

Marcos Antônio de Oliveira Deros

**Estudo das propriedades de diamantes
policristalinos para uso em detectores de
partículas de alta energia**

Porto Alegre

2024

Marcos Antônio de Oliveira Deros

**Estudo das propriedades de diamantes policristalinos para
uso em detectores de partículas de alta energia**

Dissertação de Mestrado apresentada como
requisito parcial para obtenção do título de
Mestre em Física pelo Programa de Pós-
Graduação em Física da Universidade Federal
do Rio Grande do Sul.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Gustavo Gil da Silveira

Coorientador: Prof. Dr. Luis Gustavo Pereira

Porto Alegre

2024

Marcos Antônio de Oliveira Deros

Estudo das propriedades de diamantes policristalinos para uso em detectores de partículas de alta energia/ Marcos Antônio de Oliveira Deros. – Porto Alegre, 2024-

73 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Gustavo Gil da Silveira

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Física
Programa de Pós-Graduação em Física, 2024.

1. diamante policristalino. 2. detector de partículas. I. Prof. Dr. Gustavo Gil da Silveira. II. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. III. Instituto de Física. IV. Estudo das propriedades de diamantes policristalinos para uso em detectores no regime de altas energias

CDU 02:141:005.7

Agradecimentos

O primeiro agradecimento só podia ser aos meus pais e a minha avó, que sempre me apoiaram e me ajudaram em tudo que precisei.

Agradeço também a minha companheira Amanda, que sempre esteve junto comigo durante toda a minha trajetória acadêmica, e entendeu os inúmeros finais de semana dedicados aos estudos.

Não poderia deixar de agradecer ao pessoal do prédio M e amigos: Rodrigo, Pedro, Omar, Roier, Primo, Marco e Newton (não é quem você pensa) pelas ótimas conversas e cafezinhos.

Agradeço ao meu orientador, Gustavo Gil, por todo o apoio nesse trabalho, mas também por ter confiado em mim em outros projetos que foram importantes para minha evolução profissional e acadêmica.

Um agradecimento especial ao Dr. Luis Gustavo Pereira, coorientador desse trabalho e que esteve me ajudando e orientando desde quando eu estava na graduação. Obrigado por sempre confiar no meu trabalho e na minha capacidade de alçar voos maiores.

Agradeço a todos que estiveram comigo e que me ajudaram de alguma forma durante esse mestrado e no curso de Física.

“One must try.”
– *Paul Dirac*

Resumo simplificado (*Press release*)

Na física de altas energias, estuda-se os componentes fundamentais que constituem a matéria através de colisões de partículas de altas energias. A coleta de informações provenientes dessas colisões é realizada por meio de diversos tipos de detectores, responsáveis por registrar os produtos resultantes desses eventos. Os detectores de estado sólido são aqueles em que o meio ionizante é um sólido e não um gás. Quando partículas interagem com um sensor de estado sólido, como exemplificado na Figura 0.1, elas geram pares elétron-lacuna, que movem-se no material induzindo corrente que é captada por um sistema eletrônico.

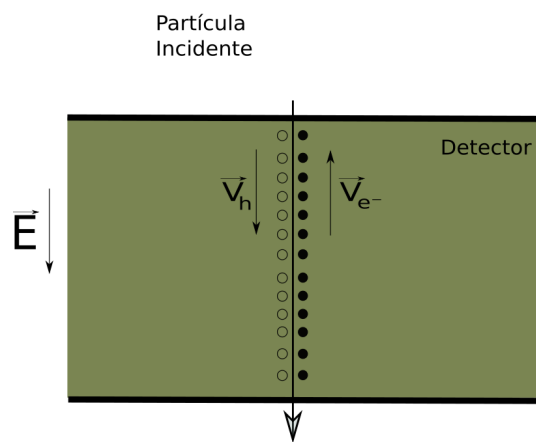


Figura 0.1 – Ilustração das cargas geradas e o seu movimento em um detector de estado sólido.

Considerando que o Grande Colisor de Hádrons do CERN planeja aumentar o número de colisões de partículas em 2029, o estudo de detectores mais resistentes à radiação entrou em evidência. O diamante sintético é um material bastante promissor devido a essa característica. Dois tipos podem ser produzidos: monocristalino e policristalino. O policristalino possui defeitos de contornos de grão que deterioram significativamente a coleta de carga.

Neste trabalho, desenvolvemos uma simulação computacional de detectores planares de diamante policristalino com o objetivo de comparar sua resposta com o diamante monocristalino no regime de altas energias e avaliar a possibilidade de uso no Espectrômetro Preciso de Prótons do CMS (PPS). A eficiência do detector de diamante policristalino para diferentes tipos de partículas e íons foi de no máximo 40%, indicando que esse tipo de diamante não pode ser utilizado no PPS, e nem para medidas mais precisas, como de energia, mas apenas para contagem de partículas.

