



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN FÍSICA

Estudio de los mecanismos de generación de
dañado en SiGe y SiC

AUTOR: D. DIEGO ROGEL RODRÍGUEZ

TUTOR: D. IVÁN SANTOS TEJIDO

VALLADOLID, 5 DE JULIO DE 2017

Resumen

El objetivo de este trabajo es estudiar los mecanismos de generación de daño en SiGe y SiC en su fase zinc-blenda desde un punto de vista atómico. Para ello, se ha desarrollado una metodología de simulaciones de Dinámica Molecular Clásica, en las que se ha empleado un potencial empírico de Tersoff multicomponente para describir la interacción entre átomos. Primero, se han calculado computacionalmente las constantes elásticas y parámetros de red del Si, C, Ge, SiGe y SiC. Después, se han llevado a cabo diferentes tipos de simulaciones con el objetivo de estudiar los fenómenos de generación de daño en dichos semiconductores, a través de la fusión local de regiones en las que se ha depositado una determinada energía cinética. Finalmente, se ha realizado un análisis de las regiones distorsionadas en las redes atómicas y de las energías involucradas en la formación de las mismas que permite describir los mecanismos de generación de daño en cada material. Esta información es útil para identificar y comprender el comportamiento de los defectos en SiGe y SiC, y puede ser aplicada para diseñar dispositivos electrónicos funcionales.

Abstract

The aim of this work is to study the damage generation mechanisms in zinc-blende-like SiGe and SiC structures from an atomistic point of view. To do so, a Classical Molecular Dynamics simulation scheme has been carried out to characterize the damage generation, using a multicomponent Tersoff empirical potential to describe the interaction between atoms. First, the elastic constants and lattice parameters of Si, C, Ge, SiGe and SiC have been computationally calculated. Then, different types of simulations have been run to study the damage generation phenomena in these semiconductors through the local melting of regions in which kinetic energy is deposited. Finally, an analysis of the resulting distorted lattice regions and the energies involved in their production has been made to describe the damage generation mechanisms in each material. This information is useful to identify and understand the behavior of defects in SiGe and SiC, and it can be applied to design functional electronic devices.

A mis padres, a mi hermano y a mis abuelos.

Índice general

Índice de Tablas	XII
Índice de Figuras	XIII
1. Introducción	1
1.1. Estado del arte	3
1.1.1. Modelado computacional	3
1.1.2. Generación de dañado	4
1.2. Objetivos	5
1.3. Estructura de la memoria	5
2. Metodología	7
2.1. Introducción	7
2.1.1. Técnicas de simulación atomística	8
2.2. Dinámica Molecular Clásica	12
2.2.1. Fundamentos	13
2.2.2. Celda de simulación	14
2.2.3. Condiciones de contorno	14
2.2.4. Simulador LAMMPS	16
2.2.5. Recursos hardware	16
2.3. Potenciales empíricos	16
2.3.1. Los potenciales de Tersoff	17
2.3.2. El potencial de Ziegler-Biersack-Littmark	22
2.3.3. Conexión Tersoff-ZBL	23

2.3.4.	Selección de parámetros	24
2.4.	Tipos de simulaciones	25
2.4.1.	<i>Recoils</i> aislados	25
2.4.2.	Esferas	26
2.4.3.	Procesos de fusión	28
2.4.4.	Programas empleados en las simulaciones	28
2.5.	Caracterización de la generación de dañado	29
2.5.1.	Tipos de defectos	29
2.5.2.	Evaluación del dañado	31
2.5.3.	Modelo de generación de dañado	31
3.	Propiedades fundamentales del SiGe y SiC	37
3.1.	Parámetros de red	38
3.2.	Constantes elásticas	41
4.	Generación de dañado	45
4.1.	<i>Recoils</i> aislados	45
4.1.1.	<i>Recoils</i> en SiGe	46
4.1.2.	<i>Recoils</i> en SiC	49
4.2.	Esferas	52
4.2.1.	Esferas en SiGe	53
4.2.2.	Esferas en SiC	59
4.2.3.	Comportamiento de los antisitios	61
4.3.	Procesos de fusión	63
5.	Conclusiones y líneas futuras	68
5.1.	Conclusiones del trabajo	68
5.2.	Líneas futuras de investigación	70
A.	Archivo de entrada en LAMMPS	72
A.1.	Ejemplo de programa de simulación en LAMMPS	72

B. Programas en C	74
B.1. Generación de la red perfecta	74
B.2. Carpetas para archivos de simulación	76
C. Scripts en Bash	81
C.1. Preparación de las simulaciones	81
C.2. Análisis y obtención de resultados	83
Contenido del CD	87
Bibliografía	88

Índice de tablas

2.1. Entidades, tamaños y tiempos posibles de simulación en los diferentes tipos de modelos [33].	8
2.2. Parámetros de transición Tersoff-ZBL empleados en este TFG.	24
3.1. Parámetros de red (l_{red}) en Amstrongs (Å) calculados mediante CMD para diferentes temperaturas.	41
3.2. Constantes elásticas en GPa obtenidas por CMD en este TFG. Se han calculado las diferencias relativas con los correspondientes valores experimentales en las columnas <i>Dif. rel.</i>	43
3.3. Parámetros de Tersoff empleados en este TFG para el silicio, carbono y germanio. Los parámetros para el SiC y el SiGe se calculan a partir de éstos mediante las relaciones (2.18), (2.19) y (2.20).	44
4.1. Energías de caracterización del dañado en simulaciones de <i>recoils</i> para Si, Ge, y SiGe.	47
4.2. Energías de caracterización del dañado en simulaciones de <i>recoils</i> en $eV/\text{átomo}$ para Si, Ge, y SiGe.	50
4.3. Densidades energéticas características en $eV/\text{átomo}$ y factores de relación térmicos en procesos de fusión para cada compuesto bajo estudio obtenidas mediante simulaciones CMD.	67

Índice de figuras

1.1. Región atómica desordenada en una red de SiC sometida a radiación externa [24].	4
2.1. Técnicas de simulación y métodos experimentales en función del dominio espacial y temporal de aplicación [34].	9
2.2. Esquema representativo de las diferencias entre los métodos MD y BCA. En los t_n procesos de interacción entre átomos, las simulaciones BCA solo tienen en cuenta los pares donde se produce la interacción más fuerte (representadas mediante una línea sólida), mientras que en MD también se consideran interacciones más débiles con otros vecinos (representadas con línea punteada) [44].	11
2.3. Esquema del algoritmo de Verlet empleado en CMD para simular el comportamiento de un sistema atómico [46].	14
2.5. Representación de una celda de simulación bidimensional con PBC [49].	15
2.4. Representación de una celdilla unitaria tipo zinc-blenda con 18 átomos (izquierda) y de una celda de simulación cúbica formada por 3 celdillas unitarias zinc-blenda en cada dirección (derecha) [48].	15
2.6. Representación de los enlaces $i - j$ e $i - k$ que forman el ángulo θ_{ijk}	20
2.7. Ejemplo de funciones de Fermi para dos parámetros distintos de conexión.	24
2.8. Esquema de las condiciones iniciales (a) y de la configuración final (b) en las simulaciones de recoils aislados mediante CMD [69].	26
2.9. Esquema de las condiciones iniciales (a) y de la configuración final (b) en las simulaciones de esferas mediante CMD [69].	27
2.10. Ejemplos de defectos puntuales en redes tipo diamante.	29

2.11. Ejemplo de la identificación de un defecto puntual aislado y una región desordenada tras comparar las posiciones atómicas promedio con la red perfecta [69]. El resultado de la comparación permite distinguir los átomos que están fuera de sus posiciones de red (imagen inferior, en rojo) y las posiciones de red que no tienen átomo (imagen inferior, en azul).	30
2.12. Cantidad final de DA promedio en simulaciones CMD como función de la densidad de energía cinética inicial depositada en diferentes cantidades de átomos agrupados en esferas para el Si. Las rectas se corresponden con regresiones lineales a los datos [22].	34
2.13. Densidad de energía umbral E_T (gráfica superior) y coste de generación del dañado D_C (gráfica inferior) en Si, como función del número inicial de átomos en movimiento, calculadas a partir de las rectas en la Figura 2.12 (eje inferior). Las líneas corresponden a E_T y D_C como función del número de átomos vecinos energéticos (eje superior) [22].	35
3.1. Energía potencial total por átomo en función del parámetro de red para el SiGe a 0 K. Los puntos se corresponden con resultados del cálculo, la línea es para guiar al ojo.	39
3.2. Presión en función del parámetro de red para el SiGe a diferentes temperaturas. Los puntos se corresponden con resultados del cálculo, la línea es para guiar al ojo. . . .	40
4.1. Número promedio de átomos desordenados, N_{DA} , en función de la energía del <i>recoil</i> para el Si, Ge, y SiGe. Se distinguen las simulaciones de SiGe en las que el recoil es de Si de aquellas en las que el recoil es de Ge. La línea negra corresponde a la generación de un solo átomo desordenado. Las líneas de colores son rectas de regresión a los datos.	46
4.2. Número promedio de átomos desordenados, N_{DA} , en función de la energía del <i>recoil</i> para el Si, C, y SiC. Se distinguen las simulaciones de SiC en las que el recoil es de Si de aquellas en las que el recoil es de C. La línea negra punteada corresponde a la generación de un solo átomo desordenado. Las líneas de colores son rectas de regresión a los datos.	49

4.3.	Izquierda: representación de las direcciones de las velocidades iniciales de los <i>recoils</i> para el cálculo de E_d en SiC. En azul, las direcciones cristalográficas escogidas para la evaluación de E_d en las referencias [91 - 94, 68]. En rojo, las direcciones de velocidad iniciales aleatorias escogidas en las simulaciones de SiC con <i>recoils</i> de Si en las que se ha generado dañado. Derecha: referencia de las direcciones cristalográficas representadas en una red de SiC.	51
4.4.	Generación de dañado en simulaciones de esferas de 30 átomos en redes de SiGe con diferentes densidades energéticas iniciales.	53
4.5.	Número final de átomos desordenados promedio en función de la densidad energética inicial aportada a las esferas, para diferentes tamaños de esferas en SiGe. Los resultados de las simulaciones de esferas construidas en torno a un átomo central de Si se presentan en la gráfica (a), y los correspondientes a esferas centradas en un átomo de Ge se detallan en la gráfica (b). Los puntos son cálculos computacionales, las líneas discontinuas son regresiones lineales a los datos.	54
4.6.	Energías mínimas para iniciar la generación de dañado en función del número de átomos que componen las esferas para Si, Ge y SiGe. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.	55
4.7.	Costes de generación de dañado como función del número de átomos que componen las esferas para Si, Ge y SiGe. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.	56
4.8.	$\rho(N = N_{DA}) = E_T(N) + D_C(N)$ como función del número de átomos que componen las esferas para Si, Ge y SiGe. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.	57
4.9.	Representación de una esfera de 17 átomos con dos capas completas en una estructura cristalina tipo diamante. En azul, el átomo central; en verde, los átomos de la primera capa; y en negro, los átomos de la segunda capa.	58

4.10. Energías mínimas para iniciar la generación de daño en función del número de átomos que componen las esferas para Si, C y SiC. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.	59
4.11. Costes de generación de daño como función del número de átomos que componen las esferas para Si, C y SiC. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.	60
4.12. $\rho(N = N_{DA}) = E_T(N) + D_C(N)$ en función del número de átomos que componen las esferas para Si, C y SiC. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.	61
4.13. Número de antisitios en función de la cantidad de átomos que forman las esferas para esferas en SiGe con una densidad energética inicial de $25 \text{ eV}/\text{átomo}$. Los puntos son los promedios evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones. Las líneas son las correspondientes rectas de regresión lineal, representadas para guiar al ojo.	62
4.14. Número de antisitios en función de la cantidad de átomos que forman las esferas para esferas en SiC con una densidad energética inicial de $25 \text{ eV}/\text{átomo}$. Los puntos son los promedios evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones. Las líneas son las correspondientes rectas de regresión lineal, representadas para guiar al ojo.	63
4.15. Energías cinética y potencial por átomo en estado estacionario en función de la densidad energética inicial en simulaciones de procesos de fusión de SiGe. Las energías potenciales están referidas a las de la red perfecta a 0 K . Los puntos son cálculos computacionales, las líneas son para guiar al ojo. La línea negra discontinua marca la equipartición de la densidad de energía inicial entre sus componentes cinética y potencial.	64
4.16. Configuraciones atómicas de celdas de SiGe en estado estacionario para diferentes densidades energéticas iniciales ρ^{in} en simulaciones de procesos de fusión.	66

Capítulo 1

Introducción

La necesidad de dispositivos electrónicos capaces de operar en alta potencia, o en condiciones extremas de temperatura, radiación o corrosión ha desembocado en una búsqueda de nuevos semiconductores que sustituyan al silicio (Si) como material base sobre el que fabricar dispositivos electrónicos. Así, las aleaciones binarias del Si con carbono (SiC) y con germanio (SiGe) se presentan como alternativas viables de cara a solventar estos problemas. Pero para poder diseñar dispositivos funcionales con estos compuestos es necesario caracterizarlos en profundidad.

A pesar de que hoy en día la inmensa mayoría de la industria electrónica se base en Si, dada la abundancia de este elemento en la Tierra y la facilidad para producir su óxido (SiO_2), es en realidad el germanio (Ge) el antecesor de toda la tecnología de semiconductores, al ser el primer material usado para fabricar prototipos del transistor bipolar ideado por Shockley [1]. Tras unas décadas relegado a un segundo plano en la industria electrónica en favor del Si, el interés en el Ge se ha reavivado en los últimos años, especialmente como componente del SiGe en su aplicación a la tecnología CMOS (Complementary Metal–Oxide–Semiconductor) [2]. Mientras que el Ge presenta una movilidad de aproximadamente 3 veces la del Si para los electrones, y de 4 veces para los huecos [3], lo cual se traduce en tiempos de conmutación menores, la baja energía del gap del Ge, de 0.69 eV a 300 K [4], y la baja calidad del dióxido de germanio (GeO_2) comparada con la del SiO_2 , hacen inviable la fabricación de transistores basados puramente en Ge, ya que provocaría corrientes de fuga elevadas [2, 5]. Esto, unido al alto coste económico del Ge, ha llevado a la industria a optar

por el SiGe como alternativa viable económicamente, que mantenga las bondades tecnológicas del Ge sin acusar demasiado sus desventajas.

Por su parte, el SiC interesa por su mayor energía de gap con respecto al Si ($2,82\text{ eV}$ para el SiC, $1,11\text{ eV}$ para el Si [4]), lo que le hace adecuado para desarrollar dispositivos más resistentes a altas dosis de radiación que los basados en Si [6]. Además, es menos sensible a condiciones de altas temperaturas o corrosión, lo cual le hace más indicado para trabajar en aplicaciones donde se den algunas de estas circunstancias. También se han publicado en los últimos años multitud de artículos científicos sobre el papel del SiC como material de interés en aplicaciones fotoeléctricas, especialmente para la formación de nanotubos [7, 8]. Sin embargo, el SiC es hoy en día un semiconductor cuya técnica de producción en masa para componentes electrónicos presenta dificultades. Los primeros dispositivos basados en este semiconductor fueron diodos de Schottky y transistores MOSFET para electrónica de alta potencia [9], mientras que los transistores bipolares y tiristores de SiC están aún en desarrollo [10]. Hay dos factores principales que dificultan la comercialización de la electrónica de SiC. El primero son los problemas de interfaz que surgen entre el SiC y el dióxido de silicio (SiO_2), ampliamente usado en electrónica. El segundo es el dañado en la estructura cristalina que se produce durante la fabricación y el funcionamiento de los dispositivos de SiC [11].

Hay dos situaciones en las que habitualmente se produce dañado en la red cristalina del material. La primera ocurre durante la fabricación de dispositivos electrónicos, en la que los semiconductores han de ser dopados por procesos como la implantación de iones, que consiste en bombardear la muestra a dopar con iones de un elemento dopante. Estos impactos alteran la ordenación reticular. La segunda se da cuando el material forma parte de dispositivos electrónicos en entornos de alta radiación ambiental (como aquellos en los que se pretende emplear SiC). Las dosis a las que se ve sometido el semiconductor provocan defectos en su estructura. El dañado da lugar a trampas de portadores que dificultan su movilidad, y a centros profundos que provocan la recombinación de electrones y huecos, con las consecuentes corrientes de fuga, deteriorando las propiedades eléctricas del dispositivo.

Es por ello necesario conocer los mecanismos físicos que originan los defectos en las estructuras cristalinas de estos semiconductores, con el objetivo de caracterizar estos dañados para minimizarlos o controlarlos.

1.1. Estado del arte

Las nuevas necesidades tecnológicas han hecho crecer el interés en compuestos como el SiGe y SiC, para los cuales se han realizado diversos estudios recientemente. En este apartado se resumen algunos de los trabajos y resultados más relevantes en la caracterización del SiGe y SiC.

1.1.1. Modelado computacional

En lo que al modelizado de estructuras de semiconductores mediante simulación computacional se refiere, uno de los trabajos más destacados fue el realizado por Tersoff en 1988 para describir la fase sólida del Si mediante simulaciones de Dinámica Clásica Molecular [12]. En él se modeliza la interacción entre los átomos mediante un potencial empírico cuyos parámetros libres se pueden ajustar para reproducir las características deseadas de las diferentes redes cristalinas. Los potenciales de Tersoff han sido ampliamente usados con diversos fines: desde el estudio de las fases amorfas y líquidas del Si [13], hasta su cristalización [14], pasando por la caracterización de diferentes fenómenos relacionados con la irradiación de iones [15]. También fueron aplicados para evaluar la energía umbral de desplazamiento del Si, con resultados que varían entre los 10 y los 30 eV, en buen acuerdo con valores experimentales y teóricos previos [16, 17]. Una de las limitaciones más importantes del potencial de Tersoff es que sobreestima la temperatura de fusión del Si cristalino, sobrepasando su valor experimental. Sin embargo, el cálculo de esta temperatura bajo el modelo de Tersoff puede ser reescalado, de forma que se reproduzcan los valores experimentales convenientemente [18].

No solo el Si puede ser estudiado con los potenciales de Tersoff. Los parámetros de los que éste depende pueden ser ajustados para reproducir las propiedades de otros materiales, incluyendo semiconductores multicomponentes [19]. Así, el modelo ha sido adaptado al SiGe y empleado por

Goumri-Said et al. en 2004 para calcular mediante Dinámica Molecular Clásica las características estructurales, elásticas, termodinámicas y de cohesión del SiGe, obteniendo unos resultados en buen acuerdo con diferentes predicciones teóricas previas, confirmando la validez de este modelo para predecir las propiedades de este semiconductor [20]. En cuanto al SiC, también es conocido que las propiedades estructurales, elásticas, termodinámicas y de cohesión de su fase zinc-blenda pueden ser calculadas satisfactoriamente mediante Dinámica Clásica Molecular aplicando un potencial de Tersoff adecuadamente parametrizado, como mostraron Tang y Yip en 1995 [21].

1.1.2. Generación de daño

Los mecanismos de generación de daño han sido estudiados en simulaciones de Dinámica Clásica Molecular mediante el potencial de Tersoff. Así, Santos *et al.* lo emplearon para diseñar un modelo atomístico computacionalmente eficiente que describe la producción de defectos en procesos de implantación iónica sobre Si [22]. Díaz de la Rubia *et al.* lo aplicaron para simular los efectos que tiene sobre el SiC la radiación de neutrones que incide sobre los dispositivos electrónicos basados en este semiconductor cuando se emplean en reactores de fusión [23, 24].

Así, comprobaron que, en estas condiciones, se producen grandes regiones del material en la que los átomos se desordenan, pese a que la estructura cristalina básica de la red se mantiene, y que la configuración del daño generado por átomos de C en movimiento difiere de aquél que producen los átomos de Si. También se ha estudiado la creación de defectos puntuales en Si y SiGe como producto de la actuación de una presión externa al material [25], y se ha caracterizado el daño provocado por la implantación iónica sobre arseniuro de galio-aluminio (AlGaAs) [26 - 28] con los potenciales de

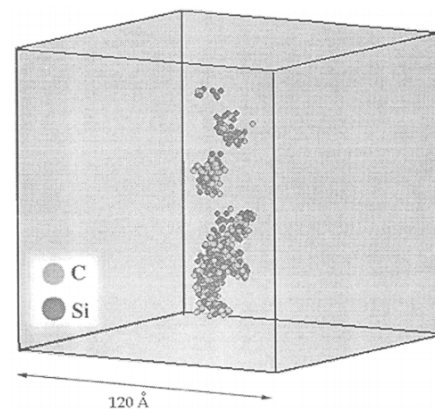


Figura 1.1: Región atómica desordenada en una red de SiC sometida a radiación externa [24].

Tersoff. Destaca además el trabajo de López *et al.*, que emplea el potencial de Tersoff para simular la producción de daño en Ge por fenómenos de fusión local, extendiendo el estudio al modelado

de las cascadas de átomos desordenados, características de procesos de implantación iónica [29]. Se observó que, en el caso de la implantación de iones pesados, los defectos en Ge eran más extensos que en procesos idénticos sobre Si.

1.2. Objetivos

El objetivo principal de este Trabajo de Fin de Grado (TFG) es caracterizar los mecanismos de generación de daño en las redes cristalinas de SiC y SiGe en su fase zinc-blenda mediante simulaciones de Dinámica Molecular Clásica.

Con esta finalidad, se han realizado las siguientes tareas:

- Elección de una parametrización adecuada para los potenciales empíricos que modelizan las interacciones entre átomos, capaz de reproducir satisfactoriamente las propiedades estructurales, cohesivas y elásticas del Si, Ge, C, SiC y SiGe sin defectos.
- Simulación de la generación de daño en las estructuras cristalinas mediante mecanismos balísticos, en los que se da energía cinética a un átomo de la red.
- Caracterización de la producción de defectos mediante procedimientos térmicos, en los que se aporta energía a toda la muestra.
- Simulación de procesos intermedios entre los dos anteriores, en los que se otorga energía a un conjunto de varios átomos.

Este TFG está enmarcado dentro de la unidad de investigación consolidada Modelado Multi-Escala de Materiales de la Universidad de Valladolid (MMM) [30], y se han tenido en cuenta los resultados de anteriores Trabajos de Fin de Grado realizados en el área [31, 32].

1.3. Estructura de la memoria

La memoria de este TFG se ha dividido en 5 capítulos que se resumen a continuación:

- Dado que todo nuestro trabajo se va a realizar empleando un solo método de simulación, en el Capítulo 2 se realiza una explicación detallada del mismo, comparándolo con otras técnicas. También se incluye una descripción de los potenciales empleados, de las simulaciones que se realizan, y del modelo bajo el cual se estudian los mecanismos de generación de daño.
- En el Capítulo 3 se presentan los resultados de la evaluación de las propiedades estructurales y elásticas de los semiconductores con los que se trabaja, y se lleva a cabo una descripción de los parámetros empleados en los potenciales.
- Los resultados principales de este TFG se muestran en el Capítulo 4. En él se caracteriza la generación del daño en los diferentes semiconductores a partir del análisis de las simulaciones llevadas a cabo.
- En el Capítulo 5 se detallan las conclusiones de este TFG y se plantean las posibles líneas futuras de investigación.
- Finalmente, se incluyen tres apéndices en los que se muestran ejemplos de programas creados para llevar a cabo las simulaciones de este TFG y analizar sus resultados.

Capítulo 2

Metodología

En este capítulo se resumen, en primer lugar, las técnicas de simulación atomística existentes más relevantes, se detalla la técnica de Dinámica Molecular Clásica y se describen los potenciales empíricos que modelizan las interacciones entre átomos. Después, se exponen los tipos de simulaciones que se han llevado a cabo para el estudio y la información que se pretende obtener de cada una de ellas. Finalmente, se presenta el modelo aplicado para caracterizar los mecanismos de generación de dañado en las redes cristalinas de los semiconductores.

2.1. Introducción

Los métodos de simulación computacional son una potente herramienta ampliamente extendida en diversos campos de investigación científica. Esto se debe a su utilidad para realizar predicciones sobre modelos y compararlas con resultados experimentales, analizar datos, y resolver problemas de forma numérica. Así, en ocasiones solamente es posible analizar determinadas propiedades sobre un sistema físico mediante simulación computacional, dado que con las herramientas que este método ofrece se pueden alcanzar escalas temporales y espaciales inviables con cualquier otra técnica experimental. Los dañados en redes cristalinas y sus mecanismos de generación son ejemplos claros de sistemas físicos en los que la simulación computacional representa una técnica muy útil para su caracterización y el análisis de sus propiedades.

2.1.1. Técnicas de simulación atomística

Dentro de la simulación computacional atomística, existe una gran cantidad de técnicas diferentes que pueden ser usadas. Cada una es adecuada para obtener un tipo de información sobre los sistemas atómicos: desde las propiedades electrónicas de una sola molécula hasta la evolución dinámica de un conjunto numeroso de átomos, para diferentes escalas temporales y espaciales. La elección de un modelo y un método adecuados que sean capaces de reproducir con suficiente fiabilidad los resultados experimentales depende de los recursos informáticos disponibles, de la naturaleza física del sistema y del rigor con el que se desee trabajar. Así, escoger la técnica adecuada consiste en encontrar el equilibrio entre precisión y simplicidad. En ocasiones, no basta con el empleo de una sola técnica de simulación y es necesario integrar varias diferentes para evaluar distintos fenómenos, o para conocer el comportamiento de los sistemas a multitud de escalas. Esto se conoce como *modelado multi-escala*. En este apartado se describen algunas de las técnicas más relevantes empleadas en el estudio de sistemas atomísticos, se profundiza en sus ventajas y limitaciones, y se mencionan sus principales aplicaciones en el campo del modelizado atomístico.

Una forma conveniente de clasificar los métodos de simulación es separarlos en función de la entidad cuyo comportamiento se pretende describir [33], ya sean electrones, átomos, agregados de moléculas o grandes conjuntos de partículas que forman un material continuo. Sobre cada entidad prevalecen unos fenómenos físicos relevantes diferentes, lo cual está estrechamente relacionado con las escalas temporales y espaciales que se manejan en el sistema. En la Tabla 2.1 se resumen los diferentes métodos y su dominio de acuerdo a esta clasificación.

Modelo	Entidad descrita	Unidades	Escala espacial	Tiempos
Electrónico	Núcleos + electrones	10 - 100	0,1 nm - 1 nm	fs
Atomístico	Átomos	$10^2 - 10^9$	0,1 nm - 100 nm	fs - μ s
Mesoscópico	Partículas	10^6 - Ilimitado	100 nm - mm	m - s
Continuo	Continuos	Ilimitado	nm - m	s - ks

Tabla 2.1: Entidades, tamaños y tiempos posibles de simulación en los diferentes tipos de modelos [33].

El modelo a aplicar debe usar expresiones que reproduzcan fielmente el comportamiento de los sistemas en función del tamaño de los mismos, en un tiempo de simulación razonable. De este modo, la escala de tiempo determina el tamaño de los sistemas que se pueden simular con los recursos informáticos disponibles. Por ejemplo, para la difusividad de los electrones se puede emplear una técnica electrónica, mientras que para estudiar la corriente eléctrica en un circuito es más adecuado un modelo continuo. Pese a que es el electrón el agente principal en ambos fenómenos, la diferencia en las escalas temporales y espaciales obliga a emplear métodos de simulación diferentes. Una visión general de las técnicas de simulación más destacadas y sus correspondientes métodos experimentales para las diferentes escalas se presenta en la Figura 2.1.

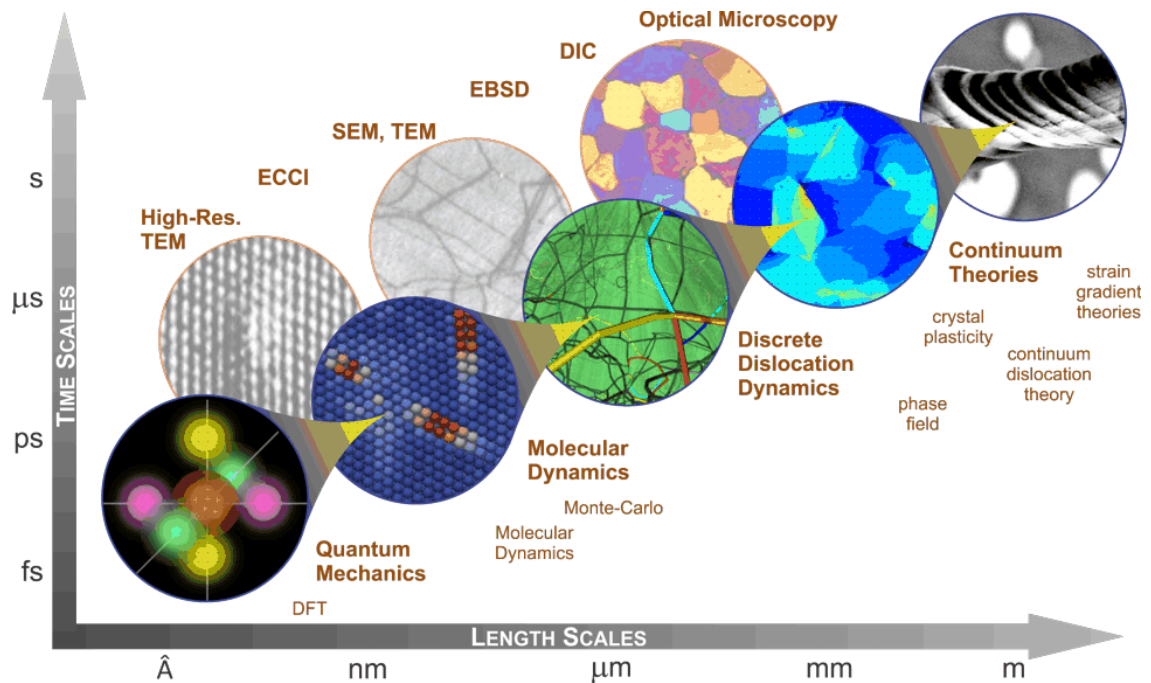


Figura 2.1: Técnicas de simulación y métodos experimentales en función del dominio espacial y temporal de aplicación [34].

A continuación se describen brevemente las técnicas de simulación computacional más importantes:

- **Técnicas ab-initio.** Son aquellas que tratan los sistemas basándose únicamente en la mecánica cuántica, resolviendo la ecuación de Schrödinger sin asumir parámetros externos. Son capaces de aportar información muy precisa sobre sistemas en los que los efectos cuánticos son relevan-

tes. Generalmente, las configuraciones electrónicas son las que determinan las propiedades de estos sistemas, por lo que estas técnicas se pueden incluir dentro de los modelos electrónicos. Su principal inconveniente es que resulta inviable aplicarlas a conjuntos medianos o grandes de partículas, dada la enorme complejidad y coste computacional que alcanzarían éstos [35]. Es por ello que la naturaleza del modelo restringe las escalas temporales y espaciales con las que operar a órdenes de picosegundos y unos pocos nanómetros, respectivamente. En ocasiones, se recurre a aproximaciones dentro del tratamiento cuántico para poder computar sistemas de mayores dimensiones. Ejemplos de dichas aproximaciones son las de Born-Oppenheimer [36], Hartree-Fock [37, 38], o la *Density Functional Theory* (DFT) [39]. Por otro lado, excepto en elementos ligeros, el comportamiento cuántico de los núcleos y electrones no es, para propósitos generales, demasiado relevante, de modo que es razonable hacer un tratamiento clásico de elementos más pesados o conjuntos más grandes de átomos.

