

METODOLOGÍA COMBINADA DE SIMULACIÓN PARA UNA CARACTERIZACIÓN COMPLETA DE LOS EFECTOS DE LA RADIACIÓN IONIZANTE EN DISPOSITIVOS DE DETECCIÓN

COMBINED SIMULATION METHODOLOGY FOR A COMPLETE CHARACTERIZATION OF IONIZING RADIATION EFFECTS IN DETECTION DEVICES

N. E. Martín^{*1,2}, M. Sofo Haro^{1,3} y M. Valente^{**1,2,4}

¹Instituto de Física Enrique Gaviola, CONICET, FAMAFA, UNC, Córdoba, 5000, Argentina

²Laboratorio de Investigaciones e Instrumentación en Física Aplicada a la Medicina e Imágenes por Rayos X - LIIFAMIR[®], FAMAFA, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, 5000, Argentina

³Reactor Nuclear RA0, Comisión Nacional de Energía Atómica, Centro Universitario de Tecnología Nuclear - FCEFyN, Ismael Bordabehere S/N X5016GCA, Córdoba, Argentina

⁴Centro de Física e Ingeniería en Salud, CFIS & Depto. de Ciencias Físicas, Universidad de la Frontera, Temuco, 4780000, Chile

Recibido: 01/12/2022; Aceptado: 01/09/2023

Los dispositivos de detección de radiación ionizante han sido ampliamente utilizados en los últimos años en diversas aplicaciones y campos experimentales como son las áreas de la física de altas energías, física nuclear e imágenes médicas. La descripción de su funcionamiento y la caracterización por medio de modelos computacionales, como simulaciones, ante la radiación ionizante son necesarias para comprender las características que presentan en términos de eficiencia, resolución y relación señal-ruido, ya que permiten optimizar parámetros que luego se utilizarán para realizar diferentes desarrollos y avances en los mismos. Los abordajes de modelado computacional se llevan a cabo de forma rutinaria utilizando diversas herramientas, por ejemplo, para el estudio de la interacción de la radiación con el detector teniendo en cuenta los procesos físicos, se utilizan herramientas de tipo Monte Carlo como PENELOPE, FLUKA o GEANT4. Por otro lado, una vez provocada la afectación inicial del sensor, para el estudio del transporte de pares electrón/hueco generados a través del dispositivo y la posterior formación de señales electrónicas, se utilizan herramientas que resuelven las ecuaciones de transporte mediante el método de elementos finitos, (Tecnología de Diseño Asistido por Computadora o TCAD), desarrolladas para ayudar a la industria microelectrónica a crear sus productos. Usualmente, los dos conjuntos de herramientas no están integrados y la caracterización por modelado computacional se realiza dividiendo el problema en etapas sucesivas e independientes. En este contexto, el presente trabajo se propone desarrollar una metodología que permita combinar los dos enfoques mediante el cual pueda rastrear paso a paso el flujo de simulación completo, desde la interacción de la radiación ionizante con el sensor hasta el transporte de la carga generada a los fotodiodos y, finalmente, a la generación de señales electrónicas.

Palabras Clave: Simulación Monte Carlo, TCAD, Metodología combinada.

Ionizing radiation detection devices have been widely used in recent years in various applications and experimental fields, such as high energy physics, nuclear physics, and medical imaging. Detailed description of their operational properties and their characterization by means of numerical modelling, as simulations, are key issue to understand the characteristics of radiation detectors in terms of efficiency, resolution and signal-to-noise ratio, since they allow optimizing parameters that will be further used. The modelling processes, as the simulations, are routinely carried out using various tools, like Monte Carlo approaches, for instance: PENELOPE, FLUKA or GEANT4 are used to study the interaction of the radiation with the detector accounting for the whole physical processes. However, transporting electron/hole pairs, as generated through the device sensor to conform the corresponding electronic signals uses tools based on the finite element method, such as TCAD (Technology Computer Aided Design), which are developed mainly to help the microelectronics industry to design products. Usually, modelling approaches for radiation transport and electronic signal production are not integrated, thus performing the simulation process by splitting the problem into successive independent phases. Within this framework, the present study proposes, implements, and reports on a novel methodology that allows combining the two approaches aimed at integrating the complete simulation, thus achieving a step-by-step integrated modelling flow to describe the interaction of ionizing radiation with the sensor along with the transport of the generated charge to the photodiodes and, finally, to the generation of electronic signals.

Keywords: Monte Carlo Simulation, TCAD, Combined Methodology.

<https://doi.org/10.31527/analesafa.2023.34.4.82>



ISSN 1850-1168 (online)

I. INTRODUCCIÓN

El uso de sensores de estado sólido se ha establecido en las últimas décadas como una herramienta estándar para de-

* nmartin@mi.unc.edu.ar ** mauro.valente@gmail.com

tección de radiación [1-3]. Las características que presentan este tipo de detectores en términos de resolución espacial, relación señal-ruido y eficiencia de detección han sido estudiadas en detalle, tanto de forma experimental como también con el uso de herramientas de simulación [4-7]. Las simulaciones detalladas de este tipo de dispositivos son una parte esencial para su proceso de diseño y desarrollo, en virtud de que permiten una comprensión rápida de ciertas características de manera precisa y conveniente, y ayudan a determinar un rango de operatividad razonable para que los parámetros del dispositivo se logren durante el proceso de fabricación.

Existen varias herramientas de simulación disponibles, cada una diseñada para un aspecto específico del problema. Dentro de las herramientas de simulaciones se pueden identificar dos categorías generales, aquellas que se centran en la interacción de la radiación ionizante con el material de detección y aquellas que caracterizan la respuesta del dispositivo una vez producida la deposición de energía a través del transporte de carga. Actualmente, existen diversos paquetes utilizados en la primera categoría que están específicamente diseñados e implementados en la comunidad física, entre ellos pueden mencionarse: FLUKA [8], PENELOPE (*open source*) [9] y GEANT4 [10]; entre otros. Mientras que la segunda categoría, incluye varios instrumentos comerciales y librerías *open source*, llamados *Tecnologías de diseño asistido por computadora* (TCAD, de sus siglas en inglés) que se desarrollaron para ayudar a la industria de la microelectrónica a diseñar sus productos. Existen algunos esfuerzos recientes de simulación basados en la combinación de simulación Monte Carlo de distribuciones de electrones y simulaciones TCAD [11, 12], ambos centrados en usos muy específicos. Cabe remarcar que generalmente los dos conjuntos de herramientas no están integrados y el modelado de la respuesta integral del dispositivo se realiza dividiendo el problema. Por un lado, puede calcularse la respuesta de una perturbación a nivel del material sensible, por medio del estudio de los propios estímulos iniciales, lo que a menudo proviene de simulaciones Monte Carlo de la interacción entre la radiación ionizante y el material de detección. Luego, una vez producida la carga por ionizaciones, la simulación de la respuesta electrónica requiere la parametrización de la respuesta del dispositivo a un estímulo conocido para predecir la respuesta promedio en un entorno real con la orientación, potencia y tipo del dispositivo.

En el presente trabajo, se presenta, desarrolla e implementa una metodología original combinada donde todo el proceso de simulación puede seguirse paso a paso, comenzando desde la interacción de la radiación ionizante con el sensor, hasta el proceso de transferencia de carga en el detector y finalmente en una generación de señales electrónicas.

II. GENERACIÓN DE EVENTOS FÍSICOS MEDIANTE TÉCNICAS MONTE CARLO

Para simular los procesos y fenómenos involucrados en la irradiación de un detector, generalmente se utilizan herramientas Monte Carlo modernas y de uso general para el transporte de radiación ionizante en la materia. Existen

diversas herramientas que describen el transporte acoplado de fotones, electrones, positrones, iones, etc., en geometrías complejas y materiales de composición arbitraria, con aplicación en un rango de energías que varía según las capacidades de cada código de simulación, para el caso de PENELOPE, el rango va desde los pocos centenares de eV hasta 1 GeV. Estos algoritmos se basan en un modelo de dispersión que combina bases de datos numéricas con modelos analíticos de secciones eficaces para los diferentes mecanismos de interacción. Estas herramientas se han desarrollado principalmente para su uso en aplicaciones de física de alta energía, pero también adquirió interés en muchas áreas, como aplicaciones espaciales, aplicaciones médicas y sistemas impulsados por aceleradores. La flexibilidad de estos códigos permite a los usuarios implementar sus propias adaptaciones para describir la interacción de partículas en diferentes materiales, después de haber definido una geometría de simulación con las condiciones de contorno e iniciales requeridas.

III. SIMULACIÓN DE DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS MEDIANTE TCAD

TCAD es una rama de la automatización del diseño electrónico que modela la fabricación y el funcionamiento de los dispositivos semiconductores, basándose generalmente, aunque no solo, en el análisis de elementos finitos. Estas herramientas son paquetes de simulación que permite desarrollar y optimizar el procesamiento de semiconductores, simulando numéricamente el comportamiento eléctrico de un único dispositivo semiconductor aislado o de varios dispositivos combinados en un circuito.

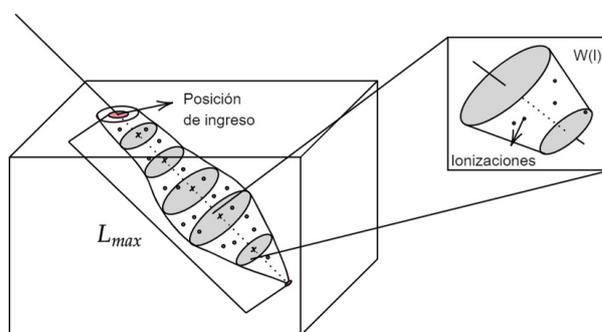


FIG. 1: Un ion pesado que penetra en un semiconductor. Su trayectoria está definida por una longitud y se supone que la influencia espacial transversal es, a primer orden, simétrica con respecto al eje de la trayectoria.

Para el análisis de efectos de partículas ionizantes en dispositivos electrónicos, el flujo de trabajo del motor de simulación comienza con la posición y dirección inicial de entrada de las partículas ionizantes, junto con un perfil de ionización a lo largo del track, de características acotadas, introducido por el usuario, en el material detector. Básicamente compuesto por una trayectoria lineal con un determinado LET (*Linear Energy Transfer*), o fragmentando el track en tramos de distinto LET, *i.e.* abordando la distribución de LET a lo largo el track por una aproximación de tramos continuos, como muestra la Fig. 1. Estos datos pueden ser definidos e ingresados a la plataforma de cómputo mediante diversos parámetros dependiendo del tipo de par-



FIG. 2: Flujo de trabajo para la metodología propuesta combinada mediante interfaz gráfica conformada por cuatro pasos en los que intervienen herramientas de simulación Monte Carlo para la interacción de la radiación ionizante con la materia, herramientas TCAD para la generación de señales eléctricas y herramientas de interfaz para la comunicación entre ellas.

tícula incidente. Los portadores producidos por la radiación incidente se desplazarán luego bajo las acciones combinadas del potencial electrostático, dependiente de las condiciones específicas de operación del dispositivo, y el gradiente de concentración del portador; junto a propiedades físicas y radiológicas del material sensible empleado. Las señales eléctricas se forman consecuencia del movimiento de los portadores de carga y también por el desplazamiento de corriente debido al cambio en el campo electrostático.

IV. DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA ORIGINAL PROPUESTA

En la Fig. 2, se describe el flujo de trabajo que se ha propuesto e implementado para combinar ambos modelos de simulación y obtener una herramienta que describa el proceso de forma completa.

El flujo de trabajo implementado se separa en las siguientes cuatro etapas:

1. Herramienta con método Monte Carlo.
2. Interfaz para generación de entradas a la herramienta TCAD.
3. Herramienta TCAD.
4. Post-procesamiento para análisis y presentación de resultados.

En la Fig. 2, se puede observar la primera etapa del procedimiento donde se definen las entradas para la simulación con la herramienta Monte Carlo. Éstas herramientas generalmente necesitan de archivos de entrada como un *input*, el que puede incorporar la geometría, o bien ésta requerir un archivo separado y los materiales. El archivo de *input* permite definir la configuración de la simulación, entre otros: las energías de absorción de los materiales y las características de la fuente de irradiación que se utilizarán en la simulación. El archivo de geometría, o el bloque del *input* dedicado a la geometría describe, básicamente, la distribución espacial de masa, *i.e.*: la configuración, el tamaño y la posición de los objetos a simular. Por último, los archivos de materiales contienen la información sobre las propiedades físico-radiológicas necesarias para modelar el transporte y colisión de la radiación en el medio. Como se muestra en la Fig. 3, en las simulaciones basadas en técnicas Monte Carlo, es posible realizar manipulaciones y adaptaciones específicas basadas en el espacio de fase de cada una de las partículas para extraer todo tipo de información acerca de

la trayectoria, la energía y la generación de *scattering* e ionizaciones en el material. Cabe mencionar que, a modo de ejemplo para verificar la implementación de la metodología propuesta, se utiliza el código PENELOPE. En la segunda etapa, como se aprecia en la Fig. 2, los datos adquiridos de la simulación Monte Carlo son procesados para generar las entradas a las herramientas de simulación TCAD. La estrategia de procesamiento para compatibilizar ambas herramientas, consiste en segmentar la trayectoria estocástica seguida por la partícula ionizante, en diferentes tramos lineales de diferente LET, como se muestra en la Fig. 4. Esta metodología permite segmentar la trayectoria estocástica de partículas ionizantes en diferentes tamaños de tramos, logrando ingresar trayectorias tortuosas en las herramientas TCAD. Este enfoque otorga una flexibilidad que de otro modo sería inviable de obtener, siendo posible dividir un evento en dos o más simulaciones separadas.

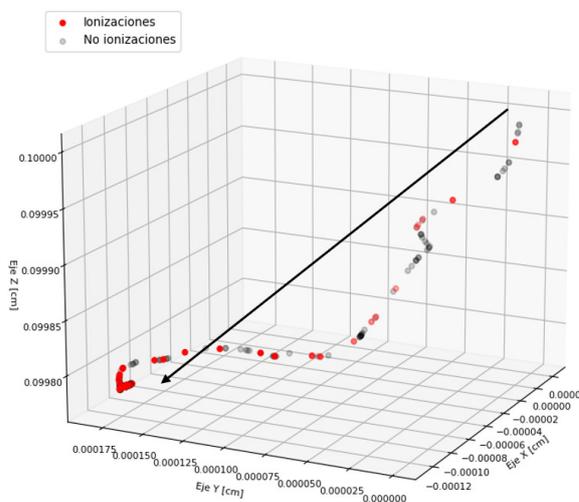


FIG. 3: Trayectoria de un electrón en un volumen de silicio mediante simulaciones con método Monte Carlo. El vector negro marca la dirección del movimiento de la partícula, en rojo las ionizaciones producidas y en gris otros tipos de interacciones que no produjeron ionización. Resultados obtenidos por adaptaciones al código PENELOPE.

En la tercera etapa, se utiliza la herramienta de simulación TCAD donde los datos generados en el paso anterior (ver Fig. 4), se introducen en archivos de simulación con formatos predefinidos. En estos archivos se definen los procesos físicos, el tipo de irradiación (iones pesados, radiación gamma y partículas alfa), la geometría y las características del sensor, que parte son extraídas de la geometría definida en la herramienta Monte Carlo.

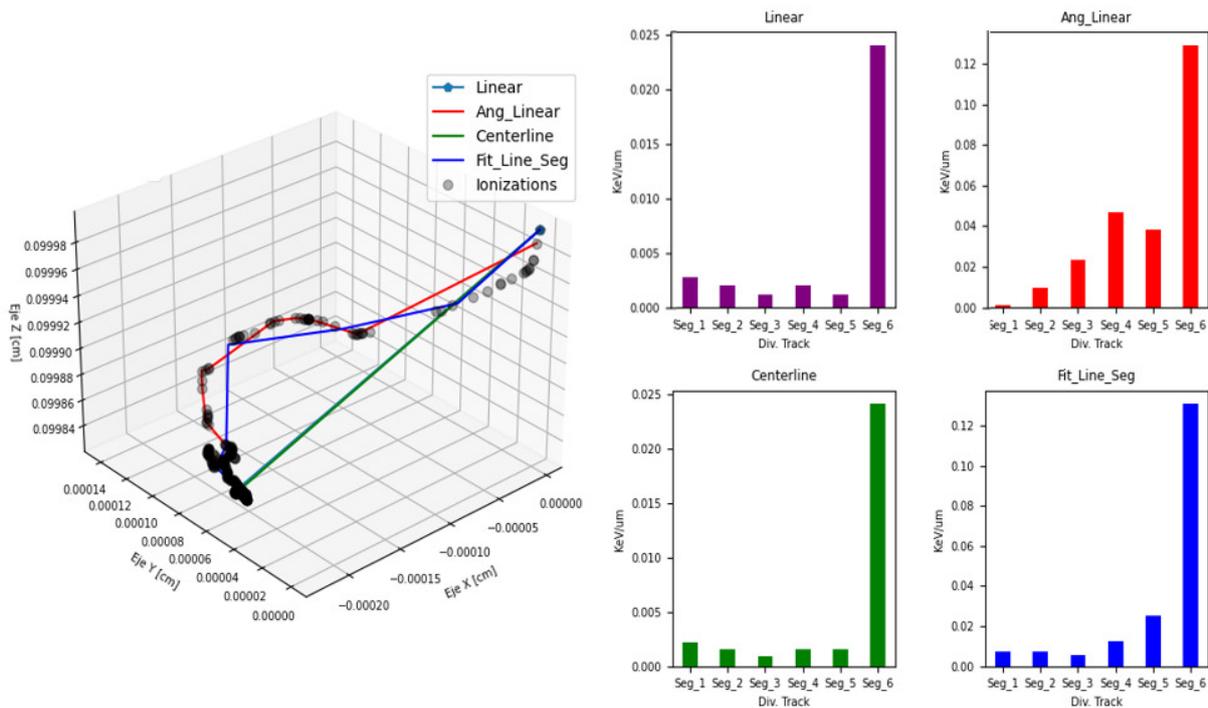


FIG. 4: Interfaz de procesamiento para la generación de datos de entrada para TCAD. La interfaz permite calcular la longitud de la trayectoria, la posición y dirección de ingreso al semiconductor, las posiciones de eventos de ionización y el LET, mediante diversas técnicas de ajuste. Estas técnicas de ajuste se amoldan a la trayectoria de la partícula de 4 formas diferentes. En la primera columna, en color púrpura, se realiza un ajuste de primer orden donde se tiene en cuenta solamente los puntos inicial y final de la trayectoria. En color verde, también en una aproximación de primer orden, se tiene en cuenta el punto inicial y un punto final ficticio que permite realizar un ajuste lineal que mejor se adecue a la trayectoria de la partícula. Luego en la segunda columna, en color rojo, se realiza un ajuste lineal por tramo donde cada segmento se define en base a un cambio angular pronunciado que tenga la trayectoria de la partícula. Y por último, en color azul, se realiza un ajuste lineal por tramos donde el usuario puede definir el número de segmentos con el que desea particionar la trayectoria. Estos métodos de ajuste permite definir y calcular el LET.

Por último, en la cuarta etapa, mediante la utilización de una interfaz de post-procesamiento, de desarrollo propio, se obtienen los resultados finales del proceso completo como la respuesta, la eficiencia, la generación de pulsos, la carga recolectada, entre otras características. Las etapas indicadas de la presente propuesta han sido automatizadas e implementadas mediante una interfaz escrita en lenguaje de programación *Python* que permite obtener los datos anteriormente mencionados y generar los *scripts* de entrada para TCAD.