Palavras-chaves: detectores de prótons. diamante artificial. estrutura policristalina. espectrômetro preciso de prótons.

Resumo

O estudo de detectores de partículas resistentes à radiação está em evidência na física de altas energias, especialmente pelo considerável aumento na luminosidade na operação do Grande Colisor de Hádrons do CERN programada para iniciar em 2029. O diamante policristalino poderia ser uma potencial alternativa, destacando-se por menor custo em comparação ao diamante monocristalino, contudo a ineficiência na coleta de carga é conhecida devido aos contornos de grãos. Neste trabalho, desenvolvemos uma simulação computacional de detectores planares de diamante policristalino com o intuito de reproduzir o seu desempenho frente ao diamante monocristalino no regime de altas energias e verificar o grau de aprimoramento necessário para emprego no Espectrômetro Preciso de Prótons do Solenoide Compacto de Múons. A eficiência do detector para partículas minimamente ionizantes varia de 13% a 40%, sendo o diamante de crescimento colunar o que apresenta melhor desempenho. A resposta do detector frente a prótons de 7 TeV, em condições análogas às do Espectrômetro Preciso de Prótons, revela-se limitada, com eficiência de até 30%, indicando sua inadequação para essa situação específica. Em relação aos íons, como partículas alfa de 5,8 MeV, apenas o diamante de crescimento colunar demonstra ser apropriado, exibindo uma eficiência de 33%. A baixa eficiência observada leva a classificar o diamante policristalino como um material indicado para a aplicação de contagem de partículas. Simplificações utilizadas na simulação, como a modelagem dos grãos e a geometria em duas dimensões podem subestimar a queda na eficiência, sendo um aspecto a ser aprimorado futuramente.

Palavras-chaves: detectores de prótons. diamante sintético. estrutura policristalina. espectrômetro preciso de prótons.

Abstract

The study of radiation-resistant particle detectors is prominent in high-energy physics, mainly due to the increase in the luminosity of CERN experiments scheduled for the end of 2029. Polycrystalline diamond could be a potential alternative, notable for its lower cost compared to the monocrystalline diamond. However, the inefficiency in charge collection is known due to grain boundaries. In this work, we developed a computational simulation of planar polycrystalline diamond detectors to compare their response with that of monocrystalline diamond in the high-energy regime and estimate its suitability for use in the Compact Muon Solenoid's Proton Precision Spectrometer. Additionally, other materials, such as Silicon Carbide, may be studied as alternatives. The detector efficiency for minimally ionizing particles varies from 13 % to 40 %, with columnar growth diamond showing the best performance. The detector's response to 7 TeV protons, under conditions analogous to the Precision Proton Spectrometer, is limited, with efficiency up to 30 %, indicating its inadequacy for this specific situation. Regarding ions, such as 5.8 MeV alpha particles, only columnar growth diamond proves suitable, exhibiting an efficiency of 33 %. The observed low efficiency suggests that polycrystalline diamond is better suited for particle counting applications. Simplifications in the simulation, such as grain modeling, may underestimate the efficiency drop, an aspect to be improved in the future.

Key-words: proton detectors. synthetic diamond. polycrystalline structure. Proton Precision Spectrometer.

Lista de ilustrações

Figura 0.1 – Ilustração das cargas geradas e o seu movimento em um detector de estado sólido.	7
Figura 1.1 – Ilustração dos subsistemas de detectores do experimento CMS (SAKUMA; MCCAULEY, 2014; CMS Collaboration, 2019). Detectores de silício fazem o traçamento de partículas, seguido de calorímetros eletromagnéticos e hadrônicos. Mais afastados encontram-se as câmaras de múons e o calorímetro frontal.	2
Figura 1.2 – Ilustração de um dos detectores simétricos do PPS, situados a uma distância de ~ 200 metros do ponto de colisão. Esses detectores compreendem os chamados <i>Roman Pots</i> , nos quais estão instalados os dispositivos de rastreamento e medição de tempo de voo (BOSSINI, 2020a).	3
Figura 1.3 – (Esquerda) Simulação da fluência de prótons ($\text{próton}/\text{cm}^2$) na área do sensor do PPS em 100 fb^{-1} . (Direita) Detectores de tempo de voo do PPS em um Roman Pot, compostos de 4 planos. Informações da Ref. (BOSSINI, 2020b).	3
Figura 1.4 – Comparação entre um (a) detector planar e (b) 3D (KOYBASI et al., 2010). No detector 3D, os eletrodos ficam dentro do material, diminuindo o tempo de coleta de carga.	4
Figura 1.5 – Foto da seção transversal de um diamante sintetizado pelo método de CVD em um substrato de silício produzido no LAPMA utilizando um microