

## Progresul lucrărilor în 2025 în ceea ce privește obiectivele proiectului

**O1.** 1) Investigarea defectelor în 4H-SiC de tip n crescute în diferite condiții (raport C/Si, flux de azot, rată de creștere) induse prin iradiere cu electroni de 6 MeV, fluențe de până la  $6 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ ; 2) studii de stabilitate termică care au avut ca scop dovedirea identității chimice a centrelor Z1,2 și EH6,7; 3) Au fost investigate și probe crescute furnizate de DRD3 sau de NIMP, în special pentru urmărirea corelației dintre Z1,2 și EH6,7.

**O2.** 1) investigații electrice (rezistivitate, Hall, CV/IV, DLTS) pe diode de Si care imită stratul de amplificare din LGAD-uri (proiectul DRD3 în WP3), fabricate cu diferite tipuri de impurități B, C, O și P (vezi Fig. 1). Acest tip de diode este etichetat în continuare ca diode GL. Pentru fiecare tip, au fost caracterizate o diodă cu (doar  $5 \times 10^{13} \text{ C/cm}^2$ ) și fără C, înainte și după iradierea cu protoni de 23 GeV și câțiva pași de tratament ulterior la 60°C; 2) investigații structurale FTIR în probe iradiate la temperaturi ambiante (am întâmpinat probleme cu modulul FTIR de temperatură joasă achiziționat recent); 3) investigații ale defectelor și studii de tratamente termice în nLGAD-uri expuse la iradiere locală cu fascicul de ioni de galiu de 1,285 MeV cu penetrare redusă, LGAD-uri de tip p expuse la fotoni de raze X de energie redusă (în jur de 2 keV) și LGAD-uri „deep” cu și fără implantare de C, la cererea colaboratorilor DRD3 (CNM Barcelona și PSI).

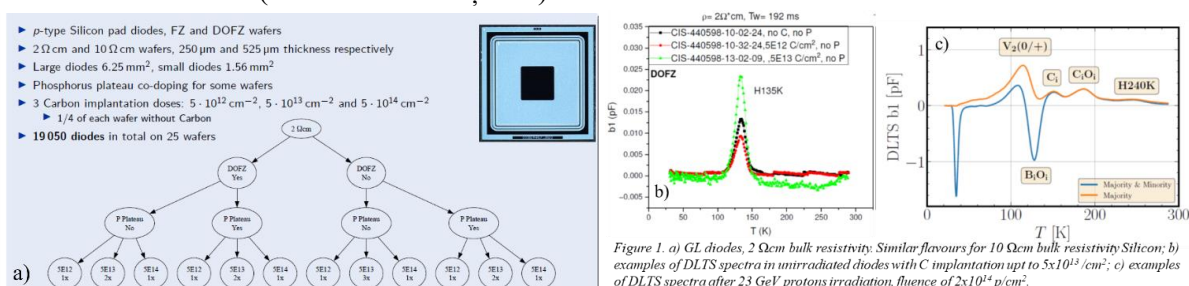


Figure 1. a) GL diodes, 2 Ωcm bulk resistivity. Similar flavours for 10 Ωcm bulk resistivity-Silicon; b) examples of DLTS spectra in unirradiated diodes with C implantation up to  $5 \times 10^{13} / \text{cm}^2$ ; c) examples of DLTS spectra after 23 GeV protons irradiation, fluence of  $2 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ .

**O3.** 1) Calcule Geant4 au fost efectuate pentru a simula efectele iradierii cu neutroni de 1 MeV și protoni de 23 GeV în joncțiuni  $n^{++}/p^+$ ; a fost determinat factorul NIEL pentru diferitele regiuni ale joncțiunilor; 2) Simulări de dinamică moleculară (MD) folosind codul LAMMPS pe structuri de siliciu, arătând generarea de perechi de locuri vacante-interstițiale (V-I) și evoluția defectelor complexe în timp, în condiții canonice; 3) Investigarea defectelor punctuale neutre și încărcate în cadrul calculelor teoriei funcționale a densității ab initio (DFT) folosind pachetul SIESTA; A fost implementat un flux de lucru cu randament ridicat pentru a determina posibilele stări metastabile și energiile de formare ale mai multor defecte, cu accent deosebit pe defectele de tip donor (e.g.  $\text{B}_\text{Si}\text{Si}_\text{i}$ ,  $\text{B}_\text{i}\text{O}_\text{i}$ ,  $\text{C}_\text{i}\text{O}_\text{i}$ ).

## Expertiză științifică și tehnologică acumulată în 2025

In **SiC**: Spectroscopiile de defecte efectuate pe probe ne-crescute și după iradiere cu electroni de 6 MeV, urmate de experimente de tratare termica, au adus dovezi pentru stabilirea naturii și a ratelor de introducere a defectelor induse de radiații în raport cu condițiile de creștere ale 4H-SiC. În special, generarea centrelor Z1,2 și EH6,7 a fost investigată în raport cu controversele din literatură privind identificarea ambelor semnale cu vacanță de Carbon. Am demonstrat că o astfel de identificare este valabilă doar în anumite cazuri și, prin urmare, concluzionăm că semnalele Z1,2 și EH6,7 nu pot proveni de la același defect.

In **Siliciu**: 1) Toate diodele GL prezintă o capcană intrinsecă de goluri cu o energie de activare de 0,27 eV, cu excepția diodelor GL co-implantate cu carbon în doza cea mai mare ( $5 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ ), unde se înregistrează spectre puternic perturbate. Fig. 2 prezintă defectele induse de protoni de 23 GeV în diferitele tipuri de diode GL și caracteristicile acestora; 2) Pe LGAD-uri, am reușit să corelăm investigațiile defectelor cu deteriorarea macroscopică observată. De exemplu, implantarea de C induce nivelul de energie la mijlocul intervalului (MGL), responsabil pentru curentul de scurgere ridicat și ușoara scădere a tensiunii de saracire a stratului de amplificare (Fig. 3); 3) Elucidarea naturii chimice a

defectului X în Si de tip p cu rezistivitate scăzută - un centru cu emisie de câmp îmbunătățită. Contrar impactului așteptat asupra  $N_{eff}$ , centrul s-a dovedit a fi nedăunător. Prin urmare, au fost efectuate investigații aprofundate ale ratei de emisie. Am demonstrat un mecanism de tunelare asistat de fononi pentru emisia de sarcină de pe defectul X, subliniind că acesta nu are impact asupra densității de sarcină efectivă  $N_{eff}$ . În plus, caracteristicile măsurate ale defectului X, inclusiv energia aparentă de activare, secțiunea transversală de captură și mecanismul de emisie, indică identificarea cu starea simplu donoare a di-vacanței încărcate,  $V2(+/0)$ .

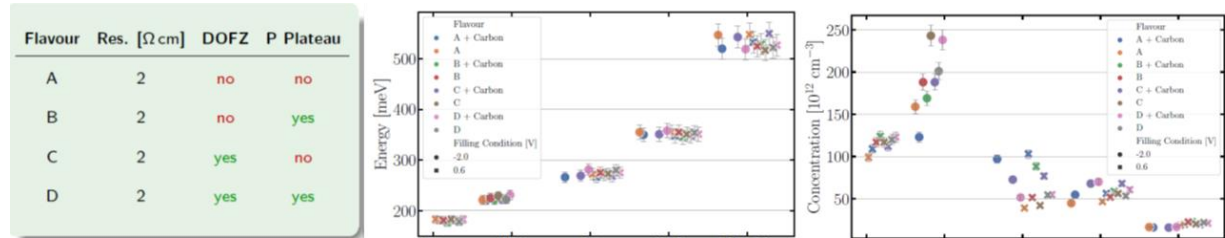


Figura 2. Rezultatele investigațiilor DLTS în diode GL iradiate cu  $2 \times 10^{14}$  protoni ( $23 \text{ GeV}/\text{cm}^2$ ).

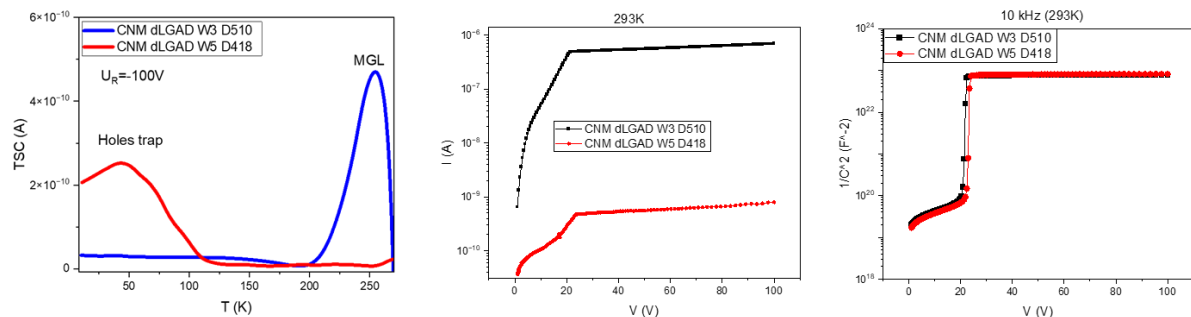


Figura 3. Rezultate pe LGAD-uri „deep” de tip p. Proba W3 este co-implantată cu C, iar W5 nu.

Simulările MD au fost efectuate pe super celule mari de Si (10000 de atomi). Un grup de 10 atomi de Si sunt deplasați din pozițiile lor cristalografice inițiale, prin setarea unor energii cinetice inițiale ridicate. Procesul de producere și recombinare a perechii V-I se poate vizualiza din cele câteva instantanee ale fazelor relevante prezentate în Fig. 4. Migrarea V și I este, de asemenea, evidențiată. Folosind DFT, am investigat defectele legate de Bor, cum ar fi  $B_S Si_i$  și  $B_i O_i$ , care prezintă un caracter de donator în condiții de dopare de tip p. Acest comportament este confirmat pentru  $B_S Si_i$  și, în cazul  $B_i O_i$ , pe lângă configurația standard, am identificat o altă stare metastabilă, cu o configurație structurală diferită, prezentând atomi de Bor și Oxigen în imediata apropiere (vezi Fig. 5).



Figure 4. MD simulations of vacancy-interstitial pair production and recombination. V (grey) / I (magenta)

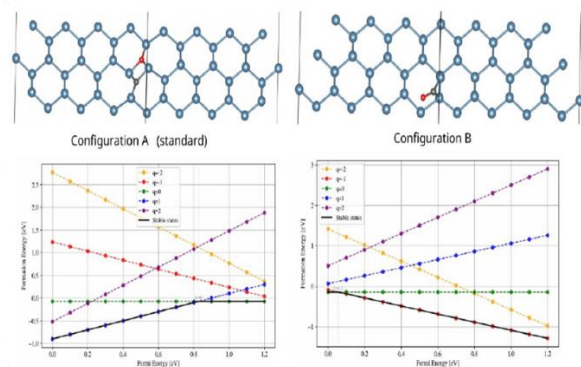


Figure 5. DFT simulations of  $B_i O_i$  defect in standard and metastable configuration.

Rezultatul tehnologic preconizat este proiectarea de materiale rezistente la radiații pe bază de Si și SiC pentru realizarea de senzori care să detecteze particule elementare.