- Modelos Tight-Binding (TB). Como las técnicas *ab initio*, los modelos TB son de carácter electrónico, y el punto de partida para los cálculos es la resolución de la ecuación de Schrödinger. La diferencia entre TB y *ab initio* es que el modelo TB se basa en expresar la función de onda electrónica como una combinación lineal de orbitales atómicos e introduce parámetros ajustados experimentalmente, lo cual supone una reducción importante en el coste computacional de las operaciones a realizar. Así, los métodos TB son aplicables a sistemas del orden de los 10^3 átomos, mayores que los que las técnicas *ab initio* permiten, y son capaces de describir la dinámica de los átomos para tiempos más largos, llegando a los centenares de picosegundos [40].
- Dinámica Molecular (MD). Es un método de simulación computacional atómico, de muchos cuerpos, en el que se evalúa por un período de tiempo el movimiento de cada átomo. Deja a un lado la separación núcleo-electrón de las técnicas *ab initio*, tratando al átomo en conjunto como una sola partícula. Los cálculos en estos modelos consisten, en esencia, en evaluar las fuerzas a las que está sometido cada átomo del sistema, calculadas vía potenciales interatómicos que modelizan las interacciones, y resolver las ecuaciones del movimiento de Newton para dichos potenciales [41]. Suponer el átomo como una entidad indivisible se traduce en un

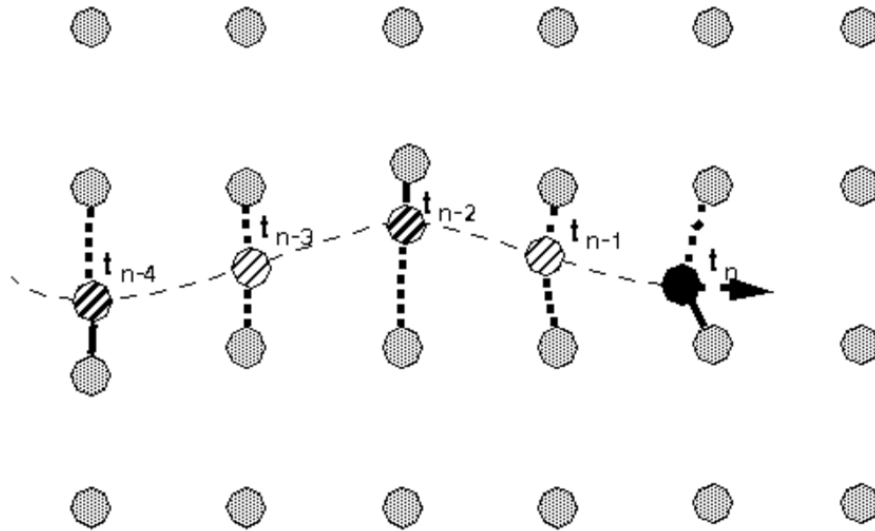


Figura 2.2: Esquema representativo de las diferencias entre los métodos MD y BCA. En los t_n procesos de interacción entre átomos, las simulaciones BCA solo tienen en cuenta los pares donde se produce la interacción más fuerte (representadas mediante una línea sólida), mientras que en MD también se consideran interacciones más débiles con otros vecinos (representadas con línea punteada) [44].

ahorro computacional que permite la simulación de sistemas de longitudes mayores (del orden de centenares de nanómetros) durante tiempos más largos (de microsegundos), y con una cantidad de entidades del orden de los 10^9 átomos, escalas en las que se pueden evaluar magnitudes de carácter macroscópico a partir del comportamiento microscópico del sistema. Dentro de esta técnica destaca la Dinámica Molecular Clásica (*Classical Molecular Dynamics*, CMD), que consiste en emplear un potencial empírico en las simulaciones MD, y se expone en detalle en la Sección 2.2.

- Método de Monte Carlo (MC). En lo que a evolución dinámica se refiere, las técnicas descritas anteriormente en esta sección son deterministas, esto es, que la dinámica del sistema puede ser completamente determinada si se conocen las condiciones iniciales (posiciones, velocidades y aceleraciones atómicas en el instante inicial). Por el contrario, las simulaciones de Monte Carlo toman un enfoque estadístico, en el que se emplean números aleatorios para determinar los eventos que ocurren, las partículas que se ven involucradas en ellos y las interacciones que éstas tienen, siguiendo una distribución determinada que depende de la naturaleza del sistema. Por lo tanto, este método es estocástico. Dentro de estos métodos, en microelectrónica

destacan el método de Monte Carlo Cinético (kMC) y la Aproximación de Colisiones Binarias (*Binary Collision Approximation*, BCA). El primer término se refiere a algoritmos de Monte Carlo diseñados para simular la dinámica de un sistema cuyos eventos se dan con una tasa de ocurrencia determinada, y emplea parámetros que caracterizan el sistema a nivel atómico. Por su parte, el método BCA es útil en simulaciones de implantación iónica, que se modelizan por un ión en régimen balístico moviéndose a través de un sólido, experimentando una serie de choques binarios independientes, considerando únicamente la colisión entre el ión energético y el átomo de la red más cercano a él en cada instante [42]. Después, el resultado de la implantación iónica se describe como el promedio estadístico de todos los iones simulados utilizando la aproximación de las colisiones binarias. Este proceso se esquematiza en la Figura 2.2. Este modelo es ampliamente extendido en electrónica, dada la importancia del proceso de implantación iónica para la fabricación de materiales dopados [43].

Teniendo las características y limitaciones de cada técnica de simulación en cuenta, se ha escogido emplear el método CMD en este TFG, dado que se pretenden simular procesos térmicos en redes cristalinas de miles de átomos, en escalas temporales del orden de los picosegundos.

2.2. Dinámica Molecular Clásica

Se denomina Dinámica Molecular Clásica (CMD) a la técnica de simulación computacional que emplea potenciales empíricos para modelizar la interacción entre átomos del sistema. Es el método empleado en este TFG, dado que es adecuado para simular los procesos que ocurren en la generación de daño de celdas de miles de átomos de materiales semiconductores, así como evaluar su proceso de difusión energética y sus características mecánicas, termodinámicas, estructurales y de cohesión, pese a que la CMD no considera efectos cuánticos o de carácter individual de los electrones que conforman los átomos.

2.2.1. Fundamentos

En el sistema a simular por CMD, las interacciones entre átomos vienen dadas por un potencial semi-empírico V , a partir del cual se evalúan las fuerzas a las que están sometidos dichos átomos. Este potencial se puede expresar como función de las posiciones \vec{r}_i de cada una de las N partículas que conforman el sistema, de modo que

$$V = V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N), \quad (2.1)$$

y las fuerzas sobre una partícula i se pueden calcular aplicando la segunda ley de Newton:

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}V(\vec{r}_i), \quad (2.2)$$

con lo que se pueden integrar las ecuaciones del movimiento de Newton para calcular la trayectoria de las partículas a lo largo del tiempo, dada una configuración inicial de posiciones y momentos de los átomos. Así,

$$m_i \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{p}_i, \quad y \quad \frac{d\vec{p}_i}{dt} = \vec{F}_i. \quad (2.3)$$

La integración de estas ecuaciones no se realiza de forma analítica, sino de forma numérica, discretizando las ecuaciones del movimiento y resolviendo cada paso temporal Δt en un proceso iterativo, como se esquematiza en la Figura 2.3. Se debe tener en cuenta que la discretización introduce un error que depende del algoritmo de integración y del paso temporal. Es común tomar este paso con un valor del orden de los femtosegundos. Uno de los métodos numéricos más extendidos para integrar las ecuaciones del movimiento de Newton es el algoritmo de Verlet [45]. Éste consiste en partir de las posiciones y velocidades en un instante inicial t_0 para calcular las posiciones y velocidades en un paso temporal posterior $t_1 = t_0 + \Delta t$ calculando

$$\vec{x}_i(t_1) = \vec{x}_i(t_0) + \vec{v}_i(t_0)\Delta t + \frac{1}{2} \frac{\vec{F}_i(t_0)}{m} \Delta t^2, \quad (2.4)$$

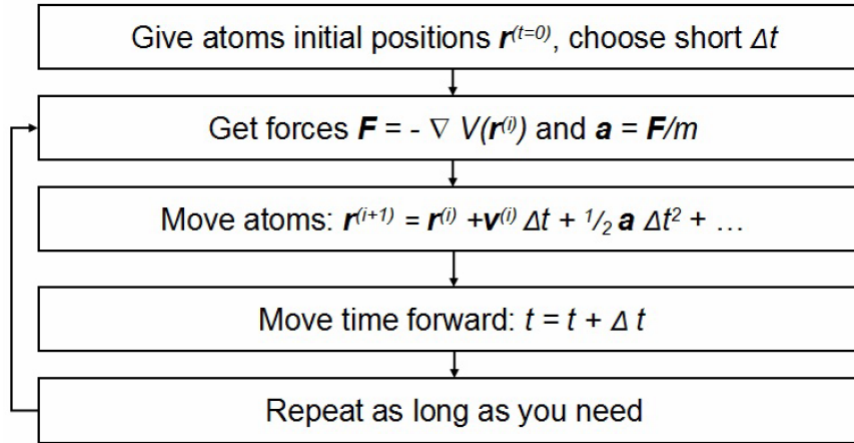


Figura 2.3: Esquema del algoritmo de Verlet empleado en CMD para simular el comportamiento de un sistema atómico [46].

e iterando el proceso para los siguientes pasos temporales. Conocidas las trayectorias y velocidades de las partículas, se pueden calcular las magnitudes físicas promediándolas en el tiempo. Para llevar a cabo las simulaciones, es común considerar el número de partículas, el volumen y la energía como constantes. Esto se conoce como conjunto microcanónico (*NVE ensemble*).

2.2.2. Celda de simulación

Los N átomos que conforman el sistema ocupan un espacio tridimensional en el que se desarrolla la simulación, conocido como celda de simulación. En este espacio, la densidad de la muestra ρ es constante, de modo que el volumen de la celda V_c es, simplemente,

$$V_c = \frac{N}{\rho}. \quad (2.5)$$

La celda puede tener diferentes formas, y, en el caso de simulaciones de sólidos, éstas pueden influir en las características de la muestra [47]. En este TFG se ha optado por trabajar siempre con celdas con estructura zinc-blenda y contorno cúbico como las representadas en la Figura 2.4.

2.2.3. Condiciones de contorno

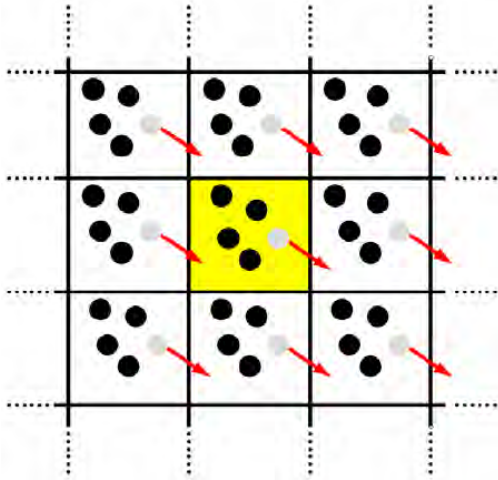


Figura 2.5: Representación de una celda de simulación bidimensional con PBC [49].

opuesto con el mismo momento lineal, manteniendo siempre constante el número total de átomos en la muestra, N . Esto se representa en la Figura 2.5. Así es posible evaluar el comportamiento de una única celda de simulación y eliminar virtualmente los efectos de borde, haciendo que el contorno de la celda no sea relevante en la simulación [50].

Al simular el comportamiento de un sistema atómico con CMD pueden aparecer efectos de borde indeseados debidos a la extensión finita de la celda de simulación. Una forma de eliminarlos es introducir condiciones de contorno periódicas (*Periodic Boundary Conditions*, PBC), las cuales serán empleadas en todas las simulaciones de este TFG. Estas condiciones se emplean para aproximar el comportamiento de una celda finita al que tendría si ésta fuera infinita, e imponen que, cuando un átomo sale de los límites de la celda de simulación, reaparece en su lado

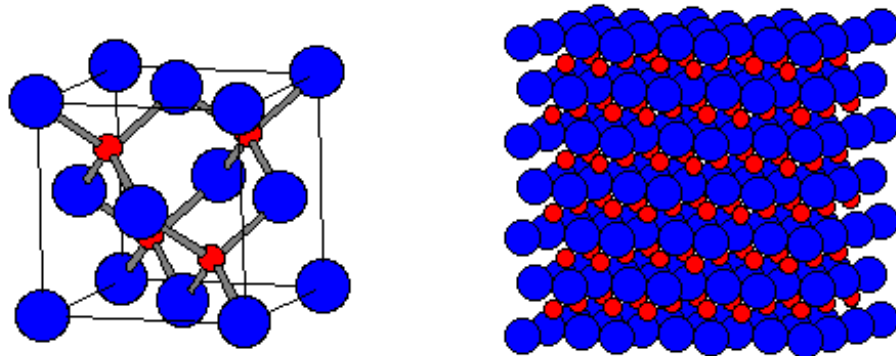


Figura 2.4: Representación de una celdilla unitaria tipo zinc-blenda con 18 átomos (izquierda) y de una celda de simulación cúbica formada por 3 celdillas unitarias zinc-blenda en cada dirección (derecha) [48].

2.2.4. Simulador LAMMPS

El simulador empleado en este TFG es LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) [51]. Es un código de programación para simulaciones de MD, tanto deterministas como estocásticas, desarrollado en el Laboratorio Nacional de Sandía de EE.UU., que puede ejecutarse en paralelo. Contiene los potenciales empleados para el modelado de las interacciones entre átomos, y ofrece la posibilidad de generar celdas de simulación con diferentes estructuras, condiciones de contorno y conjuntos estadísticos, siendo útil como simulador no solo a escala atómica, sino también a escala mesoscópica o continua. Este software ha sido empleado para investigaciones tan diversas como simular el comportamiento del torrente sanguíneo en capilares [52], estudiar el impacto de nanopartículas en un sustrato formado por billones de átomos [53], modelar la respuesta a la tracción de nanotubos de carbono [54], o evaluar las deformaciones por corte en cristales de cobre [55].

2.2.5. Recursos hardware

Todos los recursos computacionales utilizados para la realización de este estudio pertenecen al grupo de investigación Modelado Multi-Escala de Materiales de la Universidad de Valladolid (MMM) [30]. Se ha dispuesto de un *cluster* Linux llamado Beta, que cuenta con 16 nodos de 8 procesadores Intel Xeon a 2992 MHz y con 8 GB de memoria RAM cada uno. También cuenta con un disco duro de 8 TB de capacidad para el almacenamiento de los programas y resultados de las simulaciones, y con un sistema de alimentación ininterrumpida.

2.3. Potenciales empíricos

Para poder llevar a cabo simulaciones en sistemas de dimensiones mayores a las posibles con técnicas *ab initio*, es necesario reducir el coste computacional de las operaciones requeridas. En estas técnicas, la resolución de la ecuación de Schrödinger para obtener la descripción electrónica del sistema resulta muy costosa computacionalmente. Una manera de simplificar los cálculos es sacrificar la descripción electrónica, considerando solo la influencia efectiva de los electrones en los

átomos, mediante una expresión analítica que contenga la información de dicha influencia, esto es, un potencial empírico. Los potenciales empíricos deben ser diseñados *ex profeso* para describir adecuadamente las propiedades del sistema bajo estudio, para lo cual se han de escoger las funciones matemáticas y los parámetros adecuados, ajustándolos de forma que reproduzcan los resultados experimentales para las diferentes magnitudes que se deseen calcular.

En un sistema compuesto por N átomos, los potenciales empíricos se pueden escribir de forma general como

$$V = \sum_i^N V_1(\vec{r}_i) + \sum_{i,j>i}^N V_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i,j>i,k>j>i}^N V_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots, \quad (2.6)$$

donde el término $V_1(\vec{r}_i)$ representa el efecto de un campo externo aplicado a todo el sistema y $V_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ corresponde a la interacción de pares, que solo depende de la distancia entre los átomos i y j . El tercer término involucra ternas de partículas i, j, k en interacción. Para una gran cantidad de aplicaciones, el único término relevante es de interacción a pares, de forma que es razonable considerar únicamente dicho término, y escribirlo en función de las distancias interatómicas.

Existe una gran variedad de potenciales empíricos empleados en distintas áreas de la física y la química para reproducir propiedades de sistemas específicos. Los más simples y conocidos son el de Lennard-Jones [56] y el de Morse [57], diseñados para modelizar la física de los gases nobles y los sólidos iónicos. Sin embargo, para los enlaces covalentes, dominantes en los materiales semiconductores, potenciales como los de Stillinger-Weber (SW) [58] o los de Tersoff [12 - 19] son usados con frecuencia. A continuación se detallan los dos potenciales empíricos empleados en las simulaciones CMD de este TFG, así como el criterio aplicado para combinar ambos con el fin de describir tanto las colisiones energéticas como las interacciones a distancias de enlace.

2.3.1. Los potenciales de Tersoff

Existen tres variantes diferentes del potencial de Tersoff, conocidas como Tersoff 1 [12], 2 [59] y 3 [60, 19]. El primer potencial, Tersoff 1, tiene una expresión analítica diferente de los Tersoff 2 y 3.

Fue publicado en 1986 por Tersoff para describir las interacciones entre átomos de Si. Pese a ser pionero en ofrecer una descripción satisfactoria de la fase sólida del Si, presenta el inconveniente de ser incapaz de estabilizar por dinámica molecular la estructura tipo diamante del Si. Como en este TFG se pretenden estudiar los defectos en la fase diamante o zinc-blenda de diferentes semiconductores, no se hará uso de Tersoff 1 ni se expondrá en este apartado. En su lugar, se recurrirá a la expresión analítica de Tersoff 2 y 3. Estos potenciales tienen la misma forma matemática entre sí (sólo se diferencian en la selección de parámetros), son posteriores a Tersoff 1 y son capaces de reproducir adecuadamente la estructura diamante del Si. Además, con una ligera modificación propuesta por el propio Tersoff en 1989 [19], pueden ser adaptados para estudiar sistemas multicomponentes como el SiC o el SiGe.

La idea de que la fuerza de enlace que actúa sobre un átomo depende tanto de la posición de éste como del número de átomos vecinos a su alrededor motivó a Tersoff a desarrollar la expresión analítica empleada en Tersoff 2 y 3, que se basa en la forma de potencial de pares de Morse, incluyendo además efectos provocados por la presencia de múltiples átomos en el entorno del par bajo estudio.

La forma matemática de los potenciales de Tersoff 2 y 3 es

$$V_T = \sum_i^N V_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N V_{ij}, \quad (2.7)$$

con

$$V_{ij} = f_C(r_{ij}) (a_{ij} f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})), \quad (2.8)$$

donde V_i representa la energía potencial asociada al átomo i , y V_{ij} , la asociada al enlace del átomo i con el j . $f_R(r)$ y $f_A(r)$ son las partes del potencial de pares tipo Morse repulsiva y atractiva, respectivamente, cuyas expresiones son

$$f_R(r) = A e^{-\lambda_1 r}, \quad (2.9)$$

y

$$f_A(r) = -Be^{-\lambda_2 r}. \quad (2.10)$$

Los parámetros λ_1 y λ_2 han de ser escogidos adecuadamente para que V_{ij} dibuje un pozo de potencial con su mínimo en la distancia de enlace del par. Por su parte, f_C es una función de corte que limita el alcance del potencial, y se define como:

$$f_C(r) = \begin{cases} 1 & r < R - D, \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{(r-D)}{R}\right) & R - D \leq r \leq R + D, \\ 0 & r > R + D, \end{cases} \quad (2.11)$$

donde R y D son parámetros ajustables. Esta función de corte describe una caída suave desde 1 hasta 0 en una región cercana a R . Además, es continua y derivable para todo r .

En cuanto al término b_{ij} en la ecuación (2.8), éste se define como

$$b_{ij} = \left(1 + \beta^n \xi_{ij}^n\right)^{-\frac{1}{2n}}, \quad (2.12)$$

donde

$$\xi_{ij} = \sum_{k \neq i, j}^N f_C(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) e^{\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3}, \quad (2.13)$$

con

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta_{ijk})^2}, \quad (2.14)$$

donde n , β , c , d , h y λ_3 son parámetros ajustables.

En la ecuación (2.14), θ_{ijk} es el ángulo que forman los enlaces $i-j$ e $i-k$, como se ve en la Figura 2.6. ξ_{ij} actúa como una coordinación efectiva, dado que el sumatorio en su definición se evalúa para todos los átomos diferentes de i y de j . El término $g(\theta_{ijk})$ permite dar preferencia a enlaces formados en ángulos fijados por los parámetros, posibilitando diferentes estructuras reticulares estables energéticamente. Por otro lado, se puede observar que el papel que desempeña la exponencial en ξ_{ij} es el de apantallar la influencia de un átomo k vecino a i y a j . Así, el término b_{ij} hace que la fuerza

del enlace depende del número de átomos cercanos al enlace y de su posición. Es por ello que los potenciales de Tersoff 2 y 3 no son, en general, potenciales que describen interacciones por pares, sino que incluyen las influencias de otros átomos vecinos ajenos al par del enlace bajo evaluación.

Finalmente, el término a_{ij} en la ecuación (2.8) viene dado por

$$a_{ij} = \left(1 + \alpha^n \eta_{ij}^n\right)^{-\frac{1}{2n}}, \quad (2.15)$$

con

$$\eta_{ij} = \sum_{k \neq i, j}^N f_C(r_{ik}) e^{\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3}. \quad (2.16)$$

De nuevo, α es un parámetro ajustable, que habitualmente se toma como nulo. Nótese que a_{ij} y η_{ij} son análogos a b_{ij} y ξ_{ij} .

El potencial de Tersoff en sistemas multicomponentes

Como se menciona al inicio de esta subsección (2.3.1), los potenciales Tersoff 2 y 3 fueron ligeramente modificados para describir correctamente la interacción entre átomos de sistemas en los que hay varios elementos componentes [19]. Dicha modificación mantiene la forma analítica del potencial, pero toma α y λ_3 como nulos, por lo que a_{ij} es, simplemente, la unidad. Además, se

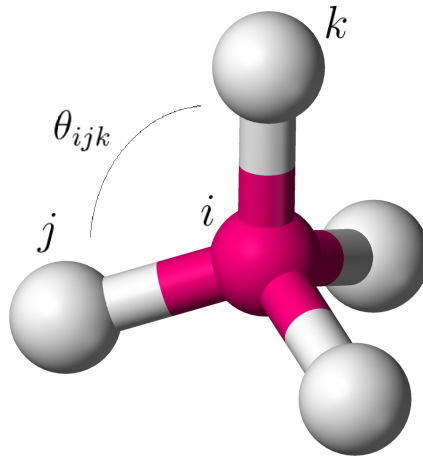


Figura 2.6: Representación de los enlaces $i - j$ e $i - k$ que forman el ángulo θ_{ijk} .

introduce un nuevo parámetro χ multiplicando a b_{ij} , dependiente de los elementos en el par de interacción, tal que $\chi = 1$ si los átomos son del mismo tipo. De esta forma b_{ij} es ahora

$$b_{ij} = \chi \left(1 + \beta^n \xi_{ij}^n\right)^{-\frac{1}{2n}}, \quad (2.17)$$

mientras que el resto de términos permanecen inalterados.

El cambio más notable en multicomponentes con respecto a los potenciales Tersoff 2 y 3 originales reside en el resto de parámetros. Sean X e Y los elementos que conforman el sistema multicomponente, los nuevos parámetros en el potencial de Tersoff se calculan como:

$$\lambda_1 = (\lambda_1^X + \lambda_1^Y)/2, \quad \lambda_2 = (\lambda_2^X + \lambda_2^Y)/2, \quad A = (A^X A^Y)^{1/2}, \quad B = (B^X B^Y)^{1/2}, \quad (2.18)$$

$$R = \left(\sqrt{(R^X - D^X)(R^Y - D^Y)} + \sqrt{(R^X + D^X)(R^Y + D^Y)} \right) / 2, \quad (2.19)$$

$$D = \left(\sqrt{(R^X + D^X)(R^Y + D^Y)} - \sqrt{(R^X - D^X)(R^Y - D^Y)} \right) / 2, \quad (2.20)$$

donde los superíndices de cada parámetro indican el elemento al que corresponden. Como se detalla en el Capítulo 3, en este TFG se han evaluado las constantes elásticas y propiedades de cohesión de redes cristalinas de Si, C, Ge, SiC y SiGe, comparándolas con resultados de referencia, con la finalidad de elegir los parámetros de Tersoff más adecuados para las estructuras zinc-blenda, con las que se trabaja.

Existen muchas parametrizaciones de este potencial que reproducen las propiedades de diferentes materiales. Así, se conocen conjuntos de parámetros de Tersoff para compuestos tan diversos como el nitruro de boro [61], el arseniuro de galio-aluminio [26 - 28] o el nitruro de galio y de indio [62], además de los ya mencionados SiGe [20] y SiC [21].

2.3.2. El potencial de Ziegler-Biersack-Littmark

Las posibilidades que ofrecen los potenciales empíricos no se restringen solo a la descripción de estados de equilibrio o cercanos a la energía de enlace, sino que también pueden aplicarse para describir las interacciones lejanas al equilibrio, como son las colisiones de alta energía, en las que los átomos pueden llegar a acercarse mutuamente hasta distancias muy reducidas, experimentando una fuerte repulsión. Los potenciales empíricos diseñados para describir las interacciones a distancias no demasiado alejadas del equilibrio no reproducen satisfactoriamente las características de las interacciones a altas energías, como ocurre con el potencial de Tersoff. Es por ello habitual recurrir a un intercalado de dos potenciales empíricos: uno que dé cuenta de las interacciones a distancias de equilibrio y otro diseñado para caracterizar las que se producen a distancias cortas [29]. Éste es el enfoque por el que se ha optado en este TFG, empleando el potencial de Tersoff para distancias cercanas a la de enlace, y el potencial de Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) para altas energías [63]. A continuación se describen las expresiones analíticas de el potencial ZBL.

Para describir las interacciones en colisiones energéticas, se recurre habitualmente al conocido como potencial de Coulomb apantallado general:

$$V(r) = \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \phi(r/a_u), \quad (2.21)$$

donde r es la distancia interatómica, Z_i y Z_j son los números atómicos de los núcleos que interactúan, e es la carga del electrón, ϵ_0 es la permitividad del vacío y $\phi(r/a_u)$ es una función moduladora conocida como función de apantallamiento [43]. a_u es un parámetro universal de apantallamiento, definido como

$$a_u = \frac{0,8854a_B}{Z_i^{0,23} + Z_j^{0,23}}, \quad (2.22)$$

siendo $a_B = 0,529 \text{ \AA}$ el radio de Bohr. Dentro de este modelo, existen multitud de funciones de apantallamiento, destacando la propuesta por Ziegler, Biersack y Littmark (ZBL) [63], que se expresa como

$$\begin{aligned}\phi_{ZBL}(r/a_u) = & 0,1818e^{-3,2r/a_u} + 0,5099e^{-0,9423r/a_u} \\ & + 0,2802e^{-0,4029r/a_u} + 0,02817e^{-0,2160r/a_u}.\end{aligned}\tag{2.23}$$

La expresión analítica del potencial ZBL es la dada en la ecuación (2.21) cuando se emplea la función de apantallamiento escrita en (2.23). Nótese que, con esta función de apantallamiento, el potencial ZBL es siempre repulsivo.

2.3.3. Conexión Tersoff-ZBL

En este TFG se ha optado por implementar en las simulaciones un potencial que intercala los modelos de Tersoff y ZBL, empleando Tersoff para distancias de enlace y ZBL para distancias cortas. Se ha recurrido a una función moduladora para conectar suavemente el potencial ZBL repulsivo con el de Tersoff, de forma que el potencial total en función de la distancia interatómica r_{ij} es:

$$V_{ij}^{TOT} = (1 - f_F(r_{ij}))V_{ij}^{ZBL} + f_F(r_{ij})V_{ij}^{Tersoff},\tag{2.24}$$

donde f_F es la función de intercalado tipo distribución de Fermi [64]

$$f_F = \frac{1}{1 + e^{-A_F(r_{ij}-r_C)}},\tag{2.25}$$

que depende de dos parámetros a ajustar: A_F y r_C . A_F controla cómo de abrupta es la transición entre los potenciales, mientras que r_C es una distancia de corte que limita el alcance del potencial ZBL. En la Figura 2.7 se representa el efecto de estos dos parámetros en la forma de la función. La elección de este tipo de interpolación viene motivada por la manera en la que LAMMPS tiene implementados estos potenciales [65].

Los parámetros A_F y r_C dependen del par de elementos en interacción, y se han escogido de manera que la contribución del potencial ZBL sea prácticamente nula para distancias interatómicas cercanas a la distancia de enlace, que la contribución del potencial de Tersoff sea prácticamente nula para distancias interatómicas cortas, y que la transición entre ambas regiones se produzca de forma

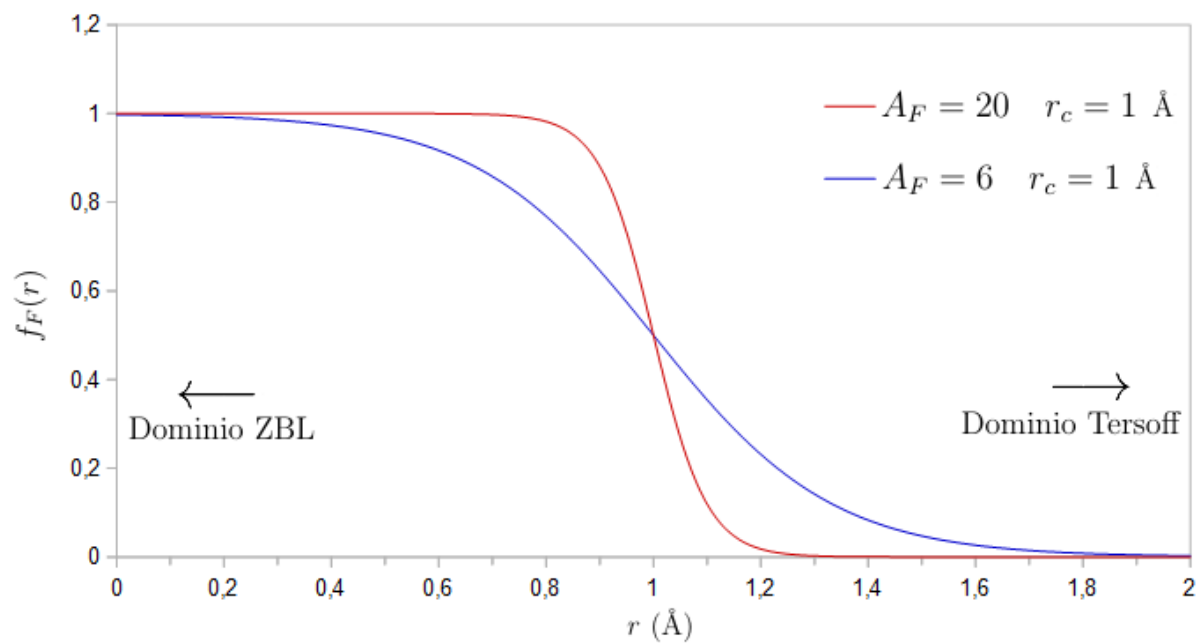


Figura 2.7: Ejemplo de funciones de Fermi para dos parámetros distintos de conexión.

suave, aprovechando para ello las distancias en las que la función del potencial ZBL y la de Tersoff se cruzan. En la Tabla 2.2 se muestran los parámetros A_F y r_C empleados para cada interacción en este TFG.

Interacción	Si-Si	C-C	Ge-Ge	Si-C	Si-Ge
A_F	14	14	10	14	10
r_C (Å)	0,65	0,35	1	0,5	0,95

Tabla 2.2: Parámetros de transición Tersoff-ZBL empleados en este TFG.