V. CONCLUSIONES

El presente trabajo reporta sobre los lineamientos principales de una novedosa y original metodología propuesta para integrar y combinar la simulación de los procesos físicos, como la interacción de fotones con detectores semiconductores, para superar algunas de las limitaciones del uso separado de diferentes paquetes de simulación. Se ha reportado detalladamente la implementación de la metodología propuesta por medio de un flujo de trabajo integrado desde la simulación de deposición de energía con herramientas Monte Carlo hasta el transporte de carga y la formación de señales con herramientas TCAD, desarrollando algunos métodos para automatizar la creación, el envío y la agregación de datos del trabajo de simulación.

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo fue parcialmente financiado por CONICET, proyecto **PIP 11220200100751CO**, por SeCyT-UNC proyecto **33620180100366CB** y por la Universidad de La Frontera, Chile por medio del proyecto **DI21-0068**. Este trabajo utilizó recursos computacionales del CCAD de la Universidad Nacional de Córdoba (<https://ccad.unc.edu.ar/>), que forman parte del SNCAD del MinCyT de la República Argentina.

REFERENCIAS

- [1] A. Karmakar, J. Wang, J. Prinzie, V. De Smedt y P. Leroux. A Review of Semiconductor Based Ionising Radiation Sensors Used in Harsh Radiation Environments and Their Applications. *Radiation* **1**, 194-217 (2021).
- [2] K. Pradeep Kumar, G. Shanmugha Sundaram, B. Sharma, S. Venkatesh y R. Thiruvengadathan. Advances in gamma radiation detection systems for emergency radiation monitoring. *Nucl. Eng. Technol.* **52**, 2151-2161 (2020).
- [3] M. I. Ahmad, M. H. Ab. Rahim, R. Nordin, F. Mohamed, A. Abu-Samah y N. F. Abdullah. Ionizing Radiation Monitoring Technology at the Verge of Internet of Things. *Sensors* **21**, 7629 (2021).
- [4] M. Endrizzi, P. Oliva, B. Golosio y P. Delogu. CMOS APS detector characterization for quantitative X-ray imaging. *Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A* **703**, 26-32 (2013).

- [5] E. Dubaric, C. Fröjdh, H.-E. Nilsson y C. Petersson. Resolution and noise properties of scintillator coated X-ray detectors. *Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A* **466**, 178-182 (2001).
- [6] F. A. Geser, D. Chacón, R. Figueroa, F. Malano, M. Santibañez y M. Valente. Characterization of the VARIAN@PaxScan 2020+ flat panel detector for quantitative X-ray imaging. *X-Ray Spectrometry* **45**, 169-175 (2016).
- [7] N. Martín, M. Sofo Haro y M. Valente. Characterization of the xr-100-cdte amptek spectrometer response by means of monte carlo simulations using the penelope code. *Anales AFA* **33**, 42-47 (2022).
- [8] *FLUKA: a fully integrated particle physics MonteCarlo simulation package* <http://www.fluka.org/fluka.php>.
- [9] *PENELOPE: A Code System for Monte-Carlo Simulation of Electron and Photon Transport* <http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1525>.
- [10] *Geant4 a toolkit for the simulation of the passage of particles through matter* <http://geant4.cern.ch/>.
- [11] O. Marcelot, C. Marcelot, F. Corbière, P. Martin-Gonthier, M. Estribeau, F. Houdellier, S. Rolando, C. Pertel y V. Goiffon. A new TCAD simulation method for direct CMOS electron detectors optimization. *Ultramicroscopy* **243**, 113628 (2023).
- [12] T. Ozdemir, S. Meroli, E. Pilicer, A. Mencaroni, B. Alpat, S. Ozkorucuklu, D. Passeri, P. Placidi y L. Servoli. A combined approach to the simulation of ionizing radiation effects in silicon devices. *J. Instrum.* **6**, T05001 (2011).