50, para cada energía.

Listing 1: Archivo de entrada en la simulación de MD con Tersoff para una energía de 100 eV.

```
1 # Recoil de Si en Si. Potencial ZBL-Tersoff para Si.
2 # Caja de 65.16 x 69.11 x 69.11 A.
3 # Condiciones periódicas en XYZ.
4 # Recoil de Si de 100 eV, con velocidades aleatorias.
5
6
7 processors          2 2 2
8
9
10 units              metal
11 boundary           p p p
12 atom_style         atomic
13 atom_modify        map array
14 newton             on
15
16
17 read_restart       restart.initial
18 reset_timestep     0
19
20
21 # Atomo 1 es Si móvil.
22 mass               1 28.085
23
24
25 # Timestep inicial pequeño (0.01fs) para seguir al recoil energético.
26 timestep           0.00001
27 run_style          verlet
28
29
30 # Se lee el recoil del archivo recoils.txt
31 jump               ../recoils.txt recoil$2
32
33
34 # Se retoma este archivo a partir de aquí.
35 label             simu
36
37
38 # ZBL-f_Fermi-Tersoff para la interacción entre átomos de Si.
```

```
39 pair_style      tersoff/zbl
40 pair_coeff      * * SiC.tersoff.zbl Si
41
42
43 neighbor        0.0 bin
44 neigh_modify    every 1 delay 0 check no
45
46
47 # Promediamos las posiciones wrapped cada 1000 pasos
48 fix             avposx all ave/atom 1 1000 1000 x
49 fix             avposy all ave/atom 1 1000 1000 y
50 fix             avposz all ave/atom 1 1000 1000 z
51
52
53 # Guardamos coordenadas wrapped promediadas
54 dump            avg all custom 1000 avg.* id f_avposx f_avposy f_avposz
55
56
57 fix             1 all nve
58 fix             2 all momentum 1 linear 1 1 1
59
60
61 # Ajustamos el paso temporal para que la partícula más energética tarde
62 # 100 pasos en recorrer la separación entre capas de Si en la
63 # dirección 100 (a/4), es decir, que recorra en un paso 0.013575 Å.
64 # Timestep varía entre un mínimo de 0.00001ps y un máximo de 0.001ps.
65 fix             adjstep all dt/reset 1000 0.00001 0.001 0.013575 units box
66
67
68 # Calculamos el átomo con la máxima energía cinética translacional
69 compute         ecinatom all ke/atom
70 compute         maxAtKe all reduce max c_ecinatom
71 variable       ecinmax equal c_maxAtKe
72
73
74 # Almacenamos la energía potencial de cada átomo y la promediamos cada
75 # 100 pasos
76 compute         epatom all pe/atom
77 fix             av_epatom all ave/atom 1 100 100 c_epatom
78
79
80 # Guardamos cada 100 pasos energías cinéticas translacionales instantáneas y
81 # las energías potenciales promediadas
82 # El número de pasos debe coincidir con el del promedio de la ep de cada átomo
83 dump            enAtom all custom 100 enAtom.* id c_ecinatom f_av_epatom
84
85
86 restart         5000 restart.1 restart.2
87
88
89 # dt es el paso temporal, time es el tiempo total de la simulación
90 thermo_style    custom step dt time temp epair ke etotal press c_maxAtKe
91 thermo_modify    lost warn flush yes
```



```
92 thermo          1000
93
94
95 # Guardamos en archivo variables globales
96 variable        paso    equal step
97 variable        tmp     equal temp
98 variable        t_step  equal dt
99 variable        tiempo  equal time
100 variable        pres   equal press
101 variable        epot   equal epair
102 variable        ecin   equal ke
103 variable        entot  equal etotal
104 fix             globals all print 1000 '''${paso} '${t_step} '${
      tiempo} '${tmp} '${epot} '${ecin} '${entot} '${pres} '${ecinmax}''
      file globals.txt
105
106
107 # Lazo de simulación. Cada 1000 pasos se comprueba la E. cin. máxima y
108 # se decide si finaliza la simulación.
109 label            looprun
110 run              1000 pre no post no
111
112
113 # La simulación termina si la E. cin. máxima es inferior a 0.1eV
114 if               '${ecinmax} 0.1 then ''jump in.Si looprun''
115
116
117 # Fin de la simulación
118 # Copiamos el ultimo avg y lo renombramos como avg.end
119 shell           cp avg.'${paso} avg.end
```

Bibliografía

- [1] S. K. Höeffgen, S. Metzger y M. Steffens. «Investigating the effects of cosmic rays on space electronics». En: *Frontiers in Physics* 8 (2020), pág. 318. DOI: 10.3389/fphy.2020.00318.
- [2] G. Sgouros. «Alpha-particles for targeted therapy». En: *Advanced drug delivery reviews* 60.12 (2008), págs. 1402-1406. DOI: 10.1016/j.addr.2008.04.007.
- [3] R. Ferraro, S. Danzeca, C. Cangialosi, R. García Alía, F. Cerutti, A. Tsinganis, L. Dilillo, M. Brugger y A. Masi. «Study of the impact of the LHC radiation environments on the synergistic displacement damage and ionizing dose effect on electronic components». En: *IEEE Transactions on Nuclear Science* 66.7 (2019), págs. 1548-1556. DOI: 10.1109/TNS.2019.2902441.
- [4] N. G. Burnet, T. Mee, S. Gaito, N. F. Kirkby, A. H. Aitkenhead, C. N. Anandadas, M. C. Aznar, L. H. Barraclough, G. Borst, F. C. Charlwood y col. «Estimating the percentage of patients who might benefit from proton beam therapy instead of X-ray radiotherapy». En: *The British Journal of Radiology* 95.1133 (2022), pág. 20211175. DOI: 10.1259/bjr.20211175.
- [5] P. López, M. Aboy, I. Munoz, I. Santos, L. A. Marqués, P. Fernández-Martínez, M. Ullán y L. Pelaz. «Atomistic simulations of acceptor removal in p-type Si irradiated with neutrons». En: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 512 (2022), págs. 42-48. DOI: 10.1016/j.nimb.2021.12.003.
- [6] D. K. Schroder. «Carrier lifetimes in silicon». En: *IEEE transactions on Electron Devices* 44.1 (1997), págs. 160-170. DOI: 10.1109/16.554806.
- [7] J. R. Srour y J. W. Palko. «Displacement damage effects in irradiated semiconductor devices». En: *IEEE Transactions on Nuclear Science* 60.3 (2013), págs. 1740-1766. DOI: 10.1109/TNS.2013.2261316.
- [8] M. T. Robinson e I. M. Torrens. «Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation». En: *Physical Review B* 9.12 (1974), pág. 5008. DOI: 10.1103/PhysRevB.9.5008.
- [9] D. Kumar y M. Johari. «Characteristics of silicon crystal, its covalent bonding and their structure, electrical properties, uses». En: *AIP Conference Proceedings*. Vol. 2220. 1. AIP Publishing LLC. 2020, pág. 040037. DOI: 10.1063/5.0003505.
- [10] L. Snoj, G. Žerovnik y A. Trkov. «Computational analysis of irradiation facilities at the JSI TRIGA reactor». En: *Applied Radiation and Isotopes* 70.3 (2012), págs. 483-488. DOI: 10.1016/j.apradiso.2011.11.042.
- [11] H. A. Bethe y J. Ashkin. «Experimental nuclear physics». En: *Wiley, New York* (1953).
- [12] P. López, L. Pelaz, I. Santos, L. A. Marqués y M. Aboy. «Molecular dynamics simulations of damage production by thermal spikes in Ge». En: *Journal of Applied Physics* 111.3 (2012), pág. 033519. DOI: 10.1063/1.3682108.
- [13] C. J. Ortiz, L. Luneville y D. Simeone. «1.19 - Binary Collision Approximation». En: *Comprehensive Nuclear Materials (Second Edition)*. Ed. por Rudy J.M. Konings y Roger E. Stoller. Second Edition. Oxford: Elsevier, 2020, págs. 595-619. ISBN: 978-0-08-102866-7. DOI: 10.1016/B978-0-12-803581-8.11649-2.
- [14] M. J. Beck, R. D. Schrimpf, D. M. Fleetwood y S. T. Pantelides. «Disorder-recrystallization effects in low-energy beam-solid interactions». En: *Physical review letters* 100.18 (2008), pág. 185502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.185502.

- [15] I. Santos, L. A. Marqués y L. Pelaz. «Modeling of damage generation mechanisms in silicon at energies below the displacement threshold». En: *Physical Review B* 74.17 (2006), pág. 174115. DOI: 10.1103/PhysRevB.74.174115.
- [16] W. De Boer, J. Bol, A. Furgeri, S. Müller, C. Sander, E. Berdermann, M. Pomorski y M. Huhtinen. «Radiation hardness of diamond and silicon sensors compared». En: *physica status solidi (a)* 204.9 (2007), págs. 3004-3010. DOI: 10.1002/pssa.200776327.
- [17] L. A. Marqués, L. Pelaz, P. Castrillo y J. Barbolla. «Molecular dynamics study of the configurational and energetic properties of the silicon self-interstitial». En: *Physical Review B* 71.8 (2005), pág. 085204. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.085204.