2.3.4. Selección de parámetros

La selección de los parámetros de Tersoff y de conexión Tersoff-ZBL se ha de realizar de forma que las propiedades de los semiconductores calculadas computacionalmente a partir de éstos reproduzcan adecuadamente los resultados experimentales. Existe una gran variedad de conjuntos de parámetros estudiados tanto para el Si [12 - 60], como para el C [19, 66, 67, 68] y el Ge [19], diseñados para describir estos semiconductores en diferentes fases. De éstos, se han escogido los indicados para reproducir correctamente las propiedades estructurales y las constantes elásticas experimentales de

las fases zinc-blenda de los semiconductores. En el Capítulo 3 se presentan los cálculos de dichas propiedades obtenidos a partir de los diferentes potenciales posibles, y se explica la elección de los parámetros a emplear en este TFG.

2.4. Tipos de simulaciones

Para caracterizar los mecanismos de generación de daño, se han generado computacionalmente celdas cúbicas de Si, C, Ge, SiC y SiGe con estructura zinc-blenda, de diferentes tamaños y con condiciones de contorno periódicas. Se ha elegido trabajar en conjunto microcanónico. Una vez conocidas las constantes elásticas y las propiedades de cohesión de estas celdas (proceso que se detalla en el Capítulo 3), se llevan a cabo tres tipos de simulaciones diferentes en las que se genera daño en la red. El primer tipo consiste en otorgar energía cinética a un sólo átomo de la celda, con dirección inicial de velocidad aleatoria, y dejar que el sistema evolucione mediante CMD, con la red cristalina estática en el instante inicial. Estas simulaciones se dan, por tanto, en un régimen balístico. En el segundo tipo de simulaciones, reciben energía un conjunto de átomos cercanos entre sí, llamados *esferas*, y se evalúa el movimiento de las partículas del sistema hasta su enfriado. En el tercero, todos los N átomos de la celda reciben energía, imitando un proceso de fusión en toda la celda. Las simulaciones de esferas representan una transición entre las simulaciones balísticas y las de fusión.

2.4.1. *Recoils* aislados

Un *recoil* es un átomo energético que actúa como un proyectil dentro de la red, transmitiendo su movimiento al sistema y provocando colisiones y daño. En las simulaciones de *recoils* aislados, se parte de un instante inicial en el que la red cristalina se encuentra a 0 K , perfectamente ordenada, y se aporta energía a un átomo de la red, escogido aleatoriamente, dándole una velocidad correspondiente a su energía con dirección también aleatoria. Se dan energías cinéticas a los *recoils* de entre 5 y 75 eV, dependiendo del material. Después, se simula mediante CMD la evolución del sistema, en la que el momento lineal se va transfiriendo al resto de átomos. Cuando la energía máxima por átomo promedio presente en el sistema baja de 0,08 eV/átomo, se considera que la etapa de colisiones

ha terminado y que la celda se ha termalizado, y se detiene la simulación. Una vez terminado el proceso, el resultado es una red con átomos desplazados, cuyas posiciones se deben analizar para caracterizar el dañado que se haya podido generar. Esto se representa en la Figura 2.8.

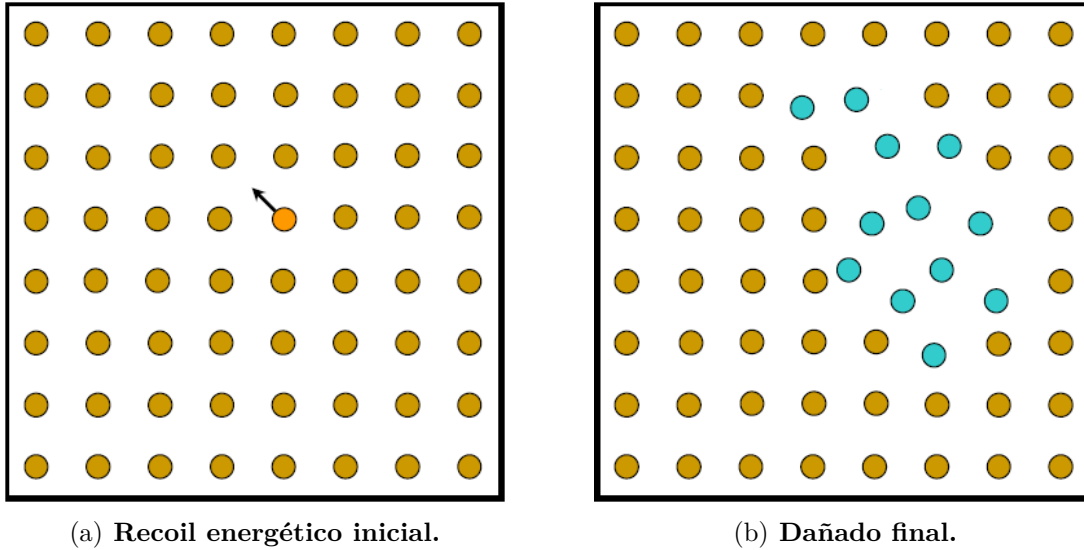


Figura 2.8: Esquema de las condiciones iniciales (a) y de la configuración final (b) en las simulaciones de *recoils* aislados mediante CMD [69].

Se han llevado a cabo simulaciones de este tipo para Si, C, Ge, SiC y SiGe, para diferentes energías del átomo inicial, y repitiendo cada simulación 200 veces para obtener resultados estadísticamente significativos, dado el carácter aleatorio de las condiciones iniciales. En el caso del SiC y el SiGe, se han distinguido dos tipos de simulaciones: unas en las que el *recoil* es un átomo de Si y otras en las que el *recoil* es un átomo de C o de Ge, respectivamente.

2.4.2. Esferas

En el ámbito de este TFG, se denominan *esferas* a conjuntos de átomos colindantes agrupados de manera que forman esferas en la estructura del cristal. En las simulaciones de esferas, siempre partiendo de una red cristalina perfecta, se otorgan energías de entre 5 y 25 eV/átomo a un colectivo de este tipo, cada átomo con la misma energía cinética, pero con direcciones de velocidad aleatorias.

El proceso para seleccionar las esferas a las que dar energía consiste en elegir un átomo en el medio de la red, que será el centro de la esfera. Después, se van seleccionando los vecinos de

éste en todas las direcciones, completando capas de átomos contiguos para formar la esfera. Si el número de átomos a seleccionar es tal que no se completa la última capa de la esfera, se eligen al azar, de aquellos que formarían la última capa, los átomos que se moverán. Finalmente, de forma análoga a las simulaciones de *recoils*, se simula la evolución temporal mediante CMD hasta que la celda se termaliza, obteniendo una red con átomos desplazados. Este proceso se esquematiza en la Figura 2.9. Se han llevado a cabo simulaciones para esferas con diferentes energías y cantidades de átomos inicialmente energéticos. Las dimensiones de las celdas de simulación también cambian con el tamaño y energía de las esferas, ya que la red ha de ser lo suficientemente grande como para asegurar la difusión energética necesaria. Ésta ha de ser tal que la temperatura de la muestra pueda llegar a bajar de los 70 K , aproximadamente. La simulación se para cuando la celda se ha termalizado. Se considera que la termalización se ha producido cuando la energía cinética máxima por átomo promedio baja de los $0,08\text{ eV}$. De nuevo, se repite cada simulación 200 veces para obtener resultados significativos estadísticamente, debido a la aleatoriedad de las condiciones iniciales.

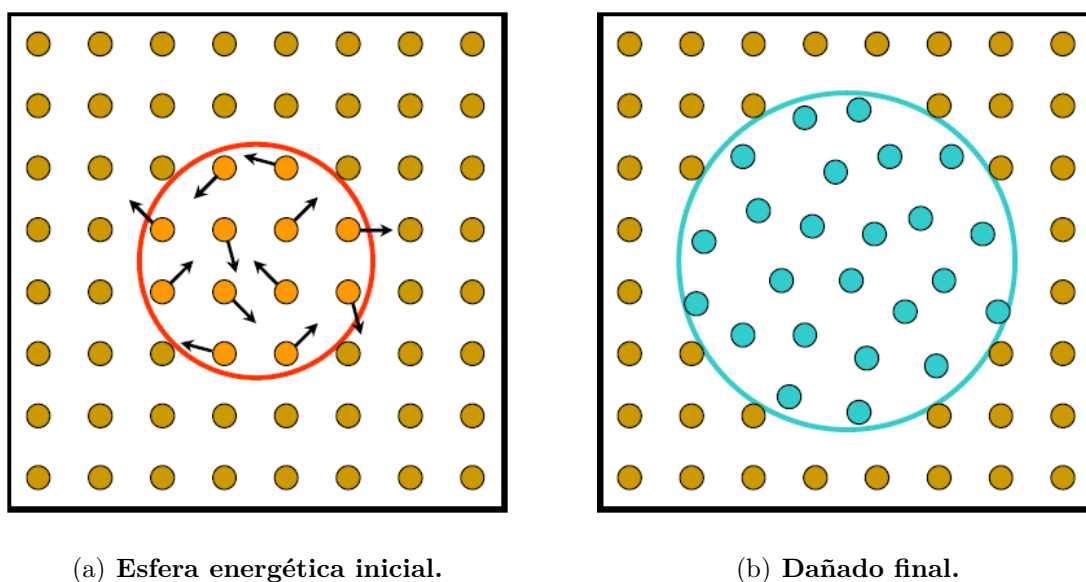


Figura 2.9: Esquema de las condiciones iniciales (a) y de la configuración final (b) en las simulaciones de esferas mediante CMD [69].

2.4.3. Procesos de fusión

En este tipo de simulaciones se aporta una cantidad menor de energía que en las simulaciones anteriores a todos los átomos de la red, de entre 0,1 y 4 eV/átomo, con módulos de velocidades aleatorios, partiendo de una disposición estática y sin defectos. Las celdas de simulación tienen 4096 átomos. La energía depositada no puede difundirse debido a las condiciones periódicas impuestas. Esta vez la simulación se detiene cuando se han evaluado un número de pasos suficientes como para que las energías cinéticas y potenciales medias por átomo se hayan estabilizado en el tiempo [70]. El objetivo de estas simulaciones es reproducir procesos de fusión en los que toda la celda es calentada uniformemente. Esto sirve para caracterizar las temperaturas y las distribuciones de energías cinéticas y potenciales de los semiconductores en función de la energía cinética inicial aportada a los átomos.

2.4.4. Programas empleados en las simulaciones

Con el fin de obtener un buen promedio estadístico en los resultados, y dado el carácter aleatorio impuesto a las condiciones iniciales, cada simulación para una configuración determinada de las variables de entrada de las simulaciones de *recoils* y esferas se ha repetido 200 veces. Teniendo en cuenta que estas simulaciones se han realizado para cinco materiales diferentes, y para multitud de configuraciones, se estima que se han llevado a cabo alrededor de 100000 simulaciones en total para la realización de este TFG. Por ello, se han escrito programas en diferentes lenguajes de programación, con el fin de automatizar las tareas necesarias para ejecutar dicho volumen de simulaciones.

En código LAMMPS se han escrito los archivos de entrada que describen cómo debe realizarse el cálculo de la evolución de las redes a simular. Un ejemplo de código para simulaciones de esferas en LAMMPS se incluye en el apéndice A. Los programas en C se han usado para generar las celdas, configurar las condiciones iniciales y analizar los resultados de cada simulación. En el apéndice B se incluyen dos ejemplos de programas en este lenguaje: uno para crear redes cristalinas perfectas para un parámetro de red dado, y otro para configurar las carpetas en las que se ejecutan las simulaciones. Además, se han usado otros dos programas en C, cedidos por el grupo MMM, que no se incluyen en el apéndice, dado que fueron creados anteriormente a este TFG y solamente se han adaptado

para adecuarse a los objetivos del mismo. Sus ejecutables se titulan *Generar_esferas.x* y *analisis.x*, y sirven para establecer las condiciones iniciales de los átomos energéticos en las simulaciones, y analizar los resultados de éstas, respectivamente. Finalmente, en el apéndice C se incluyen los *scripts* en comandos de Linux (código Bash) empleados para automatizar las tareas de ejecución y análisis de las simulaciones. En el CD en el que se entrega la memoria se incluyen estos programas y archivos.

2.5. Caracterización de la generación de daño

2.5.1. Tipos de defectos

La ordenación cristalina perfecta es un concepto útil para caracterizar los materiales a partir de su estructura atómica, pero la forma en la que se colocan los átomos en un cristal real difiere de la que se espera a partir del arreglo cristalino ideal. Estas diferencias se entienden como defectos en la red. Así, existen tres tipos fundamentales de defectos puntuales, que serán analizados en las simulaciones de este TFG. Éstos son las *vacantes*, los *átomos intersticiales* y los *átomos sustitucionales* y *antisitios* [4].

- Vacantes. Son puntos de red vacíos en la estructura cristalina en los que debería haber un átomo, atendiendo a disposición atómica ideal.
- Átomos intersticiales. Son átomos que ocupan lugares que no están definidos en la red cristalina ideal, colocándose entre átomos que sí responden a su posición ideal.

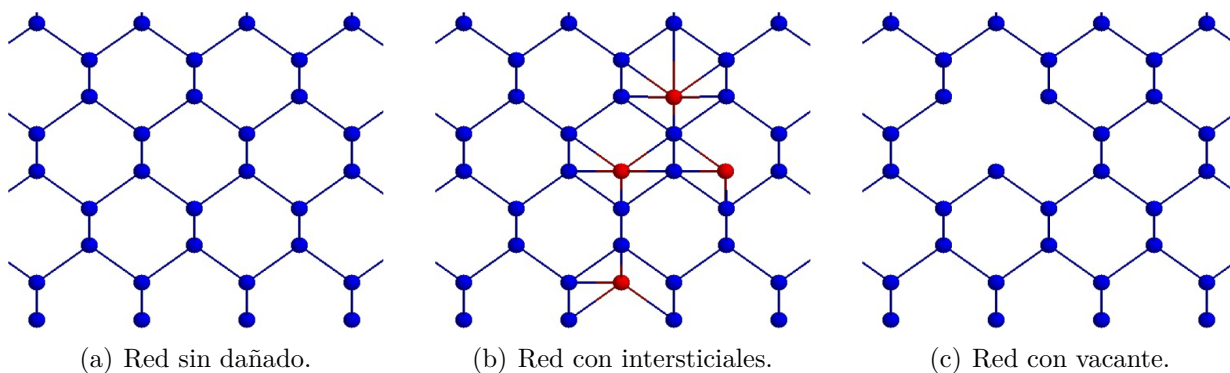


Figura 2.10: Ejemplos de defectos puntuales en redes tipo diamante.

- Átomos sustitucionales y antisitios. Estos defectos consisten en la sustitución de un átomo de la estructura cristalina por otro. Cuando el material está compuesto por dos elementos diferentes, y el átomo sustitucional es del elemento recíproco, entonces se le denomina antisitio.

En general, en una simulación CMD, estos defectos puntuales no siempre se presentarán aislados, sino que es común que existan regiones de la celda en las que se produzcan varios intersticiales, vacantes o antisitios cercanos entre sí. Es entonces cuando estos defectos no se consideran puntuales. Un ejemplo de región desordenada de este tipo son las regiones amorfas producidas por la fusión local durante procesos de dopaje de semiconductores.

2.5.2. Evaluación del daño

Tanto en simulaciones de *recoils* como de esferas, interesa conocer el daño generado en la red tras el enfriamiento. Para ello, se emplea un método basado en el promedio temporal de las coordenadas espaciales atómicas [71], capaz de detectar los defectos puntuales explicados en el apartado anterior. Este método ha sido empleado satisfactoriamente para estudiar procesos de recristalización en Si [72] y para evaluar las propiedades energéticas de intersticios en Si [18]. Consiste en promediar las coordenadas espaciales de los átomos en 1000 pasos temporales desde el instante en el que se llega al enfriamiento de la celda. Este cálculo elimina las vibraciones térmicas y permite conocer las posiciones de equilibrio. Durante los pasos sobre los que se promedia no se dan reordenaciones atómicas ni cambios en la temperatura. Una vez obtenidas las posiciones promedio, se comparan éstas con la red original estática sin defectos. Si un átomo de la red tratada está a $0,25 \text{ \AA}$ o menos de su posición en la correspondiente red perfecta, se considera que éste se encuentra asociado a dicha posición. De no ser así, se considera que el átomo está desplazado (*Disordered Atom*, DA) y, por tanto, contribuye al daño en la red. El procedimiento de este programa de análisis se esquematiza en la Figura 2.11.

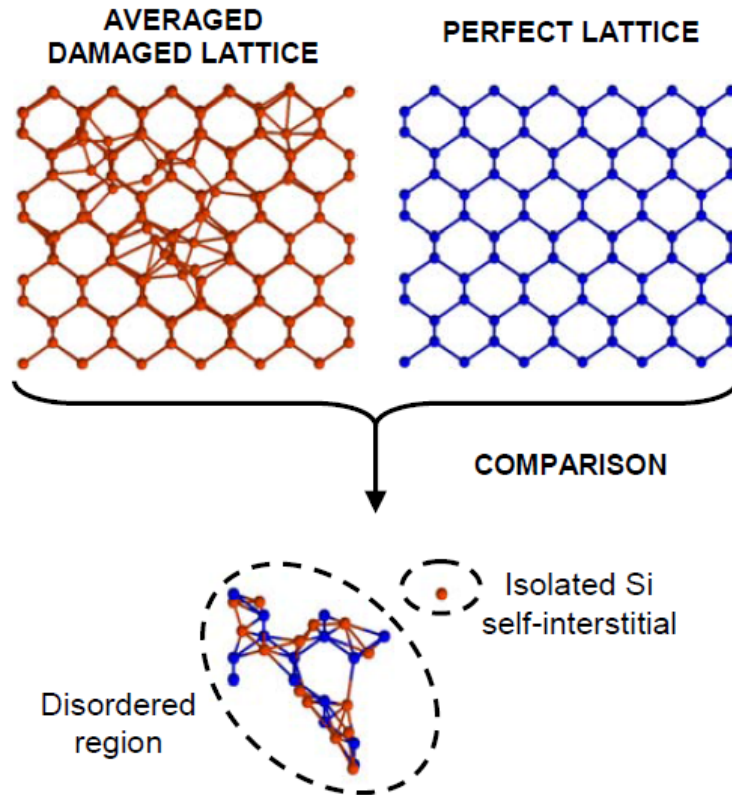


Figura 2.11: Ejemplo de la identificación de un defecto puntual aislado y una región desordenada tras comparar las posiciones atómicas promedio con la red perfecta [69]. El resultado de la comparación permite distinguir los átomos que están fuera de sus posiciones de red (imagen inferior, en rojo) y las posiciones de red que no tienen átomo (imagen inferior, en azul).

2.5.3. Modelo de generación de daño

En este TFG se ha empleado un modelo basado en simulaciones CMD diseñado por el grupo de investigación MMM para caracterizar los mecanismos de generación de daño en Si [22], aplicado también al Ge [29], que se contextualiza y describe en este apartado.

Si se emplea el modelo BCA en simulaciones en las que se pretende estudiar la generación de daño en redes cristalinas, solo se consideran interacciones a pares entre el ión energético y su vecino más cercano. Dentro de este modelo, existen dos enfoques para modelizar la generación de daño. El primero consiste calcular la trayectoria del ión energético y asumir que, cuando una determinada cantidad de energía E_{dep} se deposita en una región de la red que recibe el impacto,

el número de átomos desplazados n que se generan viene dado por la fórmula de Kinchin-Pease modificada (KP) [73, 74]:

$$n = 0,42 \frac{E_{dep}}{E_d}, \quad (2.26)$$

donde E_d es una energía umbral de desplazamiento atómico, constante para cada material. Para el Si, se estima que esta energía de desplazamiento está entre los 10 y los 30 eV [16, 17], aunque habitualmente se toma como 15 eV [75]. Este modelo describe algunos procesos de implantación iónica satisfactoriamente, pero obvia la descripción atómica del dañado y no es capaz de reproducir efectos no lineales que aparecen durante la implantación de iones moleculares.

El segundo punto de vista, dentro del modelo BCA, consiste en tener en cuenta no solo la trayectoria del ión energético, sino también los efectos que producen los *recoils* generados a su paso, llevando a cabo una descripción completa de las cascadas de átomos en movimiento que se forman por estos impactos [42]. En este caso, se considera que un átomo se desplaza de su posición reticular cuando recibe en una colisión una energía mayor que su energía umbral de desplazamiento E_d . En estas transferencias con energías superiores a E_d , el átomo que recibe la energía puede crear una cascada de átomos en movimiento, dejando atrás una vacante, y produciendo un defecto intersticial allí donde éste se frena. Así, se crean pares de Frenkel (una vacante junto con su correspondiente intersticial). Pese a ofrecer una buena descripción de los procesos de implantación de iones ligeros [72], este modelo no reproduce estructuras de dañado más complejas, como las regiones amorfas observadas experimentalmente en procesos de implantación con iones pesados [76]. Para modelizar correctamente la generación de estas regiones, es necesario recurrir a métodos de simulación más sofisticados, como los CMD [72, 77, 78].

Con todo, se puede considerar que mientras los átomos energéticos se encuentren en un régimen balístico (con energías superiores a E_d), se pueden simular empleando BCA. Sin embargo, cuando su energía disminuye, comienzan a ser relevantes interacciones múltiples entre átomos, no recogidas en un modelo binario como es BCA. De hecho, mediante simulaciones CMD [70] y *ab initio* [79] se

ha comprobado que las transferencias energéticas entre átomos con energías menores a E_d pueden generar regiones amorfas. Este mecanismo de generación de daño puede ser entendido como el resultado de una competencia entre la fusión de la red cristalina y la difusión de la energía depositada. Así, para formar una región amorfa mediante este proceso, es necesario que la energía depositada permanezca concentrada en una determinada región durante un tiempo suficiente como para fundir el cristal en dicha región antes de que la energía se disperse. Bajo este mecanismo, se ha demostrado que cuando la energía no puede difundirse, basta con aportar una densidad energética de tan solo 1 eV/átomo a una región de Si para generar una región amorfa [70], mientras que esta densidad energética necesaria es mayor si la energía es capaz de difundirse, como ocurre en las cascadas de átomos descritas anteriormente.

En la Figura 2.12 se representa el número final de DA promedio frente a la densidad de energía. Estas gráficas corresponden a diferentes cantidades de átomos energéticos en simulaciones de esferas por CMD en redes de Si con estructura tipo diamante [22], similares a las que se realizan en este TFG. Se puede observar que al emplear CMD, existe producción de daño para densidades de energía inferiores a los 15 eV/átomo que marca el umbral en simulaciones BCA. Además, la cantidad de DA promedio al final de las simulaciones aumenta con la cantidad de átomos energéticos iniciales en las esferas y con la densidad energética depositada.

Sea ρ la densidad de energía depositada en eV por átomo, y N_{DA} el número de DA promedio final, los datos se pueden ajustar a una línea recta que responde a la ecuación

$$N_{DA} = \alpha(N)\rho - \beta(N), \quad (2.27)$$

donde $\alpha(N)$ y $\beta(N)$ son constantes que dependen del número inicial de átomos en movimiento, N . El punto de corte de estas líneas rectas con el eje horizontal es $E_T(N) = \beta(N)/\alpha(N)$, y determina la densidad de energía cinética mínima necesaria para desordenar átomos, con un N dado. Para energías por debajo de este valor, no es posible provocar daño permanente en la red cristalina, por lo que este valor actúa como un umbral de densidad energética para la producción de daño. El cociente $\beta(N)/\alpha(N)$ disminuye conforme N aumenta, y tiende a 1 eV/átomo cuando N tiende

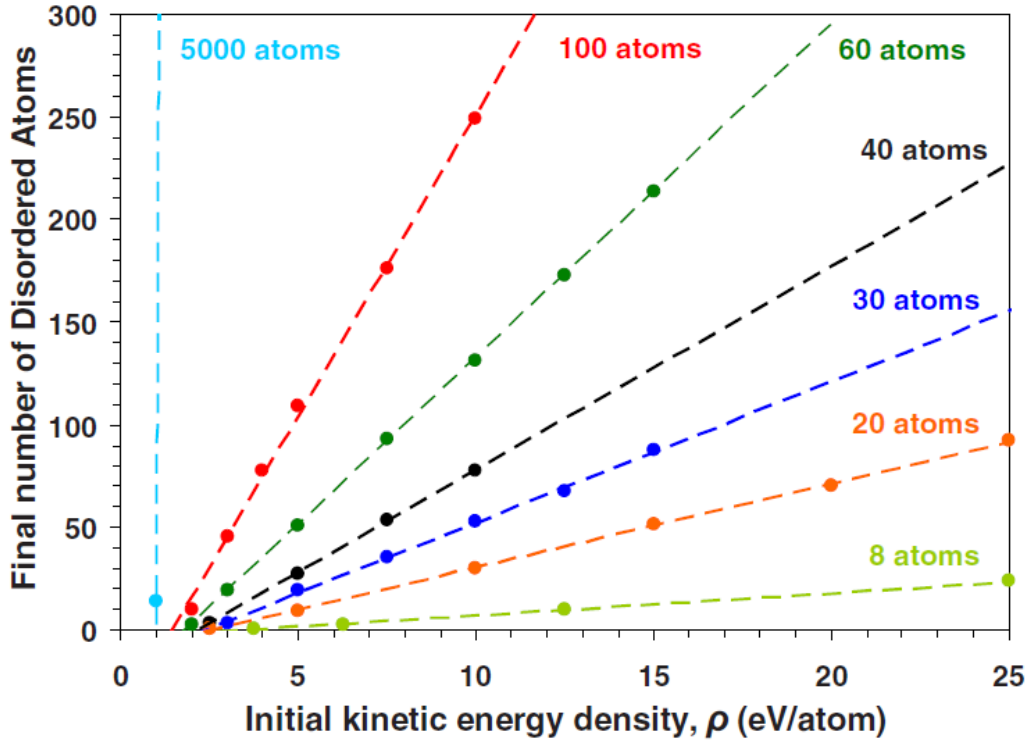


Figura 2.12: Cantidad final de DA promedio en simulaciones CMD como función de la densidad de energía cinética inicial depositada en diferentes cantidades de átomos agrupados en esferas para el Si. Las rectas se corresponden con regresiones lineales a los datos [22].

a infinito en el Si, como se observa en la Figura 2.13, en acuerdo con el límite inferior mencionado anteriormente necesario para generar daño si se impide la difusión energética [70] (si N tiende a infinito no es posible dispersar energía al exterior del sistema).

Por su parte, la pendiente de las líneas de ajuste en la Figura 2.12 aporta información sobre la eficiencia en la producción de daño. Así, se define el coste de generación del daño, D_C , como $D_C(N) = N/\alpha(N)$. Tiene unidades de eV/átomo, y también disminuye con N , esta vez tendiendo a 0 cuando N tiende a infinito (cuando todos los átomos reciben energía que no se puede difundir, no es necesario aportar más energía que la necesaria en la fusión para desordenar toda la celda).

Empleando las definiciones de $E_T(N)$ y de $D_C(N)$ desarrolladas anteriormente, la ecuación (2.27) [22] puede ser escrita como

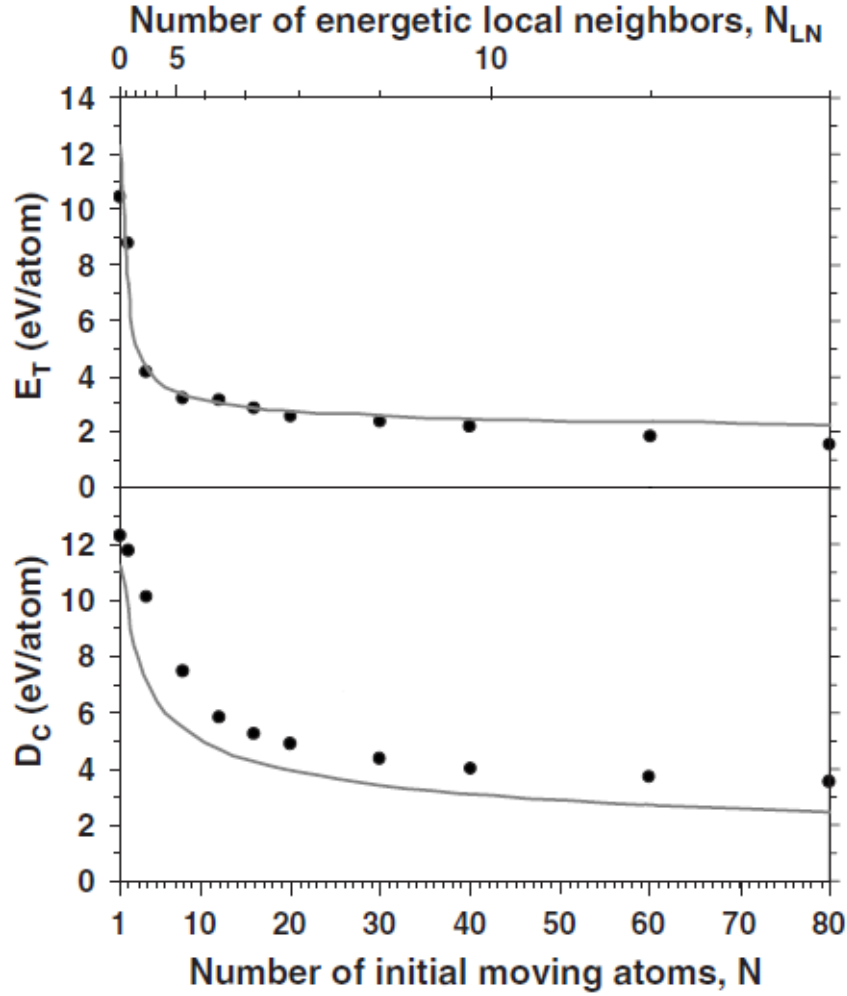


Figura 2.13: Densidad de energía umbral E_T (gráfica superior) y coste de generación del daño D_C (gráfica inferior) en Si, como función del número inicial de átomos en movimiento, calculadas a partir de las rectas en la Figura 2.12 (eje inferior). Las líneas corresponden a E_T y D_C como función del número de átomos vecinos energéticos (eje superior) [22].

$$N_{DA} = \frac{N \cdot \rho - N \cdot E_T(N)}{D_C(N)}. \quad (2.28)$$

Nótese la similitud con la fórmula KP (2.26): según la explicación anterior, $N \cdot \rho$ es la energía depositada al sistema (E_{dep}), y D_C es análogo al término $E_d/0,42$. La diferencia reside en el término $N \cdot E_T(N)$, lo cual se interpreta como que, según este modelo, para generar daño y provocar un estado inicial de desordenación es necesario superar antes un umbral de energía $N \cdot E_T(N)$. Como el entorno cristalino de la región donde comienza el daño puede forzar a los átomos desordenados a volver a sus posiciones correspondientes en la red perfecta, se necesita una cantidad adicional de

energía para desplazar a los átomos permanentemente. Así, D_C controla el número final de DA que se generan con esa energía a mayores. Conforme N aumenta, tanto E_T como D_C decrecen, porque es más fácil sacar a un átomo de su posición de red perfecta y descolocarlo permanentemente cuando los átomos que lo rodean poseen también una cantidad considerable de energía cinética.

Por otro lado, también resulta útil el concepto de *eficiencia en la generación de dañado* e_{ff} [22], esto es, el número de átomos desplazados por átomo energético inicial. Se puede obtener de la ecuación (2.28), de forma que

$$e_{ff} = \frac{N_{DA}}{N} = \frac{\rho - E_T(N)}{D_C(N)}. \quad (2.29)$$

Finalmente, se deduce que la densidad energética necesaria para desordenar todos los átomos energéticos iniciales es $\rho(N_{DA} = N) = E_T(N) + D_C(N)$, esto es, la suma de la densidad de energía umbral correspondiente y el coste de generación del dañado. Para el caso $N = 1$ en Si, la energía necesaria para desplazar permanentemente el átomo energético de su posición inicial ha sido calculada mediante este modelo, obteniendo un valor de 22 eV [22], dentro del rango experimental para la energía umbral de desplazamiento del Si (entre 10 y 30 eV [16, 17]). En el caso opuesto, en el que N tiende a infinito, la densidad energética es 1 eV, lo que corresponde a un proceso de fusión.

Capítulo 3

Propiedades fundamentales del SiGe y SiC

Para caracterizar los mecanismos de generación de daño en SiC y SiGe es necesario contar con potenciales empíricos que describan correctamente las propiedades fundamentales de los materiales estudiados. Así, en este TFG se han llevado a cabo simulaciones CMD con el objetivo de evaluar los parámetros de red que estabilizan las celdas y calcular las constantes elásticas de las fases zinc-blenda del Si, C, Ge, SiC y SiGe.

Como se menciona en la Sección 2.3.1, existen multitud de parametrizaciones del potencial de Tersoff. En el caso de los semiconductores que nos ocupan, Tersoff diseñó cuatro parametrizaciones distintas para el Si, llamadas Si(A) [12], Si(B) [59], Si(C) [60] y Si(D) [19]; otras tres para el C (C(1) [66], C(2) [67], C(3) [80]), y una para el Ge [19]. La parametrización Si(A) fue desarrollada para el potencial Tersoff 1, que, según lo explicado en la sección 2.3.1, no estabiliza la red diamante de Si, por lo que no es útil para este trabajo. La parametrización Si(B) presenta el inconveniente de no reproducir las propiedades elásticas del Si en fase diamante tan satisfactoriamente como lo hacen Si(C) y Si(D) [60]. Finalmente, Si(C) y Si(D) tienen diferencias mínimas entre sí, y ambas describen adecuadamente las propiedades del Si cristalino. En este TFG se ha elegido emplear la parametrización Si(C) porque ha sido empleada anteriormente para estudiar la generación de daño

en Si cristalino con buenos resultados [69, 70, 22]. Por otro lado, Tersoff empleó los parámetros del carbono para el estudio de su fase amorfa, pero también era capaz de reproducir adecuadamente las propiedades estructurales y elásticas del carbono diamante [66]. Por tanto, de los tres conjuntos de parámetros existentes, se deben escoger los que más se adapten a las necesidades de este trabajo. Dado que C(3) es una versión más refinada de C(2) [80], el problema reside en optar por C(1) o por C(3). Para ello, se han evaluado las propiedades del C y del SiC con ambas parametrizaciones del C. Se escogerá la parametrización del C que mejor se ajuste a los resultados experimentales.

Con el fin de preparar los materiales sobre los que realizar las simulaciones para calcular los parámetros de red y constantes elásticas y comparar con resultados experimentales, se han generado celdas de simulación cúbicas de Si, C, Ge, SiC, y SiGe con estructura zinc-blenda (véase la Figura 2.4) y 4096 átomos. Estas estructuras parten de un estado sin defectos (*red perfecta*). Se ha elegido trabajar con condiciones de contorno periódicas (PBC), y en conjunto microcanónico (*NVE ensemble*), lo cual implica que el número de partículas, el volumen y la energía se mantienen siempre constantes durante las simulaciones.

3.1. Parámetros de red

En esta sección se detallan los resultados de la evaluación de los parámetros de red l_{red} que estabilizan las estructuras atómicas de los diferentes semiconductores. Para llevar a cabo dicha evaluación, se han generado celdas de Si, C, Ge, SiC, y SiGe a 0, 300, 1200 y 1900 K, con distintos parámetros de red, y se ha calculado la energía potencial por átomo y la presión sobre la celda para cada parámetro de red.

La energía interna U de un sistema se escribe como [81]

$$U = TS - pV + \sum_i \mu_i N_i, \quad (3.1)$$

donde T es la temperatura, S la entropía, p la presión, V el volumen, μ_i los potenciales químicos y N_i las cantidades molares de los i constituyentes del sistema. De esta manera, si $T = 0$ K, no

hay energía cinética asociada al movimiento térmico de las partículas, y la red más estable será aquella con un parámetro de red cuya celda correspondiente se encuentre a presión nula, lo cual coincide con la que tiene energía potencial mínima. Si, por el contrario, $T > 0 K$, el parámetro de red que estabiliza la muestra (celda a presión nula), no coincide con el que minimiza la energía potencial del sistema. Así, conociendo la presión sobre cada estructura creada con un parámetro de red diferente, se puede calcular aquél que estabilice la red cristalina. Con el objetivo de mostrar cómo se han realizado los cálculos descritos en este apartado, se ejemplifica el proceso para el caso del SiGe, siendo el procedimiento análogo para el resto de semiconductores.

En la Figura 3.1 se representa la energía potencial total por átomo frente al parámetro de red de diferentes estructuras cristalinas de SiGe a $0 K$. La curva alcanza un mínimo en $l_{red}(T = 0) = 5,542 \text{ \AA}$, parámetro de red para el cual la celda a $0 K$ es estable.

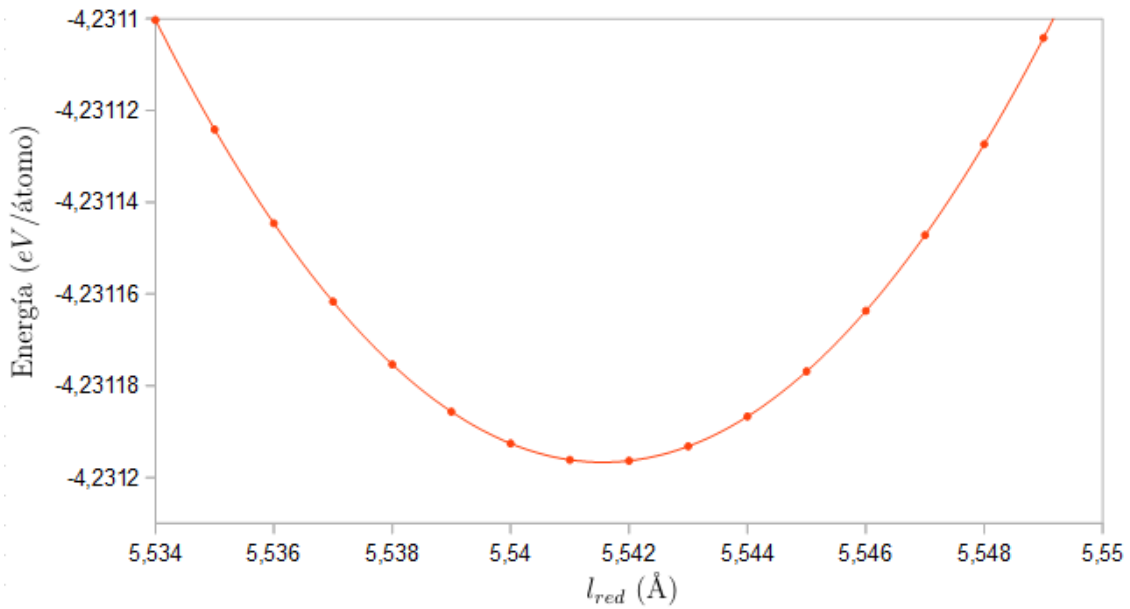


Figura 3.1: Energía potencial total por átomo en función del parámetro de red para el SiGe a $0 K$. Los puntos se corresponden con resultados del cálculo, la línea es para guiar al ojo.

El cálculo de las presiones para redes con distinto l_{red} a diferentes temperaturas se presenta en la Figura 3.2. En el caso $T = 0 K$, el parámetro de red que minimiza la energía potencial es el mismo que hace nula la presión. Esto no ocurre para temperaturas mayores. Se observa que conforme la

temperatura aumenta, la muestra tiende a dilatarse y, por tanto, el parámetro de red que estabiliza la estructura (para el cual la presión es nula) crece con la temperatura.

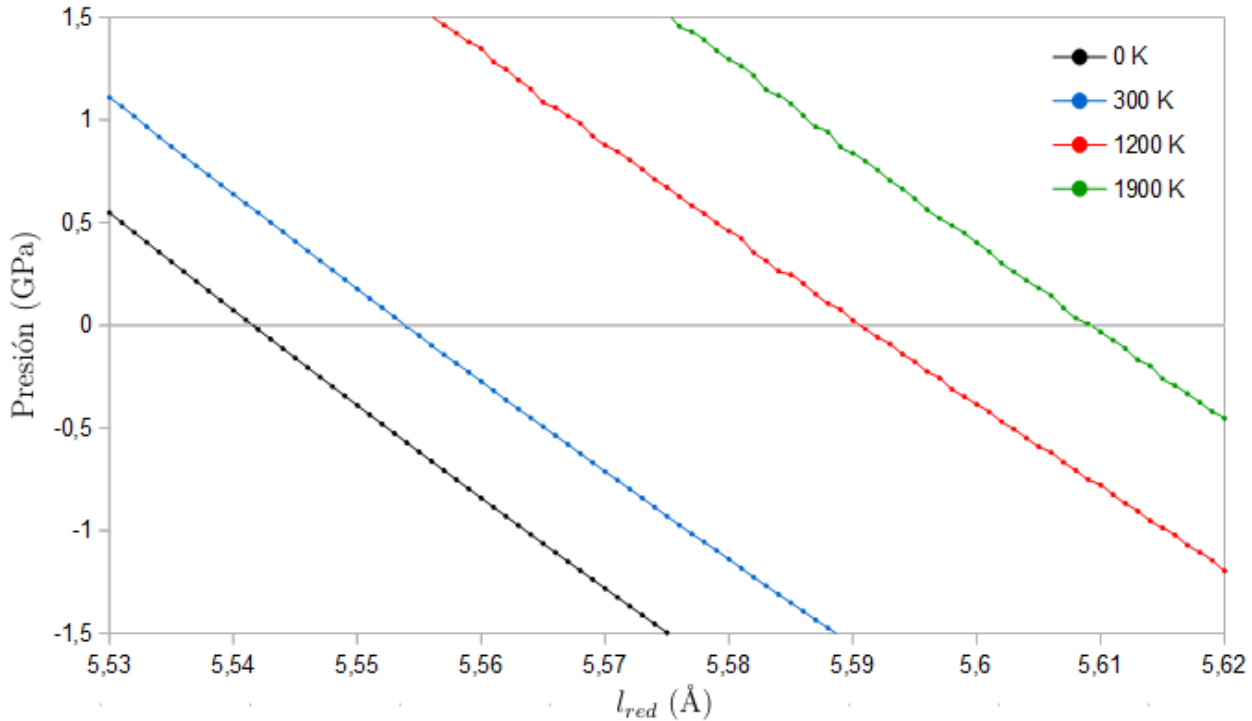


Figura 3.2: Presión en función del parámetro de red para el SiGe a diferentes temperaturas. Los puntos se corresponden con resultados del cálculo, la línea es para guiar al ojo.

De forma análoga a lo expuesto para el SiGe, se han calculado los parámetros de red que estabilizan la estructura atómica para el resto de materiales con los conjuntos de parámetros de Tersoff descritos anteriormente, y los de ZBL presentados en la Tabla 2.2. Los resultados de estos cálculos se detallan en la Tabla 3.1, así como las correspondientes medidas experimentales.

De los resultados de la Tabla 3.1 se deduce que hay un buen acuerdo entre los cálculos computacionales y las medidas experimentales de los parámetros de red para todas las parametrizaciones del potencial de Tersoff, excepto en el caso del SiC con los parámetros C(3) del carbono. Esto se debe a que esta parametrización fue diseñada con el objetivo de describir las propiedades del SiC en su fase amorfa [80], mientras que en este TFG se estudia su fase zinc-blenda. Los valores de l_{red} obtenidos en este trabajo para el SiC (cuando se emplea la parametrización C(1)) y el SiGe están en buen acuerdo con los cálculos realizados por Goumri-Said *et al.* por CMD con potenciales de Tersoff [20].

T (<i>K</i>)	0	300	1200	1900	Experim. (300 <i>K</i>)
Si	5,432	5,442	5,474	5,490	5,431 [82]
C(1)	3,566	3,572	3,601	3,619	3,567 [83]
C(3)	3,565	3,562	3,579	3,593	3,567 [83]
Ge	5,656	5,671	5,714	5,734	5,658 [84]
SiC(1)	4,321	4,332	4,348	4,371	4,360 [85]
SiC(3)	4,493	4,502	4,542	4,571	4,360 [85]
SiGe	5,542	5,554	5,591	5,609	5,448 [86]

Tabla 3.1: Parámetros de red (l_{red}) en Amstrongs (Å) calculados mediante CMD para diferentes temperaturas.

3.2. Constantes elásticas

Las constantes elásticas son parámetros que caracterizan el comportamiento elástico de un material. En notación tensorial, las relaciones entre tensión (σ) y deformaciones (ε) en el límite de las deformaciones infinitesimales se pueden expresar como

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl}, \quad (3.2)$$

donde i, j, k, l denotan direcciones espaciales. C_{ijkl} es el tensor de rigidez, cuyas componentes son las constantes elásticas. σ_{ij} son las componentes del tensor de tensiones simétrico, y ε_{kl} , las del tensor de deformaciones simétrico. C_{ijkl} se puede escribir, en su forma más general, como una matriz 6×6 , con 21 elementos distintos como máximo. Sin embargo, para sistemas cúbicos como los que aquí se tratan, es posible reducir a 3 las componentes independientes de este tensor [87], y, por tanto, sintetizar las propiedades elásticas del material en dichas constantes. Éstas se denotan como $C_{11} = C_{1111}$, que relaciona ε_{11} con σ_{11} ; $C_{12} = C_{1122}$, que asocia ε_{22} con σ_{11} ; y $C_{44} = C_{2323}$, que da la relación de proporcionalidad entre ε_{23} y σ_{23} .

En este TFG se han calculado las constantes elásticas del Si, C, Ge, SiGe y SiC, a 0 *K* y a 300 *K* mediante CMD. Para ello, se simulan deformaciones de la celda en diferentes direcciones, en régimen

lineal, aplicando un esfuerzo cortante, para después calcular el cambio en el tensor de tensiones, una vez aplicado el esfuerzo. En la Tabla 3.2 se presentan los resultados de dichas evaluaciones.

Puesto que en este TFG no se profundiza en el estudio de las constantes elásticas, sino en los defectos estructurales en las redes, un error relativo de un 30% como máximo entre el cálculo computacional y el valor experimental es aceptable, teniendo en cuenta los resultados obtenidos para la parametrización Si(C), ampliamente utilizada para estudiar la generación de dañado en Si. Sin embargo, como se puede observar en la Tabla 3.2, la parametrización C(3), pese a describir satisfactoriamente las propiedades elásticas del carbono, no reproduce adecuadamente las del SiC, al observarse diferencias de hasta un 77,8% con respecto a las medidas en laboratorio. Esto, junto a la discrepancia en los cálculos del parámetro de red para el SiC con parametrización C(3) discutida en la sección anterior, permite concluir que la parametrización C(3) no es válida para este estudio, y se elige, por tanto, el conjunto de parámetros C(1). En la Tabla 3.3 se presentan los parámetros para los potenciales de Tersoff empleados en este TFG del Si (parametrización Si(C)), C (parametrización C(1)) y Ge.

Como se puede observar, las diferencias relativas entre los cálculos por CMD y las medidas experimentales tienden, en general, a ser mayores cuando se comparan los datos de simulaciones a 300 K con los experimentos que cuando se equiparan aquéllos a 0 K . Esto es más significativo en el caso del SiC y del SiGe. Esto puede deberse a que los potenciales empíricos están diseñados para reproducir las características del material real a 300 K en simulaciones a 0 K .

Temperatura	Experim.	Simulación	Dif. rel.	Simulación	Dif. rel.
	300 K	0 K	0 K	300 K	300 K
Si [82]					
C_{11}	166	143	17,9 %	138	20,3 %
C_{12}	64	75	13,8 %	73	12,3 %
C_{44}	80	69	15,9 %	66	21,2 %
C(1) [83]					
C_{11}	1081	1074	0,6 %	1056	2,6 %
C_{12}	129	102	26,8 %	106	17,0 %
C_{44}	579	642	9,7 %	627	7,8 %
C(3) [83]					
C_{11}	1081	1008	7,3 %	971	11,1 %
C_{12}	129	169	23,6 %	177	29,9 %
C_{44}	579	462	25,2 %	442	30,8 %
Ge [84]					
C_{11}	131	146	10 %	131	0,0 %
C_{12}	49	50	2,3 %	45	8,9 %
C_{44}	67	68	2,2 %	64	4,7 %
SiC(1) [85]					
C_{11}	390	437	10,8 %	571	31,7 %
C_{12}	142	118	20,3 %	185	23,2 %
C_{44}	256	257	0,4 %	325	21,2 %
SiC(3) [85]					
C_{11}	390	310	26,0 %	299	30,4 %
C_{12}	142	107	32,8 %	108	31,5 %
C_{44}	256	150	71,1 %	144	77,8 %
SiGe [86]					
C_{11}	147	143	3,2 %	136	8,1 %
C_{12}	56	58	3,7 %	57	1,8 %
C_{44}	73	70	4,8 %	65	12,3 %

Tabla 3.2: Constantes elásticas en GPa obtenidas por CMD en este TFG. Se han calculado las diferencias relativas con los correspondientes valores experimentales en las columnas *Dif. rel.*

	Si [60]	C [19, 66]	Ge [19]
A (eV)	1830,8	1393,6	1769
B (eV)	471,18	346,74	413,23
λ_1 (\AA^{-1})	2,4799	3,4879	2,4451
λ_2 (\AA^{-1})	1,7322	2,2119	1,7047
β	$1,10 \cdot 10^{-6}$	$1,5724 \cdot 10^{-7}$	$9,0166 \cdot 10^{-7}$
n	0,78734	0,727510	0,75627
c	100390	38049	106430
d	16,2180	4,3484	15,6520
h	-0,59826	-0,57058	-0,43884
R	2,85	1,95	2,95
D	0,15	0,15	0,15
		$\chi^{\text{Si-C}} = 0,9776$	$\chi^{\text{Si-Ge}} = 1,000609944$

Tabla 3.3: Parámetros de Tersoff empleados en este TFG para el silicio, carbono y germanio. Los parámetros para el SiC y el SiGe se calculan a partir de éstos mediante las relaciones (2.18), (2.19) y (2.20).

Capítulo 4

Generación de daño

En este capítulo se emplea el método CMD y el proceso de análisis descrito en el apartado 2.5.2 para estudiar las características y la cantidad del daño generado en las redes cristalinas durante los procesos de fusión local y enfriamiento en *recoils* y esferas detallados en la Sección 2.4. Para las simulaciones de fusión en toda la celda, se realiza un estudio de la distribución energética en la celda.

4.1. *Recoils* aislados

Un parámetro que caracteriza los mecanismos de generación del daño en un material es la energía umbral de desplazamiento E_d , cuyo significado físico se detalla en el apartado 2.5.3. Para estudiar esta energía, se han realizado simulaciones de *recoils*, en las que se evalúa la energía mínima requerida para desplazar un átomo de su posición reticular. La metodología de este tipo de simulaciones se detalla en el apartado 2.4.1. En estas simulaciones, la energía cinética aportada al *recoil* varía entre los 5 y 75 eV, en función del material sobre el que se vaya a calcular E_d , pero ésta es tal que se asegura que el daño en la red se da en una región cercana al punto inicial del que parte el movimiento del átomo energético. Nótese que los valores de E_d aquí obtenidos son un promedio de los E_d direccionales en todas las posibles orientaciones, ya que la velocidad inicial del *recoil* tiene dirección aleatoria en cada una de las 200 simulaciones que se han realizado.

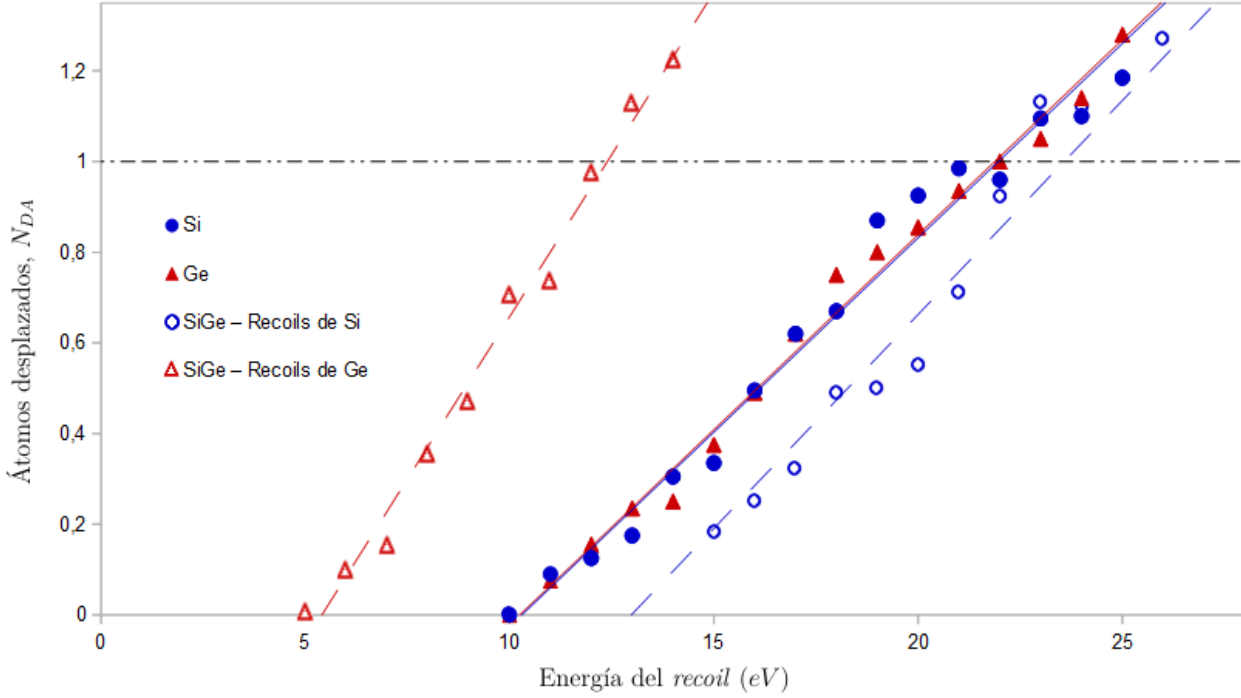


Figura 4.1: Número promedio de átomos desordenados, N_{DA} , en función de la energía del *recoil* para el Si, Ge, y SiGe. Se distinguen las simulaciones de SiGe en las que el recoil es de Si de aquellas en las que el recoil es de Ge. La línea negra corresponde a la generación de un solo átomo desordenado. Las líneas de colores son rectas de regresión a los datos.

4.1.1. *Recoils* en SiGe

En la Figura 4.1 se representa el número promedio de átomos desordenados para cada energía del *recoil* en Si, Ge y SiGe. Para todos los materiales, las energías cinéticas bajas no producen daño en la estructura cristalina, puesto que el movimiento introducido es lo suficientemente tenue como para ser asimilado por la red a modo de vibraciones atómicas, sin defectos permanentes. Es a partir de un valor concreto de energía (E_T) cuando comienza a generarse daño. Para energías iniciales superiores a E_T , el número de átomos desplazados aumenta linealmente con la energía cinética dada al *recoil*, llegando a desplazar permanentemente un átomo en promedio ($N_{DA} = 1$). La energía inicial del *recoil* para la que esto ocurre es la energía umbral de desplazamiento, E_d . Para profundizar en el análisis, se han calculado las energías mínimas para la generación de daño, E_T , y los costes de producción de daño, D_C . De acuerdo con el modelo desarrollado en el apartado 2.5.3, los datos presentados en la Figura 4.1 pueden ser ajustados a una recta cuya forma responde a la de la ecuación (2.28) particularizada para $N = 1$ (el único átomo energético es el *recoil*), esto es,

$$N_{DA} = \frac{\rho - E_T}{D_C}. \quad (4.1)$$

De acuerdo con este modelo, se deduce que, en el caso $N_{DA} = N = 1$, se recupera la definición de energía umbral de desplazamiento, y $E_d = E_T + D_C$. En la Tabla 4.1 se presentan los resultados del cálculo computacional de estas magnitudes en Si, Ge, y SiGe.

	E_T (eV/átomo)	D_C (eV/átomo)	E_d (eV/átomo)
Si	10,3	11,7	22,0
Ge	10,2	11,7	21,9
SiGe - <i>Recoils</i> de Si	13,5	10,3	23,8
SiGe - <i>Recoils</i> de Ge	5,0	8,2	13,2

Tabla 4.1: Energías de caracterización del dañado en simulaciones de *recoils* para Si, Ge, y SiGe.

Las energías umbrales de desplazamiento E_d obtenidas en este trabajo para Si y Ge están en buen acuerdo con las estimaciones teóricas y experimentales de referencia, que se encuentran entre los 10 y los 30 eV para el Si [88], y entre 15 y 30 eV para el Ge [89]. Además, los valores de E_T y D_C son prácticamente iguales para Si y Ge, lo cual indica que la eficiencia en la generación del dañado es muy similar en ambos elementos con la parametrización elegida para el potencial de Tersoff. Estos resultados están en la línea de los presentados en el Capítulo 3, en el que se describen unas propiedades elásticas y cohesivas muy similares entre el Si y el Ge (véanse las Tablas 3.1 y 3.2). Sin embargo, experimentalmente se ha observado una mayor facilidad para la generación de dañado en Si que en Ge, dada la mayor conductividad térmica y menor punto de fusión del segundo elemento frente al primero [29]. Las diferencias obtenidas se atribuyen a la parametrización escogida del potencial de Tersoff.

Sin embargo, los valores calculados para la aleación de SiGe difieren de los de sus correspondientes materiales monocomponentes, y se observan grandes diferencias entre el dañado producido por los *recoils* de Si y de Ge. Así, los defectos se generan para energías mucho menores y de forma más eficiente cuando el átomo con energía cinética en la red de SiGe es de Ge, mientras que, cuando el *recoil* es de Si, la estructura cristalina se muestra mucho más resistente. El origen de este fenómeno

se atribuye a la diferencia entre las masas atómicas del Si y del Ge. En la estructura zinc-blenda del SiGe, el primer vecino de un átomo es siempre del elemento contrario al propio átomo, de manera que, en el caso de que el *recoil* sea de Ge, es más probable que el primer impacto se produzca con un átomo de Si. Ahora, por simplicidad, se supone el caso de una colisión clásica frontal entre un *recoil* de Ge y un átomo estático de Si en la que la energía transferida es máxima. La conservación del momento impone entonces:

$$m_{Ge}v_{Ge} = m_{Si}v_{Si} \quad \longrightarrow \quad v_{Si} = \frac{\sqrt{2m_{Ge}E_{Ge}}}{m_{Si}}, \quad (4.2)$$

donde m_{Ge} y m_{Si} son las masas del Ge y Si, respectivamente, v_{Ge} es la velocidad inicial del átomo de Ge, v_{Si} es la velocidad final del átomo de Si, y E_{Ge} es la energía cinética inicial aportada al *recoil* de Ge. Si, por el contrario, el *recoil* fuera de Si, un razonamiento análogo lleva a calcular la velocidad resultante en el vecino de Ge como:

$$v_{Ge} = \frac{\sqrt{2m_{Si}E_{Si}}}{m_{Ge}}. \quad (4.3)$$

Para comparar las diferencias entre los procesos con *recoils* de Si y de Ge, se toma el caso en el que la energía cinética inicial aportada es la misma tanto para Si como para Ge. Entonces, el cociente entre (4.2) y (4.3) resulta

$$\frac{v_{Si}}{v_{Ge}} = \left(\frac{m_{Ge}}{m_{Si}}\right)^{3/2}. \quad (4.4)$$

Como las masas molares del Si y del Ge son $m_{Si} = 28,09$ g/mol y $m_{Ge} = 72,64$ g/mol respectivamente, el cociente de las velocidades es

$$\frac{v_{Si}}{v_{Ge}} \simeq 4. \quad (4.5)$$

Esto implica que cuando un *recoil* de Ge impacta frontalmente sobre un átomo estático de Si, el átomo de Si se mueve con una velocidad unas 4 veces mayor de la que se movería un átomo de Ge estático tras recibir el choque frontal de un *recoil* de Si. En última instancia, esto se traduce en una mayor eficiencia en la generación de dañado cuando el *recoil* es de Ge, ya que el desplazamiento

atómico se ve favorecido. La situación aquí expuesta corresponde a un caso extremo en el que la eficiencia en la generación de daño es máxima. En las simulaciones llevadas a cabo en este trabajo, las direcciones iniciales de velocidad del *recoil* son aleatorias, y la colisión entre átomos no es, en general, frontal, ni la transferencia de energía cinética es siempre total. Sin embargo, el planteamiento ilustra las razones físicas por las que cabe esperar una eficiencia en la generación de daño de hasta 4 veces mayor cuando el *recoil* es de Ge frente a la obtenida cuando éste es de Si. Como se puede comprobar en los datos de la Tabla 4.1, se necesita una energía aproximadamente 1,8 veces mayor para desplazar un átomo de su posición reticular inicial cuando se otorga la energía cinética a un átomo de Si que cuando ésta se da a un átomo de Ge.

4.1.2. *Recoils* en SiC

En la Figura 4.2 se muestra el comportamiento del número de átomos desplazados promedio a medida que aumenta la energía inicial aportada al *recoil* para el Si, C, y SiC. Hay una diferencia notable al comparar con el caso del SiGe, y es que ahora la generación del daño es diferente en los materiales monocomponentes: el C es mucho más reticente a iniciar desplazamientos atómicos que el Si, lo que se traduce en una E_T mayor en C. Esto se debe, en parte, a las constantes elásticas mayores que presenta el C, lo que lo hacen más rígido y resistente frente a desplazamientos atómicos (véase la Tabla 3.2). Una vez superado el umbral E_T , las pendientes para ambas estructuras son muy similares, lo cual indica que, una vez se ha aportado la suficiente energía como para desplazar átomos de sus posiciones atómicas, la eficiencia en la generación del daño es similar. Esto se puede comprobar en la Tabla 4.2: E_T es mucho mayor para el C que para el Si, pero D_C es prácticamente igual en ambos elementos.

	E_T (eV/átomo)	D_C (eV/átomo)	E_d (eV/átomo)
Si	10,3	11,7	22,0
C	32,5	10,4	42,9
SiC - <i>Recoils</i> de Si	22,7	34,4	57,1
SiC - <i>Recoils</i> de C	40,0	34,0	74,0

Tabla 4.2: Energías de caracterización del daño en simulaciones de *recoils* en eV/átomo para Si, Ge, y SiGe.

