



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	Simulação de irradiação de semicondutores irradiados por íons rápidos pesados via modelo de Potts
Autor	LUCAS COLOMBO FREISLEBEN
Orientador	GILBERTO LIMA THOMAS

Simulação de irradiação de semicondutores irradiados por íons rápidos pesados via modelo de Potts

Autor: Lucas Colombo Freisleben

Orientador: Gilberto Lima Thomas

Instituição: UFRGS

Semicondutores porosos são materiais de grande interesse científico e tecnológico devido a alterações na energia de gap e grandes razões área/volume, que os tornam promissores para construção de detectores, LEDs, entre outras aplicações. Em regimes específicos, alguns semicondutores apresentam a formação de poros ao serem irradiados – por exemplo, InSb ou InGa. A implantação iônica é ideal para o estudo de tais materiais, pois permite a obtenção de uma grande gama de morfologias com alta reprodutibilidade, apesar de não ser ideal para produção em larga escala devido a seu alto custo e tempo. Simulações computacionais permitem a obtenção de dados com aquisição experimental complexa, tal como a área interna de um material poroso. O modelo de Potts permite simular irradiações sem grandes perdas de precisão. Assim, o software Compucell foi utilizado para criar uma simulação da irradiação iônica de semicondutores. Baseando-se em simulações de dinâmica molecular da interação de um íon com o material, o programa periodicamente seleciona um cilindro no qual vazios são criados. Foi implementado um algoritmo para medida de tamanho médio de vazio e de parede em pontos diversos da simulação. Os parâmetros da simulação foram determinados com base nos experimentos; onde isto não foi possível, foram iteradas simulações com variações de parâmetros cujos resultados foram comparados com resultados experimentais. As simulações resultaram em estruturas similares com os resultados experimentais, com taxa de crescimento concordante, mas tamanho de voids diferentes. Estes resultados mostram que as simulações são promissoras, mas trabalhos futuros são necessários para refinar o modelo.