- [18] I. Santos, L. A. Marqués, L. Pelaz, P. López, M. Aboy y J. Barbolla. «Molecular dynamics characterization of as-implanted damage in silicon». En: *Materials Science and Engineering: B* 124 (2005), págs. 372-375. DOI: 10.1016/j.mseb.2005.08.017.
- [19] G. H. Kinchin y R. S. Pease. «The displacement of atoms in solids by radiation». En: *Reports on progress in physics* 18.1 (1955), pág. 1. DOI: 10.1088/0034-4885/18/1/301.
- [20] M.J. Norgett, M.T. Robinson e I. M. Torrens. «A proposed method of calculating displacement dose rates». En: *Nuclear engineering and design* 33.1 (1975), págs. 50-54. DOI: 10.1016/0029-5493(75)90035-7.
- [21] *Página web de simulaciones kMC del Departamento de Electrónica de la Universidad de Valladolid*. Último acceso: 06/09/2022. URL: <https://www.ele.uva.es/~simulacion/KMC.htm>.
- [22] M. Jaraiz, L. Pelaz, E. Rubio, J. Barbolla, G. H. Gilmer, D. J. Eaglesham, H. J. Gossmann y J. M. Poate. «Atomistic modeling of point and extended defects in crystalline materials». En: *MRS Online Proceedings Library (OPL)* 532 (1998). DOI: 10.1557/proc-532-43.
- [23] *Página web de descarga del código Spectra-PKA*. Último acceso: 06/09/2022. URL: <https://github.com/fispact/SPECTRA-PKA>.
- [24] R. E. Macfarlane, D. W. Muir y F. M. Mann. «Radiation damage calculations with NJOY». En: *Journal of Nuclear Materials* 123.1-3 (1984), págs. 1041-1046. DOI: 10.1016/0022-3115(84)90216-2.
- [25] *Página web oficial del código TENDL-2017*. Último acceso: 06/09/2022. URL: <https://fispact.ukaea.uk/nuclear-data/downloads/>.
- [26] *Página web del código de simulación Geant4*. Último acceso: 06/09/2022. URL: <https://geant4.org/>.
- [27] J. F. Ziegler y J. P. Biersack. «The stopping and range of ions in matter». En: *Treatise on heavy-ion science*. Springer, 1985, págs. 93-129. DOI: 10.1007/978-1-4615-8103-1_3.
- [28] *Página web oficial del código SRIM*. Último acceso: 06/09/2022. URL: <http://www.srim.org/>.
- [29] J. P. Biersack y L. G. Hagmark. «A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets». En: *Nuclear instruments and methods* 174.1-2 (1980), págs. 257-269. DOI: 10.1016/0029-554x(80)90440-1.
- [30] H. Hofsäss, K. Zhang y A. Mutzke. «Simulation of ion beam sputtering with SDTrimSP, TRIDYN and SRIM». En: *Applied Surface Science* 310 (2014), págs. 134-141. DOI: 10.1016/j.apsusc.2014.03.152.
- [31] M. T. Robinson. «The binary collision approximation: Background and introduction». En: *Radiation Effects and Defects in Solids* 130.1 (1994), págs. 3-20. DOI: 10.1080/10420159408219767.

- [32] M. T. Robinson. «Computer simulation studies of high-energy collision cascades». En: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 67.1 (1992), págs. 396-400. DOI: 10.1016/0168-583X(92)95839-J.
- [33] K. Gärtner, D. Stock, B. Weber, G. Betz, M. Hautala, G. Hobler, M. Hou, S. Arite, W. Eckstein, J. J. Jiménez-Rodríguez y col. «Round robin computer simulation of ion transmission through crystalline layers». En: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 102.1-4 (1995), págs. 183-197. DOI: 10.1016/0168-583X(95)80139-D.
- [34] G. Hobler y G. Betz. «On the useful range of application of molecular dynamics simulations in the recoil interaction approximation». En: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 180.1-4 (2001), págs. 203-208. DOI: 10.1016/S0168-583X(01)00418-9.
- [35] C. J. Ortiz. «A combined BCA-MD method with adaptive volume to simulate high-energy atomic-collision cascades in solids under irradiation». En: *Computational Materials Science* 154 (2018), págs. 325-334. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.07.058.
- [36] G. Hobler y G. Otto. «Status and open problems in modeling of as-implanted damage in silicon». En: *Materials Science in Semiconductor Processing* 6.1-3 (2003), págs. 1-14. DOI: 10.1016/S1369-8001(03)00065-9.