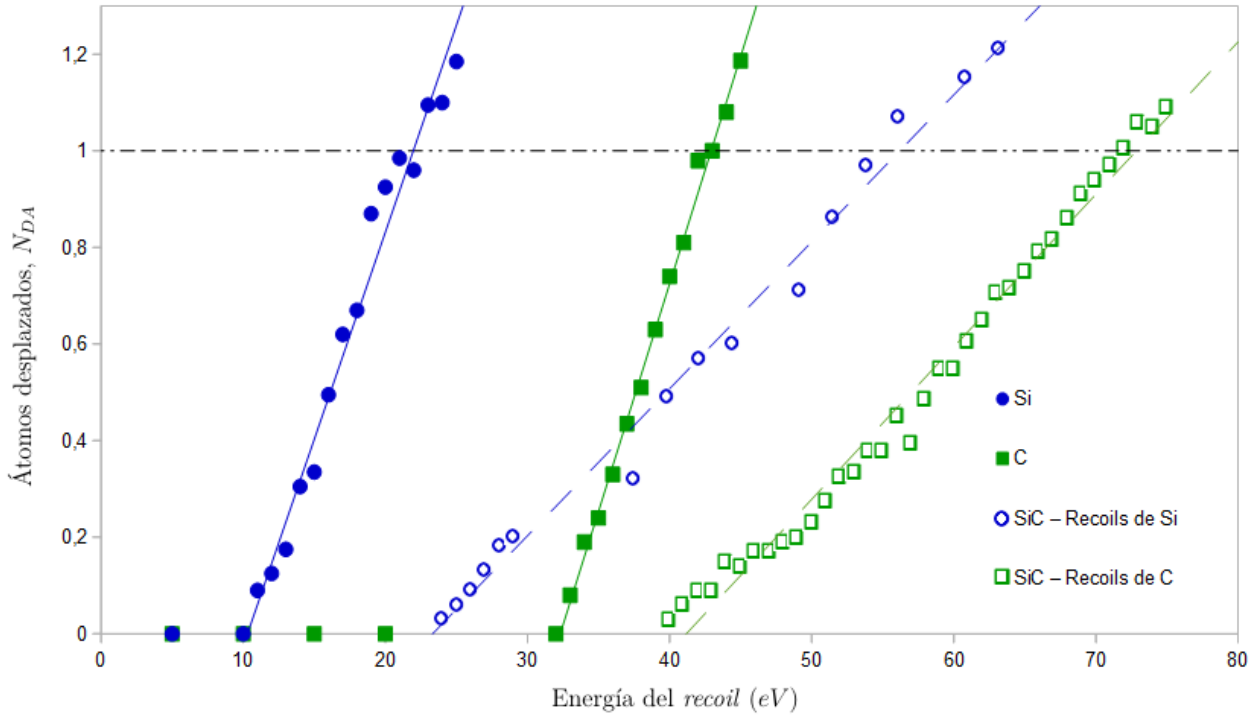


Figura 4.2: Número promedio de átomos desordenados, N_{DA} , en función de la energía del *recoil* para el Si, C, y SiC. Se distinguen las simulaciones de SiC en las que el recoil es de Si de aquellas en las que el recoil es de C. La línea negra punteada corresponde a la generación de un solo átomo desordenado. Las líneas de colores son rectas de regresión a los datos.

La energía de desplazamiento E_d calculada para el C en este trabajo se encuentra dentro de los rangos de resultados experimentales y teóricos de referencia, que oscilan entre los 35 y 80 eV [90]. Por otro lado, el mismo fenómeno descrito anteriormente para el SiGe se da también en el SiC: la energía umbral de desplazamiento, E_d , es menor cuando el *recoil* es de C que cuando es de Si, en este caso debido a un aumento en E_T , dado que los costes del dañado son similares. Las masas molares de estos elementos son $m_{Si} = 28,09$ g/mol y $m_C = 12,01$ g/mol, con lo que el Si es ahora el átomo más pesado, a diferencia de lo que ocurría en SiGe. El cociente de las velocidades en los choques frontales de estos átomos es, según la ecuación (4.4),

$$\frac{v_C}{v_{Si}} = \left(\frac{m_{Si}}{m_C}\right)^{3/2} \simeq 3,5. \quad (4.6)$$

Es decir, cabe esperar una energía umbral de desplazamiento menor cuando el *recoil* es de Si que cuando es de C, dado que es más fácil generar dañado cuando el átomo que se mueve inicialmente

es el más pesado de los dos. En este trabajo, se ha calculado una E_d para los átomos energéticos de C de aproximadamente 1,3 veces la correspondiente al Si, en acuerdo con este razonamiento.

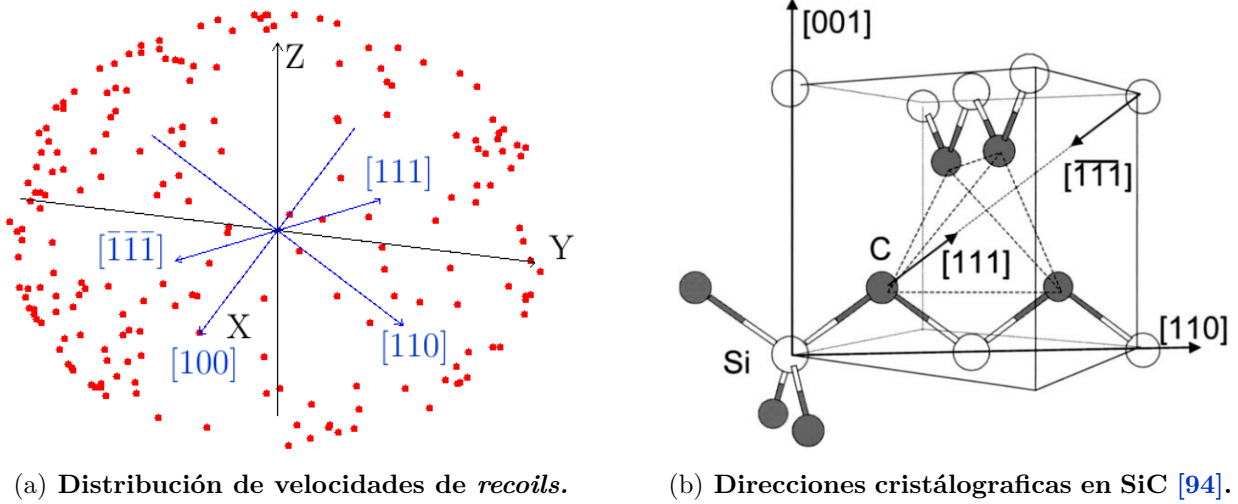


Figura 4.3: Izquierda: representación de las direcciones de las velocidades iniciales de los *recoils* para el cálculo de E_d en SiC. En azul, las direcciones cristalográficas escogidas para la evaluación de E_d en las referencias [91 - 94, 68]. En rojo, las direcciones de velocidad iniciales aleatorias escogidas en las simulaciones de SiC con *recoils* de Si en las que se ha generado daño. Derecha: referencia de las direcciones cristalográficas representadas en una red de SiC.

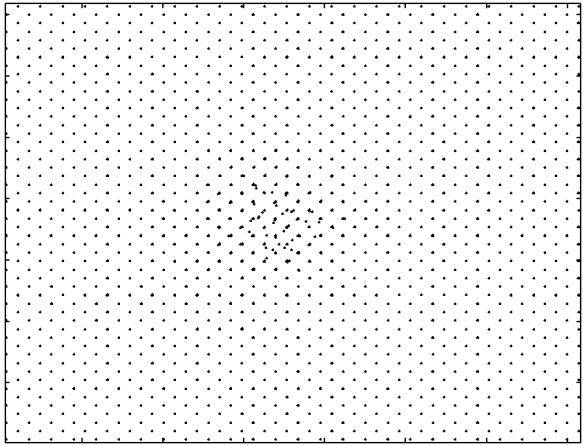
Cuando el átomo energético en la red de SiC es de Si, las estimaciones teóricas y experimentales de referencia predicen una E_d de entre 41 y 63 eV [91 - 94, 68]. En este TFG, se ha calculado una E_d de 57,1 eV. Cuando el *recoil* es de C, las referencias indican una E_d que oscila entre 19 y 41 eV [91 - 94, 68]. Sin embargo, la energía umbral correspondiente obtenida en las simulaciones de este trabajo resulta 74,0 eV. La discrepancia se atribuye a la anisotropía del fenómeno, observada tanto experimentalmente como mediante cálculos computacionales [91]. En todos los cálculos y medidas de referencia citados, se evalúa la energía umbral de desplazamiento para unas direcciones cristalográficas determinadas del SiC. Así, las velocidades iniciales del *recoil* se orientan hacia las direcciones [100], [110], [111] o $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$. Los valores de E_d de referencia citados anteriormente corresponden a una media ponderada de las energías umbrales calculadas para cada una de estas direcciones cristalográficas. Sin embargo, el método empleado en este TFG no es el mismo: se ha optado por otorgar velocidades iniciales de dirección aleatoria al *recoil*, para después promediar los resultados sobre todas las direcciones evaluadas. En general, estas orientaciones no coinciden con las mencionadas direcciones cristalográficas ni con sus equivalentes por simetría reticular. Este

marco de trabajo se ilustra en la Figura 4.3. La elevada anisotropía observada en la generación de dañado mediante este mecanismo en SiC hace que la dirección de la velocidad inicial del *recoil* sea determinante en el valor de E_d , observándose variaciones de hasta 30 eV en función de la dirección escogida [91].

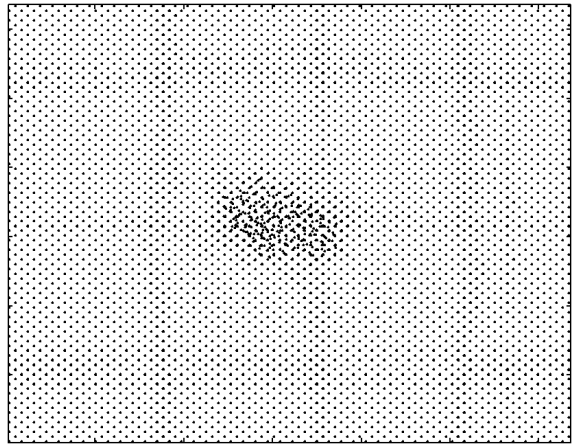
Tanto para el SiGe como para el SiC, se observa que el cambio en E_d existente cuando el *recoil* es de un elemento u otro proviene de diferencias en E_T , siendo D_C prácticamente constante dentro del mismo semiconductor binario correspondiente. Esto significa que lo que distingue el mecanismo de generación de dañado cuando el átomo energético es de un elemento determinado es el proceso de choques iniciales entre vecinos, con el que comienzan los desplazamientos atómicos, controlado por E_T . Dado que la red cristalina en cada semiconductor es la misma, la energía añadida a E_T necesaria para que el entorno cristalino no devuelva a los átomos iniciales energéticos a sus correspondientes posiciones reticulares es muy similar, independientemente del elemento al que correspondan dichos átomos. Esto está caracterizado por D_C , que se mantiene prácticamente constante para un mismo material. Así, el elemento del *recoil* determina el umbral energético para el cual se comienzan a generar defectos, pero, una vez superada la correspondiente energía límite E_T , la producción del dañado se da con eficiencias muy similares para los mismos entornos cristalinos.

4.2. Esferas

Como se menciona en el apartado 2.4.2, este tipo de simulaciones representa una transición entre las de *recoils*, en las que se aporta energía inicial a un solo átomo, y las de procesos de fusión, en las que toda la celda recibe energía cinética. En las simulaciones de esferas, se otorga una densidad energética a un conjunto de varios átomos vecinos entre sí, en un proceso de excitación térmica local en el que la energía cinética inicial se concentra en una región reducida del material. Un ejemplo de los efectos de este proceso sobre redes cristalinas de SiGe se muestra en la Figura 4.4.



(a) $\rho_a = 5 \text{ eV}/\text{átomo}$.



(b) $\rho_b = 25 \text{ eV}/\text{átomo}$.

Figura 4.4: Generación de dañado en simulaciones de esferas de 30 átomos en redes de SiGe con diferentes densidades energéticas iniciales.

4.2.1. Esferas en SiGe

En la Figura 4.5 se representan los resultados de las simulaciones de esferas en SiGe, distinguiendo los casos en los que éstas se disponen en torno a un átomo de Si, de aquéllos en los que el átomo central es de Ge. Se ha evaluado el número de átomos desplazados generado por esferas de entre 2 y 30 átomos, para diferentes densidades energéticas iniciales. Se puede observar que incluso para densidades energéticas menores que $E_d = 13,2 \text{ eV}/\text{átomo}$ (la energía umbral de desplazamiento más baja calculada en SiGe) existe dañado en la red. Esto es debido a las múltiples interacciones entre átomos que se producen en estas simulaciones. Es más fácil generar defectos en la estructura cuando el entorno cristalino que rodea a un átomo en movimiento posee también energía cinética, y, por tanto, no es necesario aportar tanta cantidad de energía como en las simulaciones de *recoils*. Se observa que el dañado generado es muy sensible a las condiciones iniciales: el número final de átomos desordenados aumenta con el número inicial de átomos en movimiento y con la densidad energética inicial aportada. Este fenómeno también se observa en las simulaciones de Si y Ge monocompente, y ha sido estudiado por varios autores con anterioridad en ambos materiales [22, 29]. Con los resultados presentados en la Figura 4.5, se ha llevado a cabo una regresión lineal de los

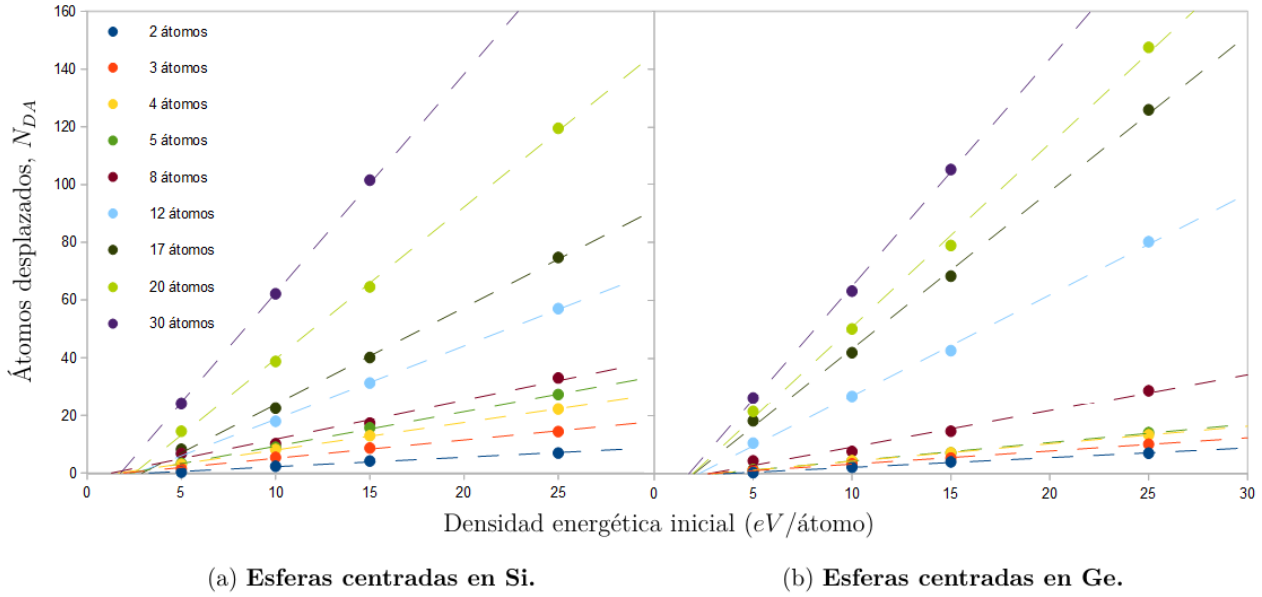


Figura 4.5: Número final de átomos desordenados promedio en función de la densidad energética inicial aportada a las esferas, para diferentes tamaños de esferas en SiGe. Los resultados de las simulaciones de esferas construidas en torno a un átomo central de Si se presentan en la gráfica (a), y los correspondientes a esferas centradas en un átomo de Ge se detallan en la gráfica (b). Los puntos son cálculos computacionales, las líneas discontinuas son regresiones lineales a los datos.

datos, ajustándolos, según el modelo de descripción del dañado empleado en este TFG, a la relación desarrollada en el apartado 2.5.3:

$$N_{DA} = \frac{N \cdot \rho - N \cdot E_T(N)}{D_C(N)}, \quad (4.7)$$

donde N es el número de átomos en la esfera.

En las Figuras 4.6 y 4.7 se presentan E_T y D_C en función del número de átomos que componen la esfera en la simulación para el Si, Ge, y SiGe. Para $N = 1$, se han tomado los resultados obtenidos de las simulaciones de *recoils*, presentadas en el apartado 4.1. Las figuras muestran claramente que E_T y D_C no son constantes con N , y decaen conforme N aumenta. Este comportamiento resalta la importancia del efecto colectivo que tiene sobre el dañado el entorno de los átomos energéticos iniciales. Cuando N es grande, las respuestas frente a la generación de dañado del Si, Ge y SiGe son semejantes entre sí. La energía necesaria para comenzar a producir desplazamientos atómicos en la red, E_T , disminuye en todos los casos conforme N aumenta, ya que cuanto mayor sea el tamaño de la esfera, más fácil es comenzar a generar dañado, ya que la energía total depositada aumenta con

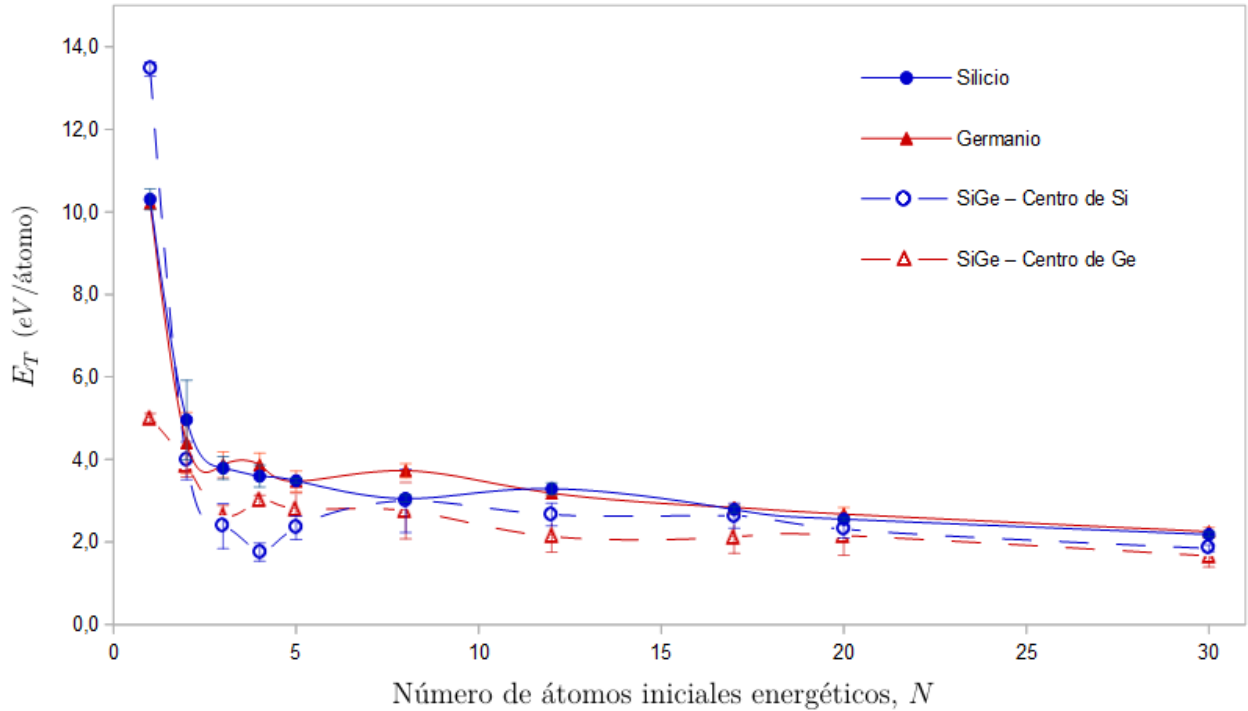


Figura 4.6: Energías mínimas para iniciar la generación de dañado en función del número de átomos que componen las esferas para Si, Ge y SiGe. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.

N para una misma densidad energética inicial. Cuantos más átomos estén en movimiento, menos energía se necesita para producir defectos. La tendencia indica que E_T converge a un valor constante cuando N es grande.

En cuanto al Si y al Ge monocomponentes, los valores de E_T y D_C evolucionan de forma muy similar, indicando que la generación de dañado en ambos materiales se produce con la misma eficiencia y para un rango de energías similar. López *et al.* mostraron mediante simulaciones de CMD que, mientras que E_T es muy parecido en Si y Ge, estos elementos presentan diferentes valores de D_C [29]. Las discrepancias existentes con los resultados de este TFG tienen su origen en el potencial empleado: López *et al.* emplearon un potencial tipo Stillinger-Weber para la descripción del Si y del Ge. Este potencial empírico predice una conductividad térmica mayor y un punto de fusión menor en Ge que en Si, lo que explica la mayor facilidad observada en Ge para la generación de defectos. En contraste, el potencial de Tersoff aquí empleado no describe correctamente las temperaturas

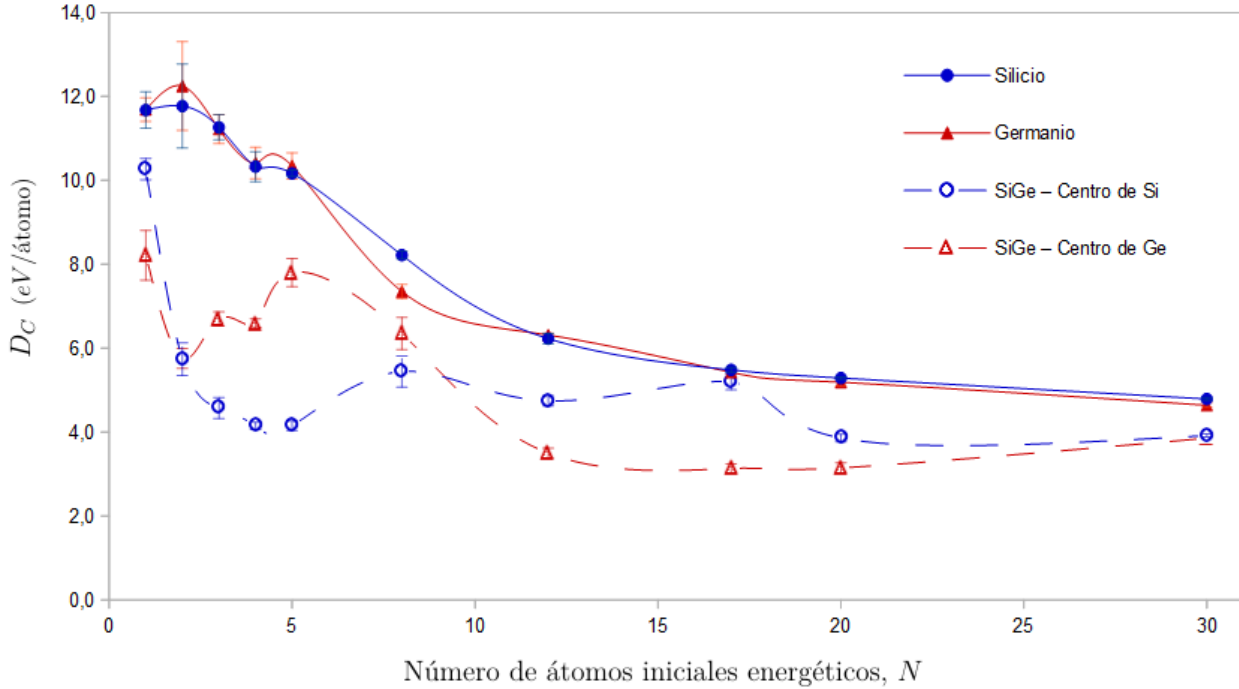


Figura 4.7: Costes de generación de daño como función del número de átomos que componen las esferas para Si, Ge y SiGe. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.

de fusión, y tiene una parametrización para Ge muy similar a la de Si (véase la Tabla 3.3), y las propiedades estructurales y elásticas son muy similares en ambos elementos bajo esta descripción (véanse las Tablas 3.1 y 3.2), lo cual explica una eficiencia en la generación de daño similar para ambos semiconductores. En este TFG se ha optado por emplear un potencial de Tersoff en lugar uno tipo Stillinger-Weber para describir las interacciones atómicas porque éste admite la descripción de materiales multicomponentes como el SiGe y el SiC. Los potenciales de Stillinger-Weber, por el contrario, no ofrecen esta posibilidad.

La energía por átomo necesaria para generar tantos N_{DA} como átomos hay en la esfera inicial ($N = N_{DA}$) es la suma:

$$\rho(N = N_{DA}) = E_T(N) + D_C(N). \quad (4.8)$$

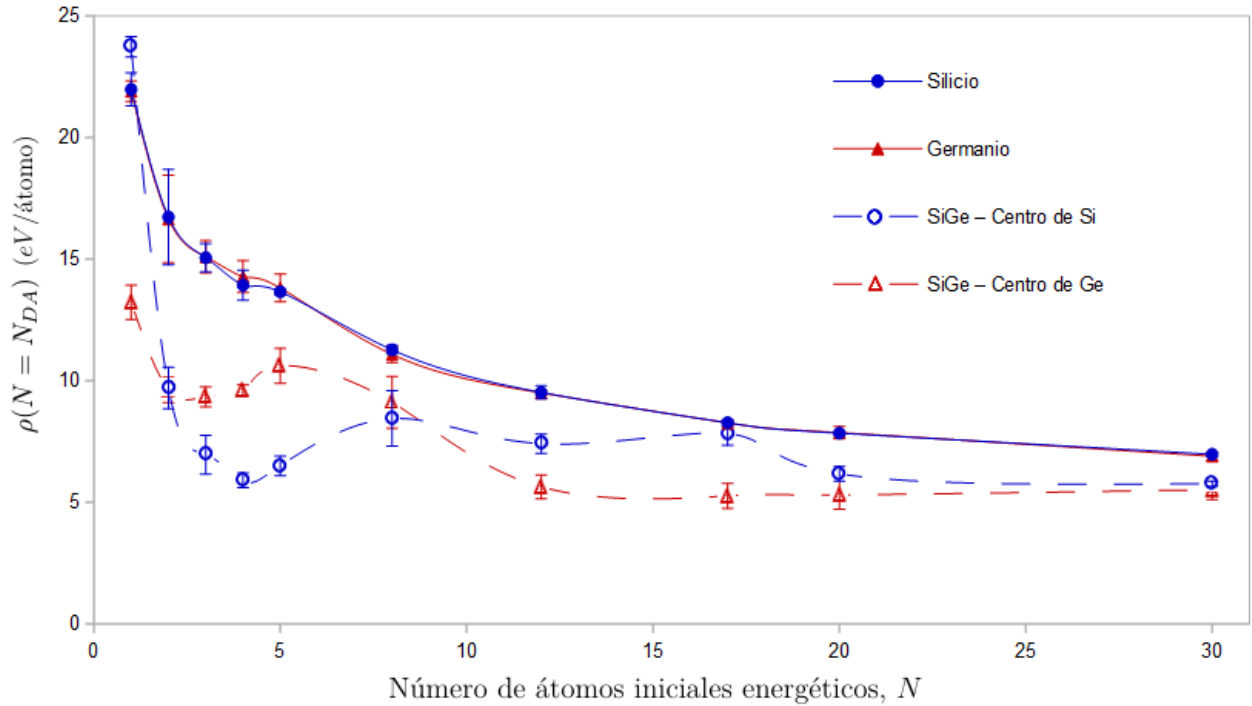


Figura 4.8: $\rho(N = N_{DA}) = E_T(N) + D_C(N)$ como función del número de átomos que componen las esferas para Si, Ge y SiGe. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.

Los resultados del cálculo de $\rho(N = N_{DA})$ para el Si, Ge y SiGe se presentan en la Figura 4.8. Siguiendo la tendencia de E_T y D_C , es claro que $\rho(N = N_{DA})$ también decrece con N . Por ello, la generación de dañado es más eficiente para grupos grandes de átomos energéticos iniciales, dado que la densidad energética necesaria para desordenar cada átomo es menor. Por ejemplo, para SiGe con esferas de 4 átomos centradas en Ge, se necesitan 10 eV/átomo para desordenar estos 4 átomos, mientras que, cuando las esferas son de 20 átomos, basta una densidad de 5 eV/átomo para desordenar los 20 átomos.

En cuanto al coste del dañado en SiGe, en las simulaciones de *recoils* descritas en el apartado 4.1, se concluía que, para $N = 1$, el SiGe era más reticente a generar dañado en su red cuando el átomo energético inicial era de Si que cuando éste era de Ge, y el fenómeno se atribuía a la diferencia de masas existente entre el Si y el Ge. Sin embargo, cuando N es grande, las diferencias en las masas dejan de ser relevantes, dado que la región de la celda que recibe energía cinética contiene tanto

átomos de Si como de Ge, en una proporción semejante. Nótese que, cuando las esferas son de un tamaño tal que su capa externa queda incompleta, los átomos necesarios para completar la esfera de simulación son escogidos aleatoriamente entre los átomos de la última capa.

Por el contrario, cuando las esferas son pequeñas, de entre 2 y 5 átomos, se observan diferencias en la generación de daño en SiGe en función del elemento que forma el centro de la esfera en los valores de D_C , dado que en estas esferas, la proporción de átomos de Si y de Ge en la región que recibe la energía cinética cambia notablemente con el átomo central. Cuando las esferas son de hasta 5 átomos, no hay átomos excitados más allá de la primera capa de la esfera, es decir, solo primeros vecinos del átomo central tienen energía cinética. Así, si el centro de la esfera es de Si, los vecinos excitados son de Ge, y viceversa.

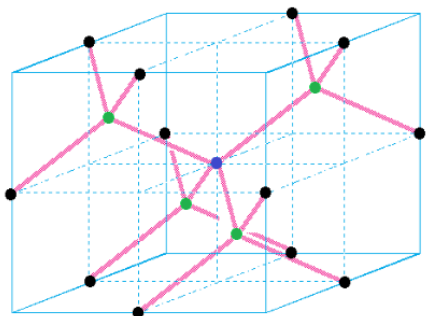


Figura 4.9: Representación de una esfera de 17 átomos con dos capas completas en una estructura cristalina tipo diamante. En azul, el átomo central; en verde, los átomos de la primera capa; y en negro, los átomos de la segunda capa.

al azar entre aquellos que forman la segunda capa. Un ejemplo de esfera con capas completas se representa en la Figura 4.9.

Esto hace que, en estos tamaños de esfera, cuando el centro es del elemento ligero (Si en este caso), el coste de generación de daño esté por debajo de las correspondientes simulaciones en las que la esfera se centra en torno al átomo pesado, en un mecanismo similar al que se desarrolla en el apartado 4.1.

La transición entre el régimen de esferas pequeñas y grandes se puede observar para esferas de entre 8 y 17 átomos. Para ellas, la capa de primeros vecinos del átomo central está siempre completa, pero la de segundos vecinos está incompleta, y la esfera se rellena en cada simulación con un átomo escogido

4.2.2. Esferas en SiC

En las Figuras 4.10 y 4.11 se presentan los resultados de las evaluaciones de E_T y D_C en Si, C, y SiC con esferas centradas tanto en átomos de Si como en átomos de C. Se observa una tendencia general en la dependencia de E_T con N muy similar a lo observado en Si, Ge y SiGe. Cuando los tamaños de las esferas son pequeños, cada semiconductor muestra su E_T característica, siendo la más alta la de SiC centrado en C en $N = 1$ (compuesto binario con el átomo energético ligero). Cuando N se hace más grande, las energías decaen rápidamente para todos los materiales, que comienzan a exhibir E_T más semejantes entre sí. De nuevo, la tendencia de E_T con N es a saturar en un valor constante cuando N alcanza valores muy grandes.

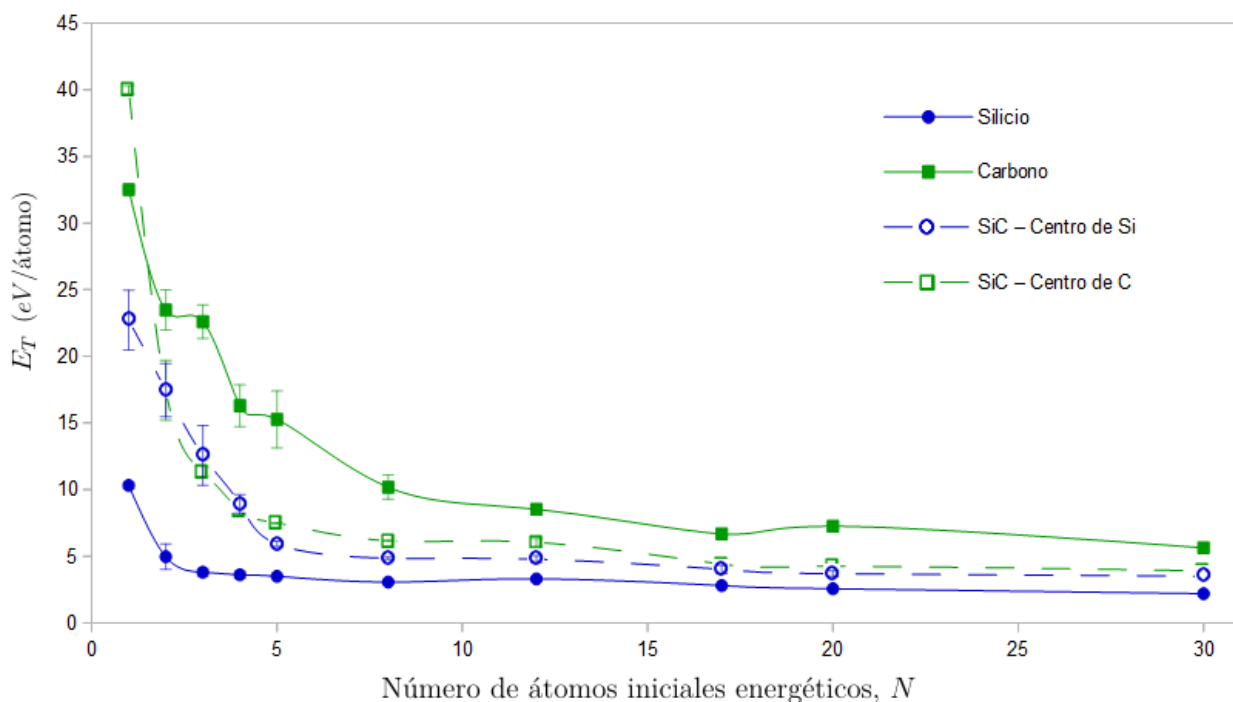


Figura 4.10: Energías mínimas para iniciar la generación de dañado en función del número de átomos que componen las esferas para Si, C y SiC. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.

En cuanto a D_C , se observa el mismo fenómeno que se daba en el caso del SiGe. Esta vez, el átomo ligero del compuesto es el C, mientras que el pesado es el Si. En las esferas pequeñas, cuando el átomo central de la esfera es Si, hay más átomos energéticos iniciales de C que de Si. Esto hace

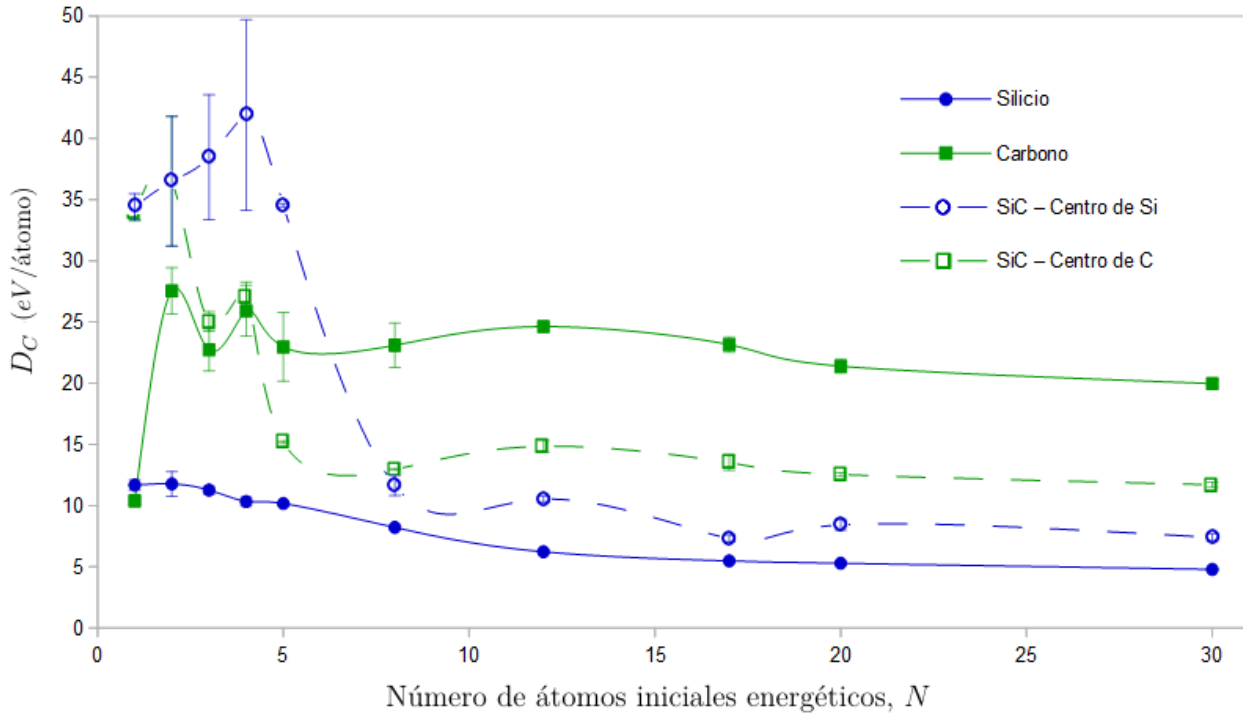


Figura 4.11: Costes de generación de daño como función del número de átomos que componen las esferas para Si, C y SiC. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.

que D_C en el primer caso alcance valores más altos que en el segundo. No obstante, el cálculo de las energías involucradas en la generación de daño para estas esferas de menor tamaño se ve dificultada por la resistencia del material a formar defectos en su red y por la alta sensibilidad de los resultados con el ajuste. Así, es necesaria una evaluación de las simulaciones para densidades energéticas mayores que las evaluadas en este trabajo. Para esferas intermedias, en las que la primera capa vecina al átomo central se ha excitado por completo pero la segunda no, se da la transición obtenida anteriormente en el SiGe. Finalmente, para N grandes, los costes del daño de ambos tipos de esferas de SiC evolucionan a la par, entre los del Si y el C, llegando a valores similares para N suficientemente grandes.

En la Figura 4.12 se representan los resultados del cálculo de $\rho(N = N_{DA}) = E_T(N) + D_C(N)$ como función de los tamaños de las esferas. Como ocurre con el SiGe, cuando las esferas aumentan su tamaño, la energía mínima para iniciar el daño es prácticamente la misma para el SiC con

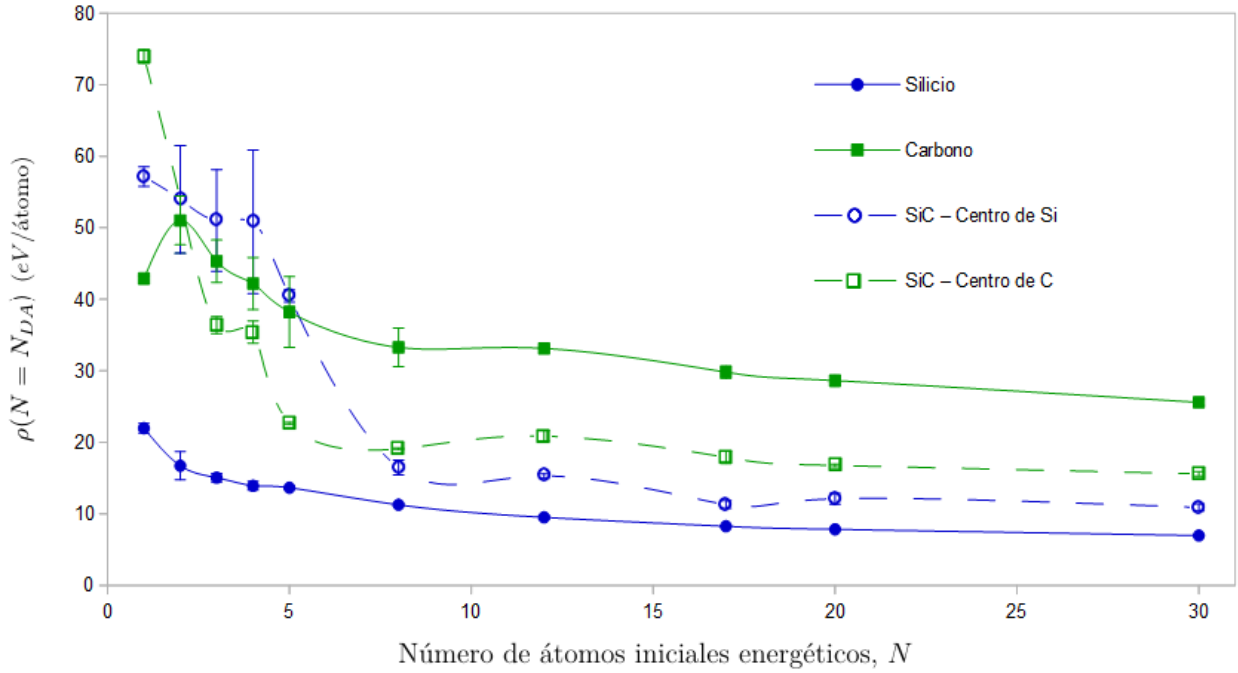


Figura 4.12: $\rho(N = N_{DA}) = E_T(N) + D_C(N)$ en función del número de átomos que componen las esferas para Si, C y SiC. Los puntos y las barras de error son los promedios y desviaciones estándar evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones, respectivamente. Las líneas son para guiar al ojo.

esferas centradas en Si y en C. La razón es la misma: cuanto más átomos tiene la esfera, menor es la influencia de la construcción de la misma en la generación de defectos. Las formas funcionales en general son muy similares en las esferas de SiC y SiGe. Sin embargo, cabe destacar la elevada resistencia, en general, que presentan el C y el SiC a la generación de daño. Tanto las energías mínimas como los costes de generación de daño son mucho más elevados en C que en Si. Como los valores correspondientes en SiC son intermedios a los de Si y C monocomponente, el compuesto binario presenta también unas energías mayores que el Si para la formación de defectos.

4.2.3. Comportamiento de los antisitios

En los compuestos binarios, los antisitios son átomos sustitucionales en los que un átomo de un elemento se encuentra ocupando una posición reticular que corresponde al elemento contrario. En este trabajo se han detectado los antisitios, diferenciándolos de las vacantes e intersticiales, y se han tenido en cuenta como átomos desplazados en el estudio de la generación de daño. En este apartado se discute el comportamiento de este tipo de defectos en SiGe y SiC.

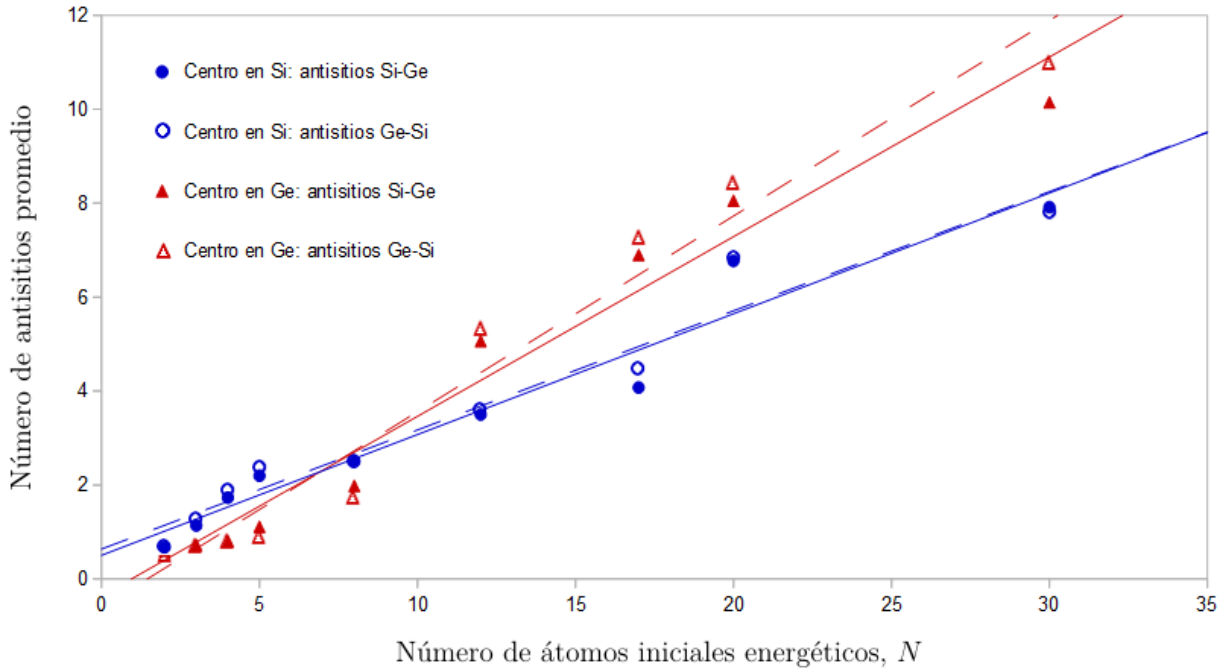


Figura 4.13: Número de antisitios en función de la cantidad de átomos que forman las esferas para esferas en SiGe con una densidad energética inicial de $25 \text{ eV}/\text{átomo}$. Los puntos son los promedios evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones. Las líneas son las correspondientes rectas de regresión lineal, representadas para guiar al ojo.

En las Figuras 4.13 y 4.14 se representan los resultados del análisis de antisitios promedio para esferas con densidades energéticas de $25 \text{ eV}/\text{átomo}$ de SiGe y SiC, respectivamente, como función del número de átomos que componen la esfera, N . Se han distinguido los *antisitios X-Y* (átomos del elemento X ocupando una posición reticular propia del elemento Y) de los *antisitios Y-X* (disposición contraria a la anterior). También se han representado por separado los casos de esferas con centros en los diferentes elementos. La primera diferencia relevante está en las cantidades de antisitios formados en SiGe y SiC: para la misma densidad energética inicial y la misma cantidad de átomos en la esfera, se producen en torno a 10 veces más antisitios en SiGe que en SiC. En SiC, solo se observan cantidades de entorno a 1 antisitio promedio para las esferas más grandes. La segunda está en la evolución del número de antisitios con N para cada compuesto. En SiGe, los antisitios de ambos elementos se producen en cantidades muy semejantes tanto para centros de Si como para centros de Ge. Por el contrario, en SiC la generación de antisitios no es simétrica: es más frecuente que un átomo de Si ocupe una posición de C, que un átomo de C ocupe una posición de Si. Finalmente, se puede observar un factor común: tanto en SiGe como en SiC, se obtiene una

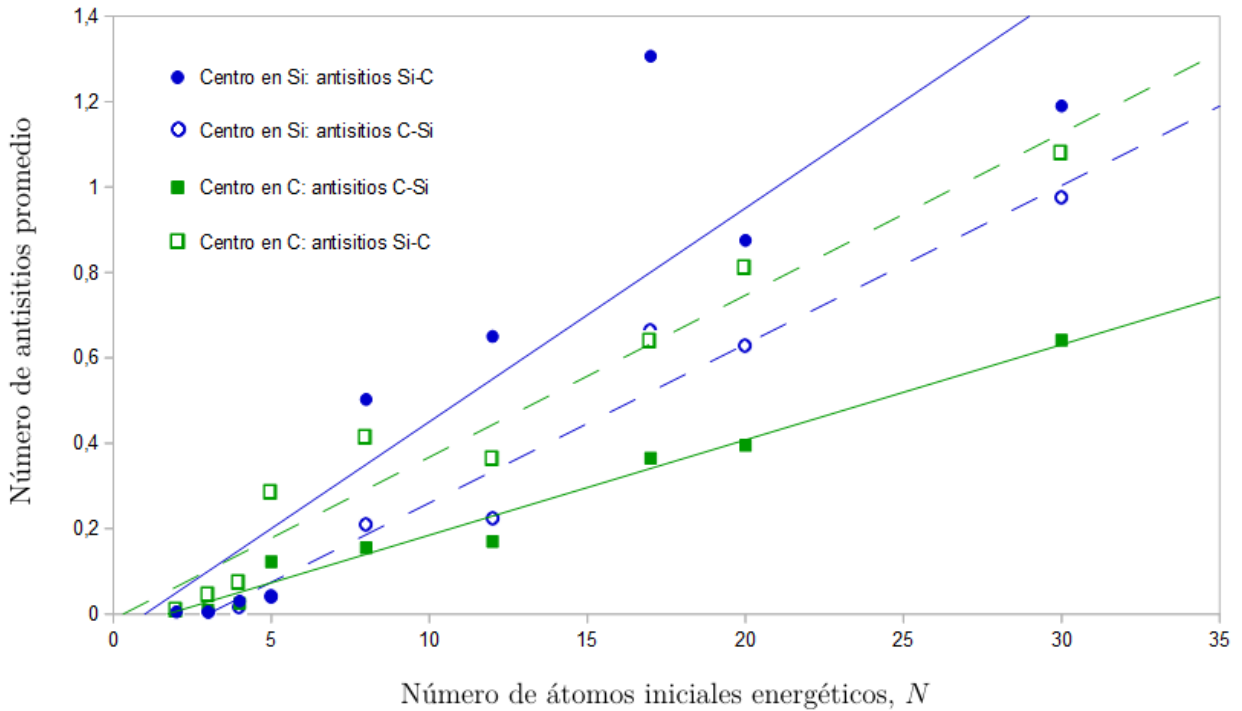


Figura 4.14: Número de antisitios en función de la cantidad de átomos que forman las esferas para esferas en SiC con una densidad energética inicial de $25 \text{ eV}/\text{átomo}$. Los puntos son los promedios evaluados sobre los resultados de 200 simulaciones. Las líneas son las correspondientes rectas de regresión lineal, representadas para guiar al ojo.

mayor cantidad de antisitios promedio cuando la esfera se centra en torno al átomo pesado, siendo más claras las diferencias en el dominio de las esferas grandes.

4.3. Procesos de fusión

Para investigar y cuantificar la generación de daño por procesos de fusión, se han realizado simulaciones en las que todos los átomos de la celda perfecta reciben una cantidad determinada de energía. La metodología de este tipo de simulaciones se describe en el apartado 2.4.3. Dadas las condiciones periódicas de contorno que se han empleado, la energía depositada no puede difundirse al exterior, de forma que todos los átomos mantienen constante su energía total durante la simulación, y solo es posible una redistribución entre energía cinética y potencial. Es precisamente esta redistribución la que caracteriza el proceso de fusión, por lo que, para este tipo de simulaciones, interesa analizar cómo se produce cuando se llega al estado estacionario, desde el instante en el que

los átomos de la celda reciben la energía cinética. En este apartado se realiza una discusión sobre los resultados de las simulaciones de procesos de fusión para el caso concreto del SiGe. En el resto de elementos, el fenómeno es análogo y solo se presentan los resultados finales.

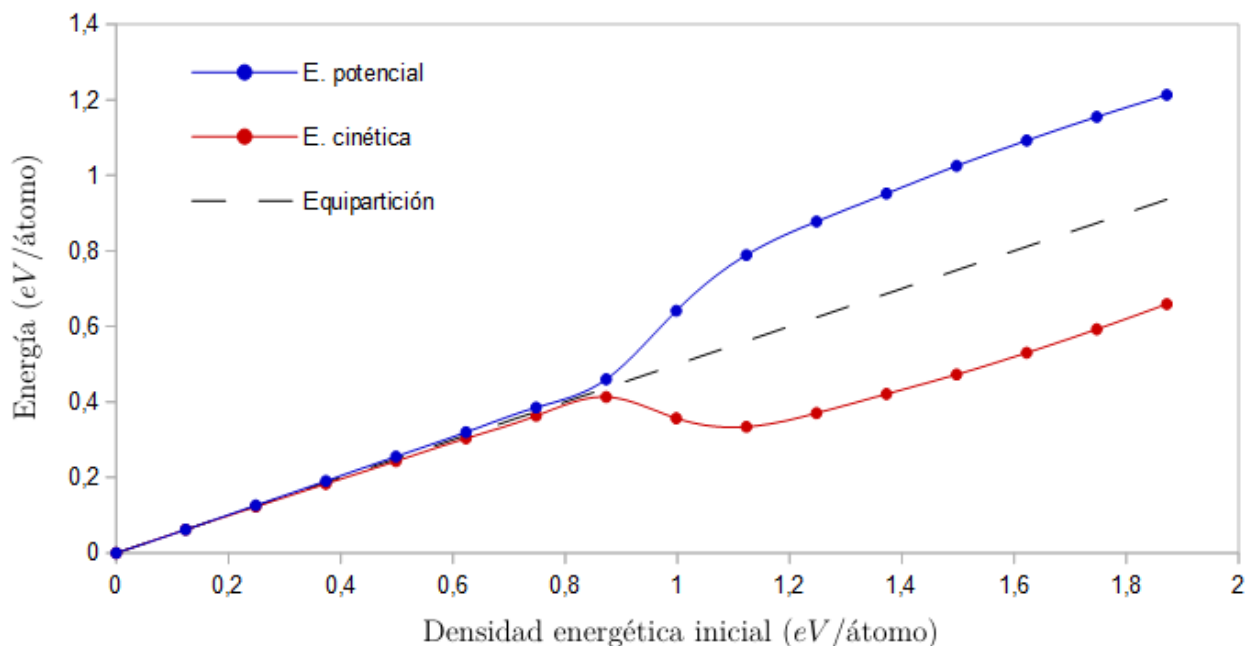


Figura 4.15: Energías cinética y potencial por átomo en estado estacionario en función de la densidad energética inicial en simulaciones de procesos de fusión de SiGe. Las energías potenciales están referidas a las de la red perfecta a 0 K. Los puntos son cálculos computacionales, las líneas son para guiar al ojo. La línea negra discontinua marca la equipartición de la densidad de energía inicial entre sus componentes cinética y potencial.

En la Figura 4.15 se presentan las energías potenciales y cinéticas una vez se ha alcanzado el estado estacionario en la celda como función de la densidad de energía aportada a los átomos inicialmente. Las energías potenciales se han referenciado a las de la red perfecta de SiGe a 0 K. La línea discontinua negra corresponde a la equipartición de la energía, esto es, cuando la densidad energética inicial se reparte en dos mitades iguales entre la componente potencial y la cinética.

Se puede comprobar en la Figura 4.15 que las energías cinética y potencial aumentan con la densidad energética inicial siguiendo la misma tendencia que la equipartición de la energía, hasta llegar a una densidad energética de 0,87 eV/átomo, denominada densidad energética inicial para la

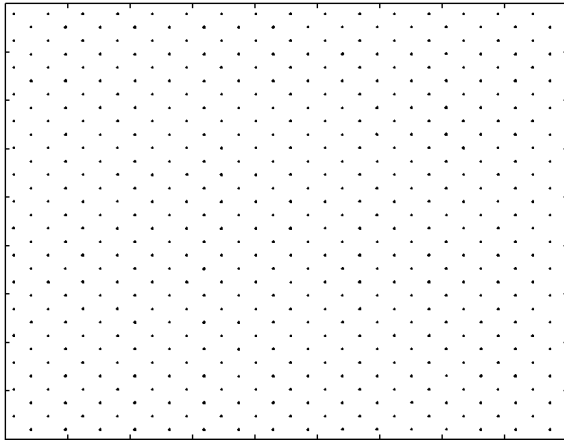
fusión mecánica, ρ_S^{in} . Es entonces cuando la energía cinética alcanza un valor de $0,43 \text{ eV}/\text{átomo}$, lo que corresponde, según el teorema de la equipartición de la energía [81]

$$E = \frac{3}{2}KT \quad (4.9)$$

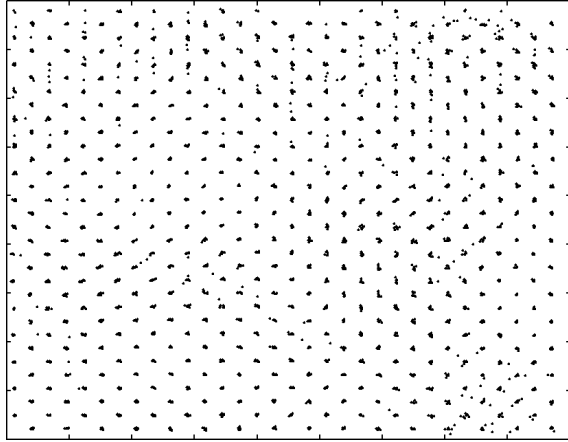
con una temperatura de la celda de unos 3200 K . Esta temperatura se denomina temperatura de fusión mecánica (T_S), y es la temperatura a la que un cristal sin defectos y con superficies libres se funde [95]. Para densidades de energía iniciales entre $0,87$ y $1,12 \text{ eV}/\text{átomo}$, una fracción de la celda de simulación cambia a un estado líquido, y la energía cinética por átomo cae hasta los $0,33 \text{ eV}/\text{átomo}$, lo que se corresponde, según la ecuación (4.9), con una temperatura de aproximadamente 2600 K . Esta temperatura es la de fusión termodinámica, T_M , y corresponde a la temperatura de fusión de los materiales reales. Para densidades energéticas iniciales en torno a los $0,87 \text{ eV}/\text{átomo}$, la celda es un sólido sobrecalentado, mientras que en densidades alrededor de los $1,12 \text{ eV}/\text{átomo}$, hay una coexistencia de fase líquida y sólida de SiGe. Existe una gran cantidad de estudios que demuestran que, para la mayoría de sistemas, $f \cdot T_S = T_M$, donde $f \sim 0,8$ [95]. Pese a que, como se menciona en el apartado 1.1.1, las temperaturas de fusión calculadas mediante los potenciales de Tersoff no se corresponden, en general, con las obtenidas experimentalmente, esta regla empírica es útil para caracterizar los materiales. Como se puede observar, dicha relación se cumple también en las simulaciones de este trabajo.

En la Figura 4.16 se puede ver cómo, a partir de una densidad energética inicial de alrededor de $1,12 \text{ eV}/\text{átomo}$ y superiores, la celda se distorsiona por completo: se ha llegado a la temperatura T_M . Esta cantidad es la densidad energética inicial para la fusión termodinámica, ρ_M^{in} . En la Figura 4.15 se observa que la energía potencial en la fase líquida del SiGe (para una densidad energética inicial de $1,12 \text{ eV}/\text{átomo}$) es de $0,79 \text{ eV}/\text{átomo}$ con respecto a la energía potencial de la red cristalina perfecta a 0 K . Para esa misma densidad energética inicial, la energía cinética es de $0,33 \text{ eV}/\text{átomo}$. Estos valores de energía determinan un umbral $E_T(N \rightarrow \infty)$ de $0,79 + 0,33 = 1,12 \text{ eV}/\text{átomo}$ para desordenar la celda de simulación por completo. Para que el proceso de fusión ocurra, debe haber en la celda la suficiente energía por átomo para aumentar la temperatura hasta el punto de fundición

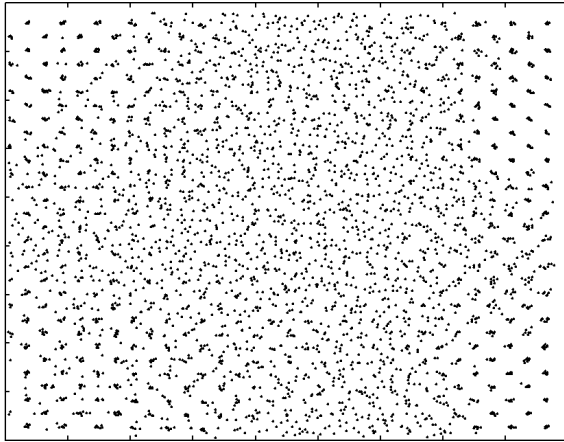
(0,33 eV/átomo) y para provocar el cambio de fase de cristal a líquido (0,79 eV/átomo). Se observa que para densidades de energía iniciales superiores a $\rho_M^{in} = 1,12$ eV/átomo, las energías cinética y potencial vuelven a crecer paralelamente con la tendencia de la línea de equipartición, esta vez con la línea de energía potencial por encima de la línea de energía cinética, indicando que en este rango de energías, la celda se encuentra en fase líquida. En la Figura 4.16 se observa la transición a la fase líquida en la disposición de los átomos en la celda. Se puede comprobar que el cambio de fase se produce en densidades de energía iniciales a partir de los 1,12 eV/átomo. Para densidades de 1,87 eV/átomo, la celda está completamente fundida.



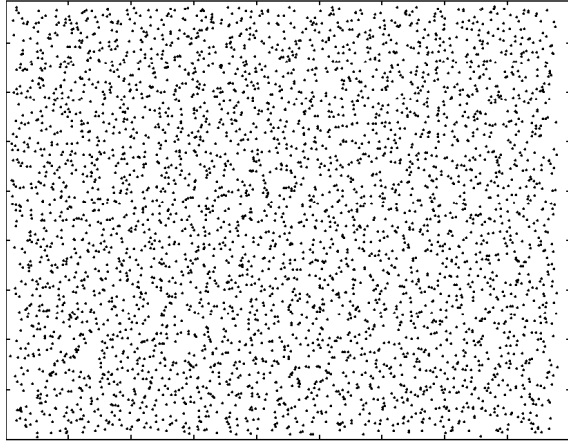
(a) $\rho_a^{in} = 0,25$ eV/átomo.



(b) $\rho_b^{in} = 1$ eV/átomo.



(c) $\rho_c^{in} = 1,12$ eV/átomo.



(d) $\rho_d^{in} = 1,87$ eV/átomo.

Figura 4.16: Configuraciones atómicas de celdas de SiGe en estado estacionario para diferentes densidades energéticas iniciales ρ^{in} en simulaciones de procesos de fusión.

Un estudio análogo al aquí presentado para el SiGe se ha llevado a cabo para el resto de los semiconductores bajo análisis. Los resultados de las simulaciones de procesos de fusión para estos materiales se presenta en la Tabla 4.3.

	ρ_S^{in}	$E_T(N \rightarrow \infty)$	f
Si	0,9	1,1	0,81
C	2,7	3,2	0,88
Ge	0,8	1,1	0,8
SiC	1,2	1,67	0,88
SiGe	0,87	1,12	0,81

Tabla 4.3: Densidades energéticas características en $eV/\text{átomo}$ y factores de relación térmicos en procesos de fusión para cada compuesto bajo estudio obtenidas mediante simulaciones CMD.

Como, por las condiciones de contorno periódicas impuestas en la celda de simulación, la energía no puede difundirse al exterior, estas simulaciones permiten calcular el valor límite de la energía mínima necesaria para comenzar a producir daño cuando N tiende a infinito. En la Sección 4.2 se mencionaba que $E_T(N)$ tiende a un valor constante para tamaños de esfera lo suficientemente grandes en todos los materiales. Estos valores son $E_T(N \rightarrow \infty)$, y se corresponden con la energía mínima necesaria para generar daño (en estas simulaciones, fundir toda la celda) en el caso en el que es más fácil producirlo: cuando todos los átomos de la celda están excitados. Nótese que los valores de $E_T(N)$ para todos los materiales en las Figuras 4.6 y 4.10 se encuentran siempre por encima de los $E_T(N \rightarrow \infty)$ calculados en la Tabla 4.3. Por otro lado, los valores de D_C para todos los materiales en las Figuras 4.7 y 4.11 tienden a cero cuando la energía se aplica a toda la red, dado que entonces no es necesario aportar más energía que la mínima para fundir la red, no hay un entorno cristalino estático que dificulte la generación de daño.

Capítulo 5

Conclusiones y líneas futuras

La motivación de este TFG ha sido profundizar en la comprensión de los mecanismos de generación de daño en SiC y SiGe con estructura zinc-blenda. Para ello se han simulado procesos de fusión local en los que se aporta energía a un conjunto de átomos en la red cristalina, evaluando la cantidad de daño generado, así como las energías involucradas en su formación. Del análisis de la estructura atómica resultante de las simulaciones se han obtenido resultados que permiten entender y caracterizar el comportamiento de la generación de defectos, tanto en estos materiales como en los correspondientes semiconductores monocomponentes. Esta información es útil para controlar la creación de daño durante la fabricación y el empleo de dispositivos electrónicos basados en estos compuestos, en los que los fenómenos de formación de defectos representan un importante factor que limita su funcionalidad.

5.1. Conclusiones del trabajo

En primer lugar, se ha comprobado que la simulación mediante la técnica de Dinámica Molecular Clásica con un potencial multicomponente de Tersoff del proceso de fusión local y enfriamiento es un método adecuado para evaluar la generación de daño en redes de SiC y SiGe. Así, se ha llevado a cabo con éxito un trabajo que profundiza en el estudio de los mecanismos de generación de daño en estos materiales.

El análisis de la generación de daño en simulaciones en las que solo un átomo de la red cristalina recibe energía cinética muestra que, en los materiales compuestos, la formación de átomos desplazados presenta comportamientos dispares en función del elemento al que pertenezca el átomo excitado. Este fenómeno se ha atribuido a las diferencias entre las masas de los átomos que forman la red, ya que, cuanto más pesado sea el átomo energético, mayor capacidad tiene para desplazar vecinos en la estructura reticular y, por tanto, la eficiencia en la generación de defectos se ve incrementada. Los resultados obtenidos están, en general, en buen acuerdo con las referencias computacionales y experimentales existentes, a excepción de los cálculos para las energías umbrales de desplazamiento en SiC con átomos energéticos de C. Las discrepancias se han atribuido a la alta anisotropía del fenómeno en las redes de SiC, y a las diferencias en la forma de asignar las velocidades iniciales al átomo energético entre la llevada a cabo en este TFG y la empleada en los trabajos de la literatura.

Por otro lado, las simulaciones en las que se aporta energía cinética a una región limitada de la red cristalina han permitido calcular las energías mínimas necesarias para comenzar a desplazar átomos en la estructura, así como el coste energético del daño. Del análisis de estas energías y de la cantidad de defectos observados se deduce que las interacciones múltiples entre átomos juegan un papel principal en los mecanismos de generación de daño de estos materiales. Los movimientos colectivos hacen más eficiente la generación de daño, siendo necesaria una energía menor para producir desplazamientos atómicos en las estructuras cuanto mayor sea el número de átomos excitados energéticamente. Se ha observado que el C y el SiC son materiales mucho más resistentes a la generación de defectos que el Si, Ge, o SiGe, lo cual los haría indicados para aplicarlos como dispositivos electrónicos sometidos a condiciones extremas de radiación o temperatura. Los resultados obtenidos en este trabajo están en línea con las publicaciones existentes hasta la fecha, a excepción de la descripción del daño en Ge. Los cálculos computacionales y las medidas experimentales de referencia muestran que en Ge se observa una mayor facilidad para la formación de defectos que en Si, mientras que en este estudio, el comportamiento de la generación de daño es muy similar para ambos materiales. Esta discrepancia se asocia con el empleo del potencial de Tersoff llevado a cabo en este trabajo, que describe unas propiedades estructurales y elásticas muy similares para

ambos semiconductores. Además, se ha observado que el cálculo de las energías involucradas en la generación de daño para esferas de tamaño pequeño es muy sensible al ajuste empleado para su obtención, siendo necesaria una evaluación de estas simulaciones para densidades energéticas mayores que las llevadas a cabo en este TFG.

Finalmente, se han llevado a cabo simulaciones en las que se aporta energía cinética a cada átomo de la red cristalina, lo que permite evaluar el límite inferior de las energías de formación de daño cuando el número de átomos excitados tiende a infinito. Así, se ha concluido que, cuando toda la celda recibe energía cinética, el coste energético del daño para todos los materiales tiende a cero, dado que no es necesario aportar más energía que la mínima necesaria para fundir la red. Esto se debe a que en estos procesos no hay un entorno cristalino estático que dificulte la generación de daño, a diferencia de lo observado en las demás simulaciones.

5.2. Líneas futuras de investigación

A continuación se indican algunas de las líneas futuras a seguir propuestas para completar y ampliar este estudio.

- **Cálculo de parametrizaciones mejoradas para SiGe.** Mientras que los resultados de la evaluación de la generación de defectos en Si están en buen acuerdo con la literatura, los correspondientes al Ge presentan discrepancias. Se ha obtenido en este trabajo un comportamiento en la eficiencia de daño muy similar entre Si y Ge, cuando es conocido que en Ge los desplazamientos se producen con mayor facilidad. Esto se ha atribuido a la parametrización del potencial de Tersoff empleada, y afecta también a los cálculos en SiGe. Por ello, es necesario llevar a cabo una optimización del conjunto de parámetros de Tersoff para Ge y SiGe, con el objetivo de obtener una descripción más realista del fenómeno.
- **Evaluación de las simulaciones de esferas de pocos átomos para energías mayores en SiC.** Dada la resistencia que presenta el SiC a generar daño en su estructura, y la alta sensibilidad del cálculo de las energías de desplazamiento con el ajuste, sería conveniente llevar

a cabo simulaciones para esferas de tamaños pequeños en SiC con densidades energéticas más altas que las evaluadas en este TFG. Esto permitiría calcular las energías umbrales y los costes de dañado de forma más precisa, obteniendo así resultados concluyentes.

- **Realización de simulaciones de esferas de gran tamaño.** En este trabajo no se han evaluado las energías involucradas en la formación de defectos para esferas de tamaños muy grandes, mayores a 30 átomos. La evaluación correspondiente para dichas esferas permitiría comprender mejor el comportamiento de la generación de dañado. Con ello, se conocería la tendencia de las energías cuando el número de átomos en la esfera se acerca al infinito, especialmente en C y SiC, dado que estos materiales presentan gran resistencia a los desplazamientos atómicos.
- **Estudio en profundidad de la anisotropía del dañado en SiC.** Se ha observado una gran anisotropía en el comportamiento de la generación de defectos en redes de SiC. Este fenómeno ha sido estudiado en la literatura existente, evaluando las energías de formación de dañado para las principales direcciones cristalográficas de la red. Sin embargo, en este trabajo se ha optado por promediar el número total de defectos generados para direcciones aleatorias en la velocidad inicial de los átomos energéticos. Al emplear este enfoque, se han observado discrepancias con los resultados de referencia. Un estudio en profundidad de la anisotropía de los desplazamientos atómicos en redes de semiconductores compuestos binarios permitiría una mejor comprensión de las diferencias encontradas.
- **Comparación con resultados experimentales en SiGe.** Los resultados experimentales de referencia para SiGe en lo que a formación de defectos por procesos de fusión local se refiere son escasos. Una evaluación experimental de los fenómenos descritos en este trabajo permitiría comparar los resultados obtenidos, profundizando en la comprensión de los mecanismos de generación de dañado en redes semiconductoras de SiGe reales.

Apéndice A

Archivo de entrada en LAMMPS

A.1. Ejemplo de programa de simulación en LAMMPS

Programa A.1: Configuración para simulaciones de esferas en LAMMPS [51].

```
1| ***-----#
2| # Nombre : in.lammps #
3| # Reseña : Ejemplo de archivo de entrada LAMMPS para configurar una simulación de esferas de SiGe. #
4| #-----#
5| # Entradas : redperfecta, SiCC1Ge tersoff.zbl, esferas.txt. #
6| # Salidas : output, averagAtKe, avg.****, averag.end. #
7| #-----#
8| # Al ejecutar el programa, es necesario tener definido un archivo con la estructura cristalina sin #
9| # defectos (redperfecta) y una tabla con los parámetros de Tersoff-ZBL empleados en el potencial #
10| # (SiCC1Ge tersoff.zbl). También es necesario un archivo esferas.txt, en el que se definen en #
11| # código LAMMPS los átomos energéticos, sus velocidades y las direcciones de éstas. El programa #
12| # evaluará entonces la evolución temporal del sistema hasta su enfriamiento. #
13| #-----**#
14|
15| processors 2 2 2 # Número de procesadores a emplear en cada dirección.
16| # En este programa, se emplean un total de 2x2x2=8 procesadores.
17| units metal # Unidades en las que LAMMPS trabaja (gramos/mol para la masa,
18| # eV para la energía, Amstrongs para las distancias, ps para los tiempos,
19| # K para la temperatura, bar para la presión, e para la carga eléctrica).
20| boundary p p p # Imposición de condiciones de contorno periódicas.
21| atom_style atomic # Estilo de simulación, en este caso, atómica.
22| atom_modify map array # Modifica atributos de los átomos y el algoritmo de búsqueda de átomos.
23| newton on # Activa la tercera ley de Newton para las interacciones entre átomos.
24|
25| reset_timestep 0 # Inicia a cero el paso temporal.
26|
27| read_data ../redperfecta # Lee el fichero redperfecta con las posiciones atómicas.
28| mass 1 28.086 # Define la masa en gramos/mol del primer elemento (Si).
29| mass 2 72.59 # Define la masa en gramos/mol del segundo elemento (Ge).
30|
31| # El paso temporal inicial ha de ser pequeño (0.01fs) para seguir a los átomos energéticos.
32| timestep 0.00001 # Define el paso temporal.
33| run_style verlet # Define el algoritmo de integración empleado.
34|
35| # Lectura de las velocidades iniciales de los átomos en el archivo esferas.txt.
36| jump ../esferas.txt esfera0
37|
38| label simu # Marcador para referenciar una parte del código.
39|
```



```

40 pair_style tersoff/zbl          # Define el potencial a emplear (Tersoff-ZBL conectados).
41
42 # Lectura de los coeficientes a emplear dentro del archivo de potenciales SiCC1Ge.tersoff.zbl.
43 pair_coeff * * SiCC1Ge.tersoff.zbl Si(C) Ge
44
45 neighbor 0.0 bin                # Establece los parámetros de construcción de listas de vecinos a pares.
46 neigh_modify every 1 delay 0 check no
47
48 # Define el grupo de átomos a los que aplicar la solución de la evolución temporal y promedia posiciones.
49 fix avposx all ave/atom 1 1000 1000 x
50 fix avposy all ave/atom 1 1000 1000 y
51 fix avposz all ave/atom 1 1000 1000 z
52
53 fix 1 all nve                   # Define el conjunto de magnitudes constantes en la simulación: NVE.
54
55 # Ajuste del paso temporal
56 fix adjstep all dt/reset 1000 0.00001 0.001 0.014145 units box
57
58 compute ecinatom all ke/atom    # Cálculo de las energías cinéticas en eV/átomo de todos los átomos.
59
60 # Escritura del archivo avg.**** con la información de las posiciones y energías de cada átomo.
61 dump avg all custom 1000 avg.* id type f_avposx f_avposy f_avposz c_ecinatom
62 dump_modify avg sort id
63
64 # Cálculo de la energía cinética máxima de cada partícula, calculando su promedio cada 1000 pasos.
65 compute MaxAtKe all reduce max c_ecinatom
66 fix avmaxatke all ave/time 1 1000 1000 c_MaxAtKe file averagAtKe
67 variable ecinmax equal f_avmaxatke
68
69 # Configuración del cálculo y la presentación de los datos termodinámicos del sistema
70 thermo_modify flush yes
71 thermo_style custom step atoms cpu temp epair ke etotal c_MaxAtKe f_avmaxatke
72 thermo 1000
73
74 # Cada 1000 pasos se comprueba la energía cinética máxima y se decide si finaliza la simulación.
75 label looprun
76 run 1000 pre no post no
77
78 # La simulación solo finaliza si la celda se ha enfriado, es decir, si la energía cinética máxima promedio
79 # cae por debajo de los 0.08 eV/átomo. Si no es así, continúa simulando 1000 pasos más.
80 if "${ecinmax} > 0.08" then "jump in.lammps looprun"
81
82 # Escribe la configuración atómica del último paso temporal en el archivo averag.end.
83 run 1000
84 variable paso equal step
85 shell mv avg.${paso} averag.end

```

Apéndice B

Programas en C

B.1. Generación de la red perfecta

Programa B.1: Generación de una red cristalina perfecta.

```
1| /**-----|
2| | Nombre   : redperfecta.c |
3| | Reseña   : Genera una celda de simulación cúbica sin defectos para un cristal monoatómico o |
4| |           : diatómico con un parámetro de red (lred) definido por el usuario. |
5| |-----|
6| | Entradas : - |
7| | Salidas  : redperfecta. |
8| |-----|
9| | Al ejecutar el programa, es necesario introducir primero el parámetro de red que se desea que la |
10| | celda de simulación tenga, y después indicar si el cristal es monoatómico (1) o diatómico (2). |
11| | Finalmente, es necesario introducir el número de celdillas unitarias de la celda de simulación. |
12| |-----**/ |
13| |
14| #include <math.h>
15| #include <stdlib.h>
16| #include <time.h>
17| #include <stdio.h>
18| #include <string.h>
19|
20| int i, i1, i2, m1, m2, m3, jj, m, si;
21| int n, ncellx, ncell, ncellz, susType;
22| double factor;
23| double x[1500000], y[1500000], z[1500000];
24| double cellx, cell2x, celly, cell2y, cellz, cell2z;
25| double lred;
26|
27| char salida1[40], salida2[40], salida3[40];
28|
29| main(argc, argv)
30| int argc;
31| char *argv[];
32| {
33| FILE *fsalida1;
34| FILE *fsalida2;
35| FILE *fsalida3;
36|
37| scanf("%d", &susType); // Cristal monoatómico o diatómico.
38| scanf("%d", &ncellx); // Número de celdillas unitarias de la celda de simulación.
39| ncell=ncellx;
```

```

40 ncellz=ncellx;
41
42 lred=atof(argv[1]); // Parámetro de red y número de átomos.
43 n=8*ncellx*ncelly*ncellz;
44
45 for(i=0;i<n;i++) // Inicialización de las coordenadas atómicas.
46 {
47     x[i]=0.0;
48     y[i]=0.0;
49     z[i]=0.0;
50 }
51 // Generación de a red cristalina en función del lred introducido.
52 // - m1 corresponde a la dirección X.
53 // - m2 corresponde a la dirección Y.
54 // - m3 corresponde a la dirección Z.
55 // En cuanto a los átomos de cada celdilla:
56 // - i1 corresponde a cada uno de los 4 niveles que componen la celdilla.
57 // con una separación de 1/4*lred entre ellos.
58 // - i2 se refiere a los 2 átomos que hay por nivel (8 en total en una celdilla unitaria).
59
60 for(m3=0;m3<ncellz;m3++)
61 {
62     for(m2=0;m2<ncelly;m2++)
63     {
64         for(m1=0;m1<ncellx;m1++)
65         {
66             for(i2=0;i2<2;i2++)
67             {
68                 for(i1=1;i1<5;i1++)
69                 {
70 // m1 -> Completado de la dirección X.
71 // m2 -> Completado de la dirección Y, m2*ncellx filas ya han sido completadas en X.
72 // m3 -> Completado de la dirección Z, m3*ncellx*ncelly ya han sido completadas en
73 // los planos XY anteriores.
74                 jj=8*(m1+ncellx*m2+ncellx*ncelly*m3)+i1+4*i2-1;
75                 x[jj]=lred*( 1.0*m1 + (i1/3)/2.0 + 1.0*i2/4.0 ) + lred/8.0;
76                 y[jj]=lred*( 1.0*m2 + (i1/2-i1/3)/2.0 + 1.0*i2/4.0 ) + lred/8.0;
77                 z[jj]=lred*( 1.0*m3 + ( (i1/2)/2.0 - 1.0*(i1/4) ) + 1.0*i2/4.0 ) + lred/8.0;
78             }
79         }
80     }
81 }
82 }
83
84 // Escritura de los archivos de salida en función de la configuración atómica seleccionada anteriormente.
85 switch(susType)
86 {
87     case 1:
88         sprintf(salida2,"redperfecta");
89
90         fsalida2=fopen(salida2,"w");
91         fprintf(fsalida2,"cLammps%d\n\n",n);
92         fprintf(fsalida2,"%d atoms\n",n);
93         fprintf(fsalida2,"2 atom types\n\n");
94
95         fprintf(fsalida2,"0.0 %lf xlo xhi\n", ncellx*lred);
96         fprintf(fsalida2,"0.0 %lf ylo yhi\n", ncellx*lred);
97         fprintf(fsalida2,"0.0 %lf zlo zhi\n", ncellz*lred);
98         fprintf(fsalida2,"Atoms\n\n");
99
100        for(m3=0;m3<ncellz;m3++)
101        {
102            for(m2=0;m2<ncelly;m2++)
103            {
104                for(m1=0;m1<ncellx;m1++)
105                {
106                    for(i2=0;i2<2;i2++)
107                    {
108                        for(i1=1;i1<5;i1++)
109                        {
110                            i=8*(m1+ncellx*m2+ncellx*ncelly*m3)+i1+4*i2-1;
111                            if(i2==0)
112                            {
113                                fprintf(fsalida2,"%d 1 %lf %lf %lf\n",i+1, x[i],y[i],z[i]); // 1 - Silicio
114                            }
115                            else

```

```

116|         {
117|             fprintf(fsalida2,"%d      2      %lf      %lf      %lf\n", (i+1), x[i], y[i], z[i]); // 2 - C ó Ge
118|         }
119|     }
120| }
121| }
122| }
123| }
124| break;
125|
126| case 0:
127|     sprintf(salida2, "redperfecta");
128|
129|     fsalida2=fopen(salida2, "w");
130|     fprintf(fsalida2, "cLammps%d\n\n", n);
131|     fprintf(fsalida2, "%d atoms\n", n);
132|     fprintf(fsalida2, "1 atom types\n");
133|     fprintf(fsalida2, "0.0 %lf xlo xhi\n", ncellx*lred);
134|     fprintf(fsalida2, "0.0 %lf ylo yhi\n", ncelly*lred);
135|     fprintf(fsalida2, "0.0 %lf zlo zhi\n", ncellz*lred);
136|     fprintf(fsalida2, "Atoms\n\n");
137|
138|     for(i=0; i<n; i++)
139|     {
140|
141|         fprintf(fsalida2,"%d      1      %lf      %lf      %lf\n", (i+1), x[i], y[i], z[i]);
142|     }
143|     break;
144| }
145| fclose(fsalida2);
146| }

```

B.2. Carpetas para archivos de simulación

Programa B.2: Configuración de carpetas con los archivos de cada simulación.

```

1| /**-----
2| | Nombre   : scCarpetas.c
3| | Reseña   : Genera un script en Bash capaz de crear carpetas con los archivos necesarios para
4| |           ejecutar las simulaciones (archivo de entrada (in.lammps), ejecutable LAMMPS
5| |           (lmp_Beta2015), y tabla con los parámetros del potencial) y recoger los resultados.
6| |-----
7| | Entradas : SiCC1Ge.tersoff.zbl, lmp_Beta2015.
8| | Salidas  : scCarpetas.sh, que crea las carpetas simu*** con in.lammps dentro.
9| |-----
10| | El usuario debe introducir el número de simulaciones y el tipo de simulación a ejecutar
11| | (0 - Recoils, 1 - Fusión, 2 - Esferas). También debe implementar la densidad energética inicial
12| | en eV/átomo, el sustrato de la celda (0 - Si, 1 - C, 2 - Ge, 3 - SiC, 4 - SiGe), y
13| | las dimensiones de ésta.
14| |-----**/
15|
16| #include <math.h>
17| #include <stdio.h>
18| #include <string.h>
19|
20| int nAtoms, susType, dim, selectype;
21| double energy;
22|
23| main(argc, argv)
24| int argc;
25| char *argv[];
26| {
27|
28|     FILE *salida;
29|     scanf("%d", &selectype);
30|     switch(selectype)
31|     {
32|     case 0: //Recoils
33|         scanf("%d", &nAtoms);
34|         break;

```

```

35| case 1: // Toda la muestra
36|   scanf("%d",&nAtoms);
37|   break;
38| case 2: // Esferas
39|   scanf("%d",&nAtoms);
40|   break;
41| default:
42|   printf("Selección no implementada");
43|   break;
44| }
45| scanf("%lf",&energy);
46| scanf("%d",&susType);
47| scanf("%d",&dim);
48|
49| salida=fopen("scCarpetas.sh","w");
50|
51| // Las variables de entrada son el nombre del archivo ($1 \n " );) y el número de esfera ($2).
52| fprintf(salida,"function create_input_file(){\n");
53|
54| switch(selectype)
55| {
56| case 0: // Recoils
57|   switch (susType)
58|   {
59| case 0: // Silicio
60|   fprintf(salida,"echo \"# %d simulaciones de Recoils con %lf eV cada uno. Sustrato Si. Potencial
61|     Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
62|   break;
63| case 1: // Carbono
64|   fprintf(salida,"echo \"# %d simulaciones de Recoils con %lf eV cada uno. Sustrato C. Potencial
65|     Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
66|   break;
67| case 2: // Germanio
68|   fprintf(salida,"echo \"# %d simulaciones de Recoils con %lf eV cada uno. Sustrato Ge. Potencial
69|     Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
70|   break;
71| case 3: // SiC
72|   fprintf(salida,"echo \"# %d simulaciones de Recoils con %lf eV cada uno. Sustrato SiC. Potencial
73|     Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
74|   break;
75| case 4: // SiGe
76|   fprintf(salida,"echo \"# %d simulaciones de Recoils con %lf eV cada uno. Sustrato SiGe. Potencial
77|     Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
78|   break;
79| default:
80|   printf("Sustrato no implementado");
81|   break;
82| }
83| break;
84| case 1:// Toda la muestra
85|   switch (susType)
86|   {
87| case 0: // Silicio
88|   fprintf(salida,"echo \"# %d átomos energeticos en la muestra con %lf eV cada uno. Sustrato Si.
89|     Potencial Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
90|   break;
91| case 1: // Carbono
92|   fprintf(salida,"echo \"# %d átomos energeticos en la muestra con %lf eV cada uno. Sustrato C.
93|     Potencial Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
94|   break;
95| case 2: // Germanio
96|   fprintf(salida,"echo \"# %d átomos energeticos en la muestra con %lf eV cada uno. Sustrato Ge.
97|     Potencial Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
98|   break;
99| case 3: // SiC
100|   fprintf(salida,"echo \"# %d átomos energeticos en la muestra con %lf eV cada uno. Sustrato SiC.
101|     Potencial Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
102|   break;
103| case 4: // SiGe
104|   fprintf(salida,"echo \"# %d átomos energeticos en la muestra con %lf eV cada uno. Sustrato SiGe.
105|     Potencial Tersoff-Spline-ZBL\"      >> $1 \n ",nAtoms,energy );
106|   break;
107| default:
108|   printf("Sustrato no implementado");
109|   break;

```

```

100|     }
101| break;
102| case 2://Esferas
103|     switch (susType)
104|     {
105|     case 0: //Silicio
106|         fprintf(salida,"echo \"># Esfera de %d átomos con %lf eV cada uno. Sustrato Si. Potencial Tersoff-
107|             Spline-ZBL\" >> $1 \n ",nAtoms,energy );
108|         break;
109|     case 1: //Carbono
110|         fprintf(salida,"echo \"># Esfera de %d átomos con %lf eV cada uno. Sustrato C. Potencial Tersoff-
111|             Spline-ZBL\" >> $1 \n ",nAtoms,energy );
112|         break;
113|     case 2: //Germanio
114|         fprintf(salida,"echo \"># Esfera de %d átomos con %lf eV cada uno. Sustrato Ge. Potencial Tersoff-
115|             Spline-ZBL\" >> $1 \n ",nAtoms,energy );
116|         break;
117|     case 3: //SiC
118|         fprintf(salida,"echo \"># Esfera de %d átomos con %lf eV cada uno. Sustrato SiC. Potencial Tersoff-
119|             Spline-ZBL\" >> $1 \n ",nAtoms,energy );
120|         break;
121|     case 4: //SiGe
122|         fprintf(salida,"echo \"># Esfera de %d átomos con %lf eV cada uno. Sustrato SiGe. Potencial Tersoff-
123|             Spline-ZBL\" >> $1 \n ",nAtoms,energy );
124|         break;
125|     default:
126|         printf("Sustrato no implementado");
127|         break;
128|     }
129| break;
130| default:
131|     printf("Seleccion no implementada");
132|     break;
133| }
134| fprintf(salida,"echo \"># Caja de %dx%dx%d nm.\" >> $1 \n ", dim, dim, dim );
135| fprintf(salida,"echo \"># Condiciones periodicas en XYZ.\" >> $1 \n " );
136| fprintf(salida,"echo \">\n >> $1 \n " );
137| fprintf(salida,"echo \">processors 2 2 2\" >> $1 \n " );
138| fprintf(salida,"echo \">\n >> $1 \n " );
139| fprintf(salida,"echo \">units metal\" >> $1 \n " );
140| fprintf(salida,"echo \">boundary p p p\" >> $1 \n " );
141| fprintf(salida,"echo \">atom_style atomic\" >> $1 \n " );
142| fprintf(salida,"echo \">atom_modify map array\" >> $1 \n " );
143| fprintf(salida,"echo \">newton on\" >> $1 \n " );
144| fprintf(salida,"echo \">\n >> $1 \n " );
145| fprintf(salida,"echo \">reset_timestep 0\" >> $1 \n " );
146| fprintf(salida,"echo \">\n >> $1 \n " );
147|
148| fprintf(salida,"echo \">read_data ../redperfecta\" >> $1 \n " );
149|
150| switch (susType)
151| {
152| case 0: //Silicio
153|     fprintf(salida,"echo \">mass 1 28.086\" >> $1 \n " );
154|     break;
155| case 1: //Carbono
156|     fprintf(salida,"echo \">mass 1 12.011\" >> $1 \n " );
157|     break;
158| case 2: //Germanio
159|     fprintf(salida,"echo \">mass 1 72.59\" >> $1 \n " );
160|     break;
161| case 3: //SiC
162|     fprintf(salida,"echo \">mass 1 28.085\" >> $1 \n " );
163|     fprintf(salida,"echo \">mass 2 12.011\" >> $1 \n " );
164|     break;
165| case 4: //SiGe
166|     fprintf(salida,"echo \">mass 1 28.086\" >> $1 \n " );
167|     fprintf(salida,"echo \">mass 2 72.59\" >> $1 \n " );
168|     break;
169| default:
170|     printf("Sustrato no implementado");

```

```

171 |     break;
172 | }
173 | fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
174 |
175 | fprintf(salida,"echo \"timestep 0.00001\" >> $1 \n " );
176 | fprintf(salida,"echo \"run_style verlet\" >> $1 \n " );
177 | fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
178 |
179 |     switch(selectype)
180 |     {
181 |     case 0: //Recoils
182 |         fprintf(salida,"echo \"jump ../atEnergeticos.txt atomo$2\" >> $1 \n " );
183 |         fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
184 |         break;
185 |     case 1: //Toda la muestra
186 |         fprintf(salida,"echo \"jump ../atEnergeticos$num.txt atEnergeticos\" >> $1 \n " );
187 |         fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
188 |         break;
189 |     case 2: //Esferas
190 |         fprintf(salida,"echo \"jump ../esferas.txt esfera$2\" >> $1 \n " );
191 |         fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
192 |         break;
193 |     default:
194 |         printf("Seleccion no implementada");
195 |         break;
196 |     }
197 |
198 | fprintf(salida,"echo \"label simu\" >> $1 \n " );
199 | fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
200 |
201 | fprintf(salida,"echo \"pair_style tersoff/zbl\" >>$1 \n " );
202 | switch (susType)
203 | {
204 | case 0: //Silicio
205 |     fprintf(salida,"echo \"pair_coeff * * SiCC1Ge.tersoff.zbl Si(C)\\" >> $1 \n " );
206 |     break;
207 | case 1: //Carbono
208 |     fprintf(salida,"echo \"pair_coeff * * SiCC1Ge.tersoff.zbl C\" >> $1 \n " );
209 |     break;
210 | case 2: //Germanio
211 |     fprintf(salida,"echo \"pair_coeff * * SiCC1Ge.tersoff.zbl Ge\" >> $1 \n " );
212 |     break;
213 | case 3: //SiC
214 |     fprintf(salida,"echo \"pair_coeff * * SiCC1Ge.tersoff.zbl Si(C) C\" >> $1 \n " );
215 |     break;
216 | case 4: //SiGe
217 |     fprintf(salida,"echo \"pair_coeff * * SiCC1Ge.tersoff.zbl Si(C) Ge\" >> $1 \n " );
218 |     break;
219 | default:
220 |     printf("Sustrato no implementado");
221 |     break;
222 | }
223 | fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
224 |
225 | fprintf(salida,"echo \"neighbor 0.0 bin\" >> $1 \n " );
226 | fprintf(salida,"echo \"neigh_modify every 1 delay 0 check no\" >> $1 \n " );
227 | fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
228 |
229 | fprintf(salida,"echo \"fix avposx all ave/atom 1 1000 1000 x\" >> $1 \n " );
230 | fprintf(salida,"echo \"fix avposy all ave/atom 1 1000 1000 y\" >> $1 \n " );
231 | fprintf(salida,"echo \"fix avposz all ave/atom 1 1000 1000 z\" >> $1 \n " );
232 | fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
233 |
234 | fprintf(salida,"echo \"fix 1 all nve\" >> $1 \n " );
235 | fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
236 |
237 | fprintf(salida,"echo \"fix adjstep all dt/reset 1000 0.00001 0.001 0.014145 units box\" >> $1 \n " );
238 | fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
239 |
240 | fprintf(salida,"echo \"compute ecinatom all ke/atom\" >> $1 \n " );
241 | fprintf(salida,"echo \"dump avg all custom 1000 avg.* id type f_avposx f_avposy f_avposz c_ecinatom\"
    >> $1 \n " );
242 | fprintf(salida,"echo \"dump_modify avg sort id\" >> $1 \n " );
243 | fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
244 |
245 | fprintf(salida,"echo \"compute MaxAtKe all reduce max c_ecinatom\" >> $1 \n " );
246 | fprintf(salida,"echo \"fix avmaxatke all ave/time 1 1000 1000 c_MaxAtKe file averagAtKe\" >> $1 \n " );

```

```

247| fprintf(salida,"echo \"variable ecinmax equal f_avmaxatke\" >> $1 \n " );
248| fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
249|
250| fprintf(salida,"echo \"thermo_modify flush yes\" >> $1 \n " );
251| fprintf(salida,"echo \"thermo_style custom step atoms cpu temp epair ke etotal c_MaxAtKe f_avmaxatke\" >>
| $1 \n " );
252| fprintf(salida,"echo \"thermo 1000\" >> $1 \n " );
253| fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
254|
255| fprintf(salida,"echo \"label looprun\" >> $1 \n " );
256| fprintf(salida,"echo \"run 1000 pre no post no\" >> $1 \n " );
257| fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
258|
259| fprintf(salida,"echo \"if \" '\$'\{ecinmax\} > 0.08 \" '\$'\ then\" '\$'\jump in.lammps
| looprun\" '\$'\ >> $1 \n " );
260| fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
261|
262| fprintf(salida,"echo \"run 1000\" >> $1 \n " );
263| fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
264|
265| fprintf(salida,"echo \"variable paso equal step\" >> $1 \n " );
266| fprintf(salida,"echo \"shell mv avg.\" '\$'\{paso\} averag.end\" >> $1 \n " );
267| fprintf(salida,"echo \" \" >> $1 \n " );
268|
269| // Al llamar al script se indica el número de simulaciones que se quieren hacer
270| fprintf(salida,"nsimus=$1 \n " );
271| fprintf(salida,"for num in `seq 0 $nsimus` \n " );
272| fprintf(salida,"do\n");
273|     fprintf(salida,"mkdir simu$num \n " );
274|     fprintf(salida,"cp SiCC1Ge.tersoff.zbl simu$num/ \n " );
275|     fprintf(salida,"cp lmp_Beta2015 simu$num/ \n " );
276|     fprintf(salida,"cd simu$num/ \n " );
277|     fprintf(salida,"create_input_file in.lammps $num \n " );
278|     fprintf(salida,"cd .. \n " );
279|     fprintf(salida,"done \n " );
280| fprintf(salida,"exit \n " );
281|
282| fclose(salida);
283| }