- [37] M. Posselt, B. Schmidt, T. Feudel y N. Strecker. «Atomistic simulation of ion implantation and its application in Si technology». En: *Materials Science and Engineering: B* 71.1-3 (2000), págs. 128-136. DOI: 10.1016/S0921-5107(99)00362-1.
- [38] M. Jaraiz, G. H. Gilmer, D. M. Stock y T. Diaz De La Rubia. «Defects from implantation in silicon by linked Marlow-molecular dynamics calculations». En: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 102.1-4 (1995), págs. 180-182. DOI: 10.1016/0168-583X(95)80138-C.
- [39] I. Santos, L. A. Marqués, L. Pelaz y P. López. «Improved atomistic damage generation model for binary collision simulations». En: *Journal of Applied Physics* 105.8 (2009), pág. 083530. DOI: 10.1063/1.3110077.
- [40] F. H. Stillinger y T. A. Weber. «Computer simulation of local order in condensed phases of silicon». En: *Physical review B* 31.8 (1985), pág. 5262. DOI: 10.1103/PhysRevB.31.5262.
- [41] J. Tersoff. «New empirical model for the structural properties of silicon». En: *Physical review letters* 56.6 (1986), pág. 632. DOI: 10.1103/PhysRevLett.56.632.
- [42] J. Tersoff. «New empirical approach for the structure and energy of covalent systems». En: *Physical review B* 37.12 (1988), pág. 6991. DOI: 10.1103/PhysRevB.37.6991.
- [43] J. Tersoff. «Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties». En: *Physical Review B* 38.14 (1988), pág. 9902. DOI: 10.1103/PhysRevB.38.9902.
- [44] K. Ding y H. C. Andersen. «Molecular-dynamics simulation of amorphous germanium». En: *Physical Review B* 34.10 (1986), pág. 6987. DOI: 10.1103/PhysRevB.34.6987.
- [45] J. Tersoff. «Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems». En: *Physical review B* 39.8 (1989), pág. 5566. DOI: 10.1103/PhysRevB.39.5566.
- [46] F. Ravotti, B. Gkotse, M. Glaser, I. Mateu, V. Meskova, G. Pezzullo y J. M. Sallese. «The IRRAD Proton Irradiation Facility Control, Data Management and Beam Diagnostic Systems: An Outlook of the Major Upgrades Beyond the CERN Long Shutdown 2». En: *Proc. ICALEPCS*. 2019, págs. 5-11. DOI: 10.18429/JACoW-ICALEPCS2019-WEPHA021.

- [47] *Página web del acelerador de partículas TRIUMF*. Último acceso: 06/09/2022. URL: <https://www.triumf.ca/proton-irradiation-facility>.
- [48] *Página web del Helmholtz Zentrum Berlin*. Último acceso: 06/09/2022. URL: https://www.helmholtz-berlin.de/forschung/quellen/radhard/protonen_en.html.
- [49] K. Hara, P. P. Allport, M. Baca, J. Broughton, A. Chisholm, K. Nikolopoulos, S. Pyatt, J. P. Thomas, J. A. Wilson, J. Kierstead y col. «Charge collection and field profile studies of heavily irradiated strip sensors for the ATLAS inner tracker upgrade». En: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 831 (2016), págs. 181-188. DOI: 10.1016/j.nima.2016.04.035.
- [50] V. Cindro, S. H. Abidi, A. A. Affolder, M. Arratia, B. Ciungu, K. Dette, Z. Dolezal, C. Escobar, V. Fadeyev, C. García y col. «Measurement of the charge collection in irradiated miniature sensors for the upgrade of the ATLAS phase-II strip tracker». En: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 924 (2019), págs. 153-159. DOI: 10.1016/j.nima.2018.10.007.
- [51] *Página web del grupo de investigación MMM*. Último acceso: 06/09/2022. URL: <https://www.ele.uva.es/~mmm/>.
- [52] P. López, I. Santos, M. Aboy, L. A. Marqués y L. Pelaz. «A detailed approach for the classification and statistical analysis of irradiation induced defects». En: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 352 (2015), págs. 156-159. ISSN: 0168-583X. DOI: 10.1016/j.nimb.2014.12.026.
- [53] E. Holmström, K. Nordlund y M. Hakala. «Amorphous defect clusters of pure Si and type inversion in Si detectors». En: *Physical Review B* 82.10 (2010), pág. 104111. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.104111.
- [54] T. Diaz De La Rubia y G. H. Gilmer. «Structural transformations and defect production in ion implanted silicon: a molecular dynamics simulation study». En: *Physical review letters* 74.13 (1995), pág. 2507. DOI: 10.1103/PhysRevLett.74.2507.
- [55] *Página web del manual de LAMMPS*. Último acceso: 06/09/2022. URL: <http://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>.