```


Apéndice C

Scripts en Bash

C.1. Preparación de las simulaciones

Programa C.1: Creación de los archivos necesarios para ejecutar simulaciones.

```
1|###-----#  
2|# Nombre : scPreparacion #  
3|# Reseña : Crea todos los archivos necesarios para ejecutar las simulaciones de esferas #  
4|# y los organiza, colocándolos en las carpetas de su correspondiente #  
5|# compuesto, tamaño y energía. #  
6|###-----#  
7|# Entradas : input.tabla, scCarpetas.x, Generar_esferas.x. #  
8|# Salidas : Carpetas simu***, esferas.txt, input.red, input.esferas, input.carpetas. #  
9|###-----#  
10|# El usuario debe haber creado previamente las carpetas correspondientes a cada elemento, #  
11|# y, dentro de ellas, las de cada tamaño de esferas, con los diferentes ficheros para cada energía. #  
12|# Estos ficheros deben llamarse *-Elemento, *-Size y *-Energia. #  
13|# El archivo input.tabla debe ser una tabla que recoja los tamaños de celdas de simulación, los #  
14|# parámetros de red y las energías por átomo de cada simulación de esferas. El archivo input.tabla #  
15|# creado para este TFG se expone en el Programa C.2. #  
16|###-----***#  
17|  
18|for folder in 'seq 1 3'  
19|do  
20|cd $folder-Elemento  
21|for size in 'seq 1 13'  
22|do  
23|cd $size-Size  
24|for ener in 'seq 1 5'  
25|do  
26|cd $ener-Energia  
27|  
28|rm input.red  
29|rm input.esferas  
30|rm esferas.txt  
31|rm input.carpetas  
32|  
33|echo 0 >> input.red  
34|awk 'NR==row{print $col}' row=$size col=$ener input.tabla >> input.red  
35|if(($folder == 1))  
36|then  
37|./redperfecta.x 5.432 < input.red  
38|fi  
39|if(($folder == 2))
```

```

40|         then
41|             ./redperfecta.x 3.566 < input.red
42|         fi
43|         if(($folder == 3))
44|         then
45|             ./redperfecta.x 5.657 < input.red
46|         fi
47|
48|         echo redperfecta >> input.esferas
49|         expr $folder - 1 >> input.esferas
50|         awk 'NR==row{print $col}' row=15 col=$size input.tabla >> input.esferas
51|         awk 'NR==row{print $col}' row=16 col=$ener input.tabla >> input.esferas
52|         echo 2 >> input.esferas
53|         echo 200 >> input.esferas
54|         ./Generar_esferas.x < input.esferas
55|
56|         echo 2 >> input.carpetas
57|         awk 'NR==row{print $col}' row=15 col=$size input.tabla >> input.carpetas
58|         echo $ener >> input.carpetas
59|         expr $folder - 1 >> input.carpetas
60|         awk 'NR==row{print $col}' row=$size col=$ener input.tabla >> input.carpetas
61|         ./scCarpetas.x < input.carpetas
62|         chmod u+x scCarpetas.sh
63|         ./scCarpetas.sh 200
64|     cd ..
65| done
66| cd ..
67| done
68| cd ..
69| done
70|
71| for folder in `seq 4 5`
72| do
73|     cd $folder-Elemento
74|     for cent in `seq 1 2`
75|     do
76|         cd $cent-Centro
77|         for size in `seq 1 13`
78|         do
79|             cd $size-Size
80|             for ener in `seq 1 5`
81|             do
82|                 cd $ener-Energia
83|
84|                 rm input.red
85|                 rm input.esferas
86|                 rm input.carpetas
87|                 rm esferas.txt
88|
89|                 echo 1 >> input.red
90|                 awk 'NR==row{print $col}' row=$size col=$ener input.tabla >> input.red
91|                 if(($folder == 4))
92|                 then
93|                     ./redperfecta.x 4.321 < input.red
94|                 fi
95|                 if(($folder == 5))
96|                 then
97|                     ./redperfecta.x 5.542 < input.red
98|                 fi
99|
100|                 echo redperfecta >> input.esferas
101|                 expr $folder - 1 >> input.esferas
102|                 awk 'NR==row{print $col}' row=15 col=$size input.tabla >> input.esferas
103|                 awk 'NR==row{print $col}' row=16 col=$ener input.tabla >> input.esferas
104|                 echo 2 >> input.esferas
105|                 echo $cent >> input.esferas
106|                 echo 200 >> input.esferas
107|                 ./Generar_esferas.x < input.esferas
108|
109|                 echo 2 >> input.carpetas
110|                 awk 'NR==row{print $col}' row=15 col=$size input.tabla >> input.carpetas
111|                 echo $ener >> input.carpetas
112|                 expr $folder - 1 >> input.carpetas
113|                 awk 'NR==row{print $col}' row=$size col=$ener input.tabla >> input.carpetas
114|                 ./scCarpetas.x < input.carpetas
115|                 chmod u+x scCarpetas.sh

```

```

116| ./scCarpetas.sh 200
117|     cd ..
118|     done
119|     cd ..
120|     done
121|     cd ..
122|     done
123| cd ..
124| done
125| exit

```

Programa C.2: Archivo input.tabla para la preparación de simulaciones.

```

1| #*-----#
2| # Nombre   : input.tabla                               #
3| # Reseña   : Tabla de datos necesaria para ejecutar las configuraciones en el Programa C.1.   #
4| #           : En ella se recogen los tamaños de celdas de simulación, energías y parámetros de red #
5| #           : empleados para configurar las simulaciones de este TFG.                       #
6| #*-----#
7|
8| # Tamaños de celdas de simulación para cada densidad energética inicial (entrada vertical) y número
9| # de átomos en la esfera (entrada horizontal).
10|
11| 6 7 8 9 10 11 12 13 15 16 17 18
12| 6 8 9 10 11 12 13 14 15 17 18 19
13| 7 9 10 11 12 13 15 16 18 19 20 21
14| 7 10 10 12 13 14 16 17 19 20 21 22
15| 9 11 13 13 15 17 18 20 21 22 23 24
16| 10 13 14 16 17
17| 11 14 16 18 19
18| 12 15 17 18 20
19| 13 17 19 21 23
20| 15 18 21 24 25
21| 17 21 25 27 29
22| 18 24 27 30 32
23| 20 25 29 32 35
24| 5.432 3.566 5.657 4.321 5.542 # Parámetros de red para cada elemento
25| 2 3 4 5 8 12 17 20 30 40 60 80 100 # Cantidad de átomos en las esferas
26| 5 10 15 20 25 30 35 40 45 50 55 60 # Densidades energéticas iniciales

```

C.2. Análisis y obtención de resultados

Programa C.3: Obtención de los resultados finales de las simulaciones.

```

1| #*-----#
2| # Nombre   : scAnálisis                               #
3| # Reseña   : Recoge todos los resultados de las simulaciones, calcula los valores medios y
4| #           : desviaciones estándar de los diferentes tipos de defectos puntuales
5| #           : producidos, y evalúa la energía umbral (ET) y el coste del dañado (DC).
6| #*-----#
7| # Entradas : input.tabla, analisis.x, redperfecta, averag.****.
8| # Salidas  : Carpetas resultados y Resultados, elemento, estadística, antisitios12.****,
9| #           : antisitios21.****, reticulos.****, desplazados.****, resultados.txt, resultados.final,
10| #           : *-Size, *-fit.txt, fit.data, ETs, DCs.
11| #*-----#
12| # El usuario debe introducir el número de simulaciones a procesar al ejecutar el script ($1), en
13| # este caso, 200. El programa analiza todos los defectos puntuales de cada simulación, y recoge los
14| # resultados en el archivo "estadística". Después, emplea ese archivo para hallar el promedio y
15| # desviación estándar de cada tipo de defecto. Tras esto, resume los resultados para cada tipo de
16| # simulación en el archivo "resultados.final". Finalmente, crea la carpeta Resultados, dentro del
17| # fichero *-Elemento, donde se calculan mediante ajuste lineal en gnuplot las energías umbrales
18| # de desplazamiento y el coste del dañado de cada simulación. Estos cálculos se resumen en los
19| # documentos ETs y DCs, respectivamente.
20| #*-----#
21|

```

```

22| for size in `seq 1 13`
23| do
24|   cd $size-Size
25|
26|   for ener in `seq 1 5`
27|   do
28|     cd $ener-Energia
29|
30|     # Elimina resultados anteriores, copia las configuraciones atómicas finales en /resultados.
31|     rm -rf resultados
32|     mkdir resultados
33|     cp analisis.x resultados/
34|     cp redperfecta resultados/redperfecta
35|
36|     for num in `seq 0 $1`
37|     do
38|       if [ $num -lt 10 ]
39|       then
40|         cp simu$num/averag.end resultados/averag.000$num
41|       elif [ $num -lt 100 ]
42|       then
43|         cp simu$num/averag.end resultados/averag.00$num
44|       elif [ $num -lt 1000 ]
45|       then
46|         cp simu$num/averag.end resultados/averag.0$num
47|       fi
48|     done
49|
50|     cd resultados
51|
52|     # Analiza los defectos con el programa analisis.x.
53|     awk 'NR==row{print $col}' row=$size col=$ener ../input.tabla >> elemento
54|     echo 1 >> elemento
55|     ./analisis.x < elemento
56|
57|   cd ..
58|   cd ..
59| done
60| cd ..
61| done
62|
63| for size in `seq 1 13`
64| do
65|   cd $size-Size
66|   for ener in `seq 1 5`
67|   do
68|     cd $ener-Energia
69|     cd resultados
70|
71|     # Elimina resultados anteriores, calcula la media y la desviación estándar de cada tipo de
72|     # defecto detectado en las configuraciones atómicas simuladas.
73|     rm resultados.txt
74|     awk '{{sum[i] += $2; sumsq[i] += ($2)^2}} END { {printf "%f %f \n", sum[i]/NR, sqrt((sumsq[i]-sum[i]^2/
75|     NR)/NR)}}' estadistica >> resultados.txt
76|     awk '{{sum[i] += $3; sumsq[i] += ($3)^2}} END { {printf "%f %f \n", sum[i]/NR, sqrt((sumsq[i]-sum[i]^2/
77|     NR)/NR)}}' estadistica >> resultados.txt
78|     awk '{{sum[i] += $4; sumsq[i] += ($4)^2}} END { {printf "%f %f \n", sum[i]/NR, sqrt((sumsq[i]-sum[i]^2/
79|     NR)/NR)}}' estadistica >> resultados.txt
80|     awk '{{sum[i] += $5; sumsq[i] += ($5)^2}} END { {printf "%f %f \n", sum[i]/NR, sqrt((sumsq[i]-sum[i]^2/
81|     NR)/NR)}}' estadistica >> resultados.txt
82|     awk '{{sum[i] += $6; sumsq[i] += ($6)^2}} END { {printf "%f %f \n", sum[i]/NR, sqrt((sumsq[i]-sum[i]^2/
83|     NR)/NR)}}' estadistica >> resultados.txt
84|
85|   cd ..
86|   cd ..
87| done
88| cd ..
89| done
90|
91| # Crea el archivo resultados.final en la carpeta /*-Elemento, donde se resumen los resultados de los
92| # cálculos ejecutados en el paso anterior.
93| rm resultados.final
94| for folder in `seq 1 13`
95| do
96|   cd $folder-Size

```

```

93| echo " " >> ../resultados.final
94| echo "$folder " >> ../resultados.final
95| echo " " >> ../resultados.final
96|
97| for ener in `seq 1 5`
98| do
99|     cd $ener-Energia
100|     cd resultados
101|
102|     awk '{ printf( "%lf ", $1 ); } END { printf( "\n" ); }' resultados.txt >> ../../../../resultados.final
103| cd ..
104| cd ..
105| done
106|
107| echo " " >> ../resultados.final
108|
109| for ener in `seq 1 5`
110| do
111|     cd $ener-Energia
112|     cd resultados
113|     awk '{ printf( "%lf ", $2 ); } END { printf( "\n" ); }' resultados.txt >> ../../../../resultados.final
114| cd ..
115| cd ..
116| done
117|
118| cd ..
119| done
120|
121| # Copia los resultados anteriores en la carpeta Resultados, por separado para cada simulación.
122| # En esta carpeta se realiza el cálculo de las energías umbrales y costes de dañado.
123| for folder in `seq 1 13`
124| do
125|     mkdir Resultados
126|     rm Resultados/$folder-Size
127|     cd $folder-Size
128|
129|     for ener in `seq 1 5`
130|     do
131|         cd $ener-Energia
132|         cd resultados
133|
134|         desp=$(awk 'NR==row{print $col}' row=2 col=1 resultados.txt)
135|         ddesp=$(awk 'NR==row{print $col}' row=2 col=2 resultados.txt)
136|         anti12=$(awk 'NR==row{print $col}' row=4 col=1 resultados.txt)
137|         danti12=$(awk 'NR==row{print $col}' row=4 col=2 resultados.txt)
138|         anti21=$(awk 'NR==row{print $col}' row=5 col=1 resultados.txt)
139|         danti21=$(awk 'NR==row{print $col}' row=5 col=2 resultados.txt)
140|         nda=$(expr $desp+$anti12+$anti21 | bc)
141|         dnda=$(expr $ddesp+$danti12+$danti21 | bc)
142|         energias=$(expr $ener*5 | bc)
143|         echo "$energias $nda $dnda">> ../../../../Resultados/$folder-Size
144|
145|     cd ..
146|     cd ..
147|     done
148| cd ..
149| done
150|
151| # Prepara la configuración necesaria en gnuplot para el ajuste lineal que permite hallar ET y DC.
152| cd Resultados
153| for size in `seq 1 13`
154| do
155|     rm $size-fit.txt
156|     atom=$(awk 'NR==row{print $col}' row=1 col=$size Sizes)
157|     echo "NDA(x)=$atom*(x-ET)/DC" >> $size-fit.txt
158|     echo "fit NDA(x) '$size-Size' u 1:2:3 via ET, DC" >> $size-fit.txt
159| done
160|
161| # Calcula ET y DC y recoge los resultados de cada simulación en los archivos ETs y DCs
162| rm ETs DCs
163| for size in `seq 1 13`
164| do
165|     gnuplot $size-fit.txt
166|     mv fit.log fit.log.$size
167|     grep -A 4 'Final set' fit.log.$size > pp
168|     grep = pp>fit.data

```

```
169| grep ET fit.data > ppET
170| sed 's/ET//g' ppET >> ETs
171| grep DC fit.data > ppDC
172| sed 's/DC//g' ppDC >> DCs
173| done
174| rm p* fit.lo*
175| exit
```

Contenido del CD

En el CD en el que se entrega la memoria de este TFG, se incluyen los programas descritos en los apéndices A, B y C. Éstos son:

- Archivo A.1 (in.lammps): archivo de entrada para simulaciones de esferas en LAMMPS.
- Programa B.1 (redperfecta.c): programa en C para la generación de las posiciones atómicas de redes perfectas.
- Programa B.2 (scCarpetas.c): programa en C para la configuración de carpetas con los archivos de cada simulación.
- Script C.1 (scPreparacion): script en Bash para la creación de los archivos necesarios para ejecutar simulaciones.
- Archivo C.2 (input.tabla): tabla con la información de los tamaños, energías y parámetros de red de las celdas necesaria para configurar los parámetros iniciales de las simulaciones.
- Script C.3 (scAnálisis): script en Bash para la obtención de los resultados de las simulaciones.

Bibliografía

1. W.S. Gorton. *The genesis of the transistor*. Proceedings of the IEEE: 86, 1 (1998). pp. 50-52.
2. K.J. Kuhn et al. *Past, Present and Future: SiGe and CMOS Transistor Scaling*. Intel Corporation, Logic Technology Development, Hillsboro (2010).
3. N.W. Ashcroft. *Solid state physics*. Harcourt College Publishers (1976).
4. C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. Wiley, octava edición (2005).
5. J.D. Cressler et al. *Silicon-Germanium Heterojunction Bipolar Transistors*. Artech House. (2003). p. 13.
6. L.B. Bayu Aji et al. *Effects of collision cascade density on radiation defect dynamics in 3C-SiC*. Nature Sci. Rep.: 7, 44703 (2017).
7. Y.J. Li et al. *Structural, electronic, and optical properties of hexagonal and triangular SiC NWs with different diameters*. Chinese Phys. B: 26, 4 (2017).
8. J.B. Oliveira et al. *Mechanical and electronic properties of SiC nanowires: An ab initio study*. Journ. of App. Phys.: 121, 104302 (2017).
9. C.E. Weitzel, J.W. Palmour, C.H. Carter. *Silicon carbide high-power devices*. IEEE Trans. on Elec. Dev.: 43, 10 (1996). pp. 1732-1741.
10. M. Bhatnagar, B.J. Baliga. *Comparison of 6H-SiC, 3C-SiC, and Si for power devices*. IEEE Trans. on Elec. Dev.: 40, 3 (1993). pp. 645-655.
11. H. Chen et al. *Effects of defect types on the performance of devices fabricated on a 4H-SiC homoepitaxial layer*. Mater. Res. Soc. Symp. Proc.: 911 (2006). p. 169.

12. J. Tersoff. *New empirical model for the structural properties of silicon*. Pys. Rev. Lett.: 56, 632 (1986).
13. L.A. Marqués, L. Pelaz, M. Aboy, J. Barbolla. *The laser annealing induced phase transition in silicon: a molecular dynamics study* Nucl. Instrum. Methods B: 216 (2004). pp. 57-61.
14. U. Landman *et al.* *Faceting at the silicon (100) crystal-melt interface: Theory and experiment*. Phys. Rev. Lett.: 56, 155 (1986).
15. M. Koster, H. Urbassek. *Stress relaxation in a-Si induced by ion bombardment*. Phys Rev B: 62, 11219 (2000).
16. L.A. Miller *et al.* *Displacement-threshold energies in Si calculated by molecular dynamics*. Phys. Rev. B.: 49, 16953 (1994).
17. M. Sayed *et al.* *Computer simulation of atomic displacements in Si, GaAs, and AlAs*. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B: 102, 232 (1995).
18. L.A. Marqués, L. Pelaz, P. Castrillo, J. Barbolla. *Molecular dynamics study of the configurational and energetic properties of the silicon self-interstitial*. Phys. Rev. B: 71, 085204 (2005).
19. J. Tersoff. *Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems*. Pys. Rev. B: 39, 5566 (1989).
20. S. Goumri-Said. *Empirical molecular dynamics study of structural, elastic and thermodynamic properties of zinc-blende-like SiGe compound*. Mat. Sci. and Eng. B: 111 (2004). pp. 207–213.
21. M. Tang, S. Yip. *Atomistic simulation of thermomechanical properties of β -SiC*. Appl. Phys. Rev. B: 52, 21 (1995).
22. I. Santos, L.A. Marqués, L. Pelaz, P. López. *Improved atomistic damage generation model for binary collision simulations*. J. Appl. Phys.: 105, 083530 (2009).

23. J.M. Perlado, L. Malerba, T.D. de la Rubia. *MD simulation of high energy cascades and damage accumulation in beta-SiC in inertial fusion conditions*. Fusion Technology: 34, 3 (1998). pp. 840-847.
24. T.D. de la Rubia, J.M. Perlado, M. Tobin. *Radiation effects in silicon carbide: high energy cascades and damage accumulation at high temperature*. J. Nucl. Mat.: 233-237, 2 (1996). pp. 1096-1101.
25. M. Ganchenkova *et al.* *Point defect formation in Si and Si : Ge; Computational analysis of pressure effects*. Diffusion, segregation and stresses in materials: 216-2 (2003). pp. 29-34.
26. K. Gartner, T. Clauss. *MD simulation of ion implantation damage in AlGaAs: I. Displacement energies*. Nucl. Instrum. Methods B: 252, 2 (2006). pp. 190-196.
27. K. Gartner, T. Clauss. *MD simulation of ion implantation damage in AlGaAs: II. Generation of point defects*. Nucl. Instrum. Methods B: 268, 2 (2010). pp. 149-154.
28. K. Gartner, T. Clauss. *MD simulation of ion implantation damage in AlGaAs: III. Defect accumulation and amorphization*. Nucl. Instrum. Methods B: 252 (2006). pp. 155-164.
29. P. López, L. Pelaz, I. Santos, L.A. Marqués, M. Aboy. *Molecular dynamics simulations of damage productoin by thermal spikes in Ge*. J. Appl. Phys.: 111, 033519 (2012).
30. Página oficial del grupo de investigación de Modelado Multi-Escala de Materiales de la Universidad de Valladolid.
<https://www.ele.uva.es/~mmm/>
31. J.M. Sánchez Hurtado. *TFG: Simulación y caracterización de defectos en materiales cristalinos (germanio)*. Departamento de Electricidad y Electrónica, Universidad de Valladolid (2014).
32. D. Calvo Ruiz. *TFG: Simulación de defectos en germanio amorfo*. Departamento de Electricidad y Electrónica, Universidad de Valladolid (2015).
33. L. Rosso, A.F. de Baas. *What makes a material function? Let me compute the ways*. Comisión Europea, 3ª versión. Ed. Springer (2012).

34. Division of Engineering Californian Institute of Technology and Applied Science. *From atoms to the macroscale: the quasicontinuum method*. [Consultado el 7 de junio de 2017].
http://www.kochmann.caltech.edu/research_QC.html
35. I.N. Levine. *Quantum Chemistry*. Englewood Cliffs, New jersey: Prentice Hall (1991). pp. 455–544.
36. M. Born, J.R. Oppenheimer. *Zur Quantentheorie der Molekeln*. Ann. der Phys. 84, 457 (1927).
37. V. Fock. *Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems*. Z. f. Phys. 61, 126 (1930).
38. J.C. Slater. *Note on Hartree's Method*. Phys. Rev 35, 210 (1930).
39. W. Kohn, L.J. Sham. *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*. Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
40. L. Colombo. *Tight-binding molecular dynamics: A primer*. Riv. Nuovo Cimento 28, 1 (2005).
41. T. Schlick. *Pursuing Laplace's Vision on Modern Computers*. IMA Volumes in Mathematics and Its Applications, 82. Springer-Verlag (1996). pp. 218–247.
42. M.T. Robinson, I.M. Torrens. *Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation*. Phys. Rev. B 9, 5008 (1974).
43. J.F. Ziegler. *Ion implantation: science and technology*. Academic Press (1988).
44. K. Nordlund, J. Keinonen, A. Kuronen. *Molecular Dynamics simulation of ion ranges at keV energies*. Accelerator Laboratory, University of Helsinki. [Consultado el 7 de junio de 2017].
<http://beam.helsinki.fi/~knordlun/poster/fysp95/>
45. L. Verlet. *Computer .Experiments.on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules*. Phys. Rev. 159, 98 (1967).

46. G. Sutmann. *Classical Molecular Dynamics*. John von Neumann Institute for Computing, Central Institute for Applied Mathematics: 10 (2002). pp. 211-254.
47. L.A. Marqués. *Simulación del sputtering y de la cristalización producidos por bombardeo iónico en Silicio*. Universidad de Valladolid, Departamento de Electricidad y Electrónica, Tesis Doctoral (1996).
48. R. Toreki. *The Zinblende (ZnS) Structure*. Interactive Learning Paradigms Incorporated (2015). [Consultado el 8 de junio de 2017].

<http://www.ilpi.com/inorganic/structures/zinblende/>
49. M.O. Steinhauser. *Molecular Dynamics: Studies of Synthetic and Biological Macromolecules*. InTech (2012).
50. F. Hedman. *Algorithms for Molecular Dynamics Simulations*. Universidad of Valladolid, Departamento de Física Química, Tesis Doctoral (2006).
51. Web oficial de LAMMPS. Laboratorio nacional de Sandia (EE.UU.).

<http://lammms.sandia.gov/>
52. K. Lykov *et al.* *Inflow/Outflow Boundary Conditions for Particle-Based Blood Flow Simulations: Application to Arterial Bifurcations and Trees*. PLoS Computational Biology 11(8): e1004410 (2015).
53. C. Anders *et al.* *Why Nanoprojectiles Work Differently than Macroimpactors: The Role of Plastic Flow*. Urbassek, Phys. Rev. Lett.: 108, 027601 (2012).
54. C.F. Cornwell y C.R. Welch. *Very-high-strength (60-GPa) carbon nanotube fiber design based on molecular dynamics simulations*. J. Chem. Phys.: 134, 204708 (2011).
55. K. I. Jacob *et al.* *Effect of Deformation Path Sequence on the Behavior of Nanoscale Copper Bicrystal Interfaces*, D. E. Spearot. J. Engr. Materials and Technology: 127 (2005). pp. 374-382.
56. J.E. Lennard-Jones. *Cohesion*. Proceedings of the Physical Society: 43, 431 (1931).

57. P.M. Morse. *Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels*. Phys. Rev.: 34, 57 (1929).
58. F.H. Sillinger, T.A. Weber. *Computer simulation of local order in condensed phases of silicon*. Phys. Rev. B: 31, 5262 (1985).
59. J. Tersoff. *New empirical approach for the structure and energy of covalent systems*. Phys. Rev. B: 37, 6991 (1988).
60. J. Tersoff. *Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties*. Phys. Rev. B: 38, 9902 (1988).
61. Y.B. Zhao. *Molecular dynamics simulation of nano-indentation of (111) cubic boron nitride with optimized Tersoff potential*. Appl. Surface Science: 382 (2016). pp. 309-315.
62. M.Q. Le. *Atomistic Study on the Tensile Properties of Hexagonal AlN, BN, GaN, InN and SiC Sheets*. J. of Computational and Theoretical Nanoscience: 11, 6 (2014). pp. 1458-14564.
63. J.F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark. *The Stopping and Range of Ions in Matter*. Volumen 1, Pergamon (1985).
64. E. Fermi. *Sulla quantizzazione del gas perfetto monoatomico*. Rendiconti Lincei (1926).
65. Documentación de LAMMPS. *Pair-style Tersoff-ZBL potential commands*. Laboratorio nacional de Sandia (EE.UU.). [Consultado el 8 de junio de 2017].
http://lammps.sandia.gov/doc/pair_tersoff_zbl.html
66. J. Tersoff. *Empirical Interatomic Potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon*. Phys. Rev. Lett.: 61, 2879 (1988).
67. J. Tersoff. *Carbon defects and defect reactions in silicon*. Phys. Rev. Lett.: 64, 15 (1990).
68. R. Devanathan, T. Diaz de la Rubia, W.J. Weber. *Displacement threshold energies in β -SiC*. J. Nucl. Mat.: 253 (1998). pp. 47-52.

69. I. Santos. *Multiscale modeling of dopant implantation and diffusion in crystalline and amorphous silicon*. Universidad de Valladolid, Departamento de Electricidad y Electrónica, Tesis Doctoral (2010).
70. I. Santos, L.A. Marqués, L. Pelaz *Modeling of damage generation mechanisms in silicon at energies below the displacement threshold*. Phys. Rev. B.: 74, 174115 (2006).
71. L.A. Marqués, M. Caturla, T. Diaz de la Rubia, G. Gilmer. *Ion beam induced recrystallization of amorphous silicon: A molecular dynamics study*. J. Appl. Phys.: 80, 6160 (1996).
72. L.A. Marqués, M. Caturla, T. Diaz de la Rubia, G. Gilmer. *Ion-beam processing of silicon at keV energies: A molecular dynamics study*. Phys. Rev. B: 54, 16683 (1996).
73. P. Sigmund. *On the number of atoms displaced by implanted ions or energetic recoil atoms*. Appl. Phys. Lett.: 14, 114 (1969).
74. M.J. Norgett, M.T. Robinson, I.M. Torrens. *A proposed method of calculating displacement dose rates*. Nucl. Eng. Des.: 33, 50 (1975).
75. J.M. Hernández-Mangas, J. Arias, L. Bailón, M. Jaraíz, J. Barbolla. *Improved binary collision approximation ion implant simulators*. J. Appl. Phys.: 91, 658 (2002).
76. S.E. Donnelly, R.C. Birtcher, V.M. Visnyakov, G. Carter. *Annealing of isolated amorphous zones in silicon*. Appl. Phys. Lett.: 82, 1860 (2003).
77. S. Ihara, S. Itoh, J. Kitakami. *Mechanisms of cluster implantation in silicon: A molecular-dynamics study*. Phys. Rev. B: 58, 10736 (1998).
78. T. Diaz de la Rubia, G.H. Gilmer. *Structural transformations and defect production in ion implanted silicon: a molecular dynamics simulation study*. Phys. Rev. Lett.: 74, 2507 (1995).
79. M.J. Beck, R.D. Schrimpf, D.M. Fleetwood, S.T. Pantelides. *Disorder-Recrystallization Effects in Low-Energy Beam-Solid Interactions*. Phys. Rev. Lett.: 100, 185502 (2008).
80. J Tersoff. *Chemical order in amorphous silicon carbide*. Phys. Rev. B.: 49, 23 (1994).
81. M.W. Zemansky. *Heat and Thermodynamics*. McGraw-Hill (1968).

82. S.M. Sze. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley and Sons, New York (1981).
83. H. Landolt, R. Börnstein. *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*. Springer, H. Ullmeier (2016).
84. H.J. McSkimin. *Measurement of Elastic Constants at Low Temperatures by Means of Ultrasonic Waves—Data for Silicon and Germanium Single Crystals, and for Fused Silica*. J. Appl. Phys.: 24, 988 (1953).
85. W.R.L. Lambrecht, B. Segall, M. Methfessel, M. van Schilfgaarde. *Calculated elastic constants and deformation potentials of cubic SiC*. Phys. Rev. B: 44, 3685 (1991).
86. F. Schaffler. *Properties of Advanced Semiconductor Materials*. John Wiley and Sons, New York, (2001). pp. 149-188.
87. J.A. de Saja, M.A. Rodríguez, M.L. Rodríguez. *Materiales. Estructura, propiedades y aplicaciones*. Paraninfo (2005).
88. E. Holmström, A. Kuronen, and K. Nordlund. *Threshold defect production in silicon determined by density functional theory molecular dynamics simulations*. Phys. Rev. B 78, 045202 (2008).
89. E. Holmström, K. Nordlund, and A. Kuronen. *Threshold defect production in germanium determined by density functional theory molecular dynamics simulations*. Phys. Scr. 81, 035601 (2010).
90. W. Wu, S. Fahy. *Molecular-dynamics study of single-atom radiation damage in diamond*. Phys. Rev. B: 49, 5 (1994).
91. S. Zhao *et al.* *Influence of high pressure on the threshold displacement energies in silicon carbide: A Car–Parrinello molecular dynamics approach*. Nucl. Instrum. Methods B: 286 (2012). pp. 119–123.
92. F. Gao, H.Y. Xiao, X.T. Zu, M. Posselt, W.J. Weber. *Structural phase transitions in high-pressure wurtzite to rocksalt phase in GaN and SiC*. Phys. Rev. Lett.: 103 (2009) 27405.

93. G. Lucas, L. Pizzagalli. *Ab initio molecular dynamics calculations of threshold displacement energies in silicon carbide.* Phys. Rev. B: 72 (2005) 161202(R).
94. L. Malerba, J.M. Perlado. *Basic mechanisms of atomic displacement production in cubic silicon carbide: A molecular dynamics study.* Phys. Rev. B: 65 (2002) 045202.
95. P. M. Agrawal, L. M. Raff, R. Komanduri. *Monte Carlo simulations of void-nucleated melting of silicon via modification in the Tersoff potential parameters.* Phys. Rev. B: 72, 125206 (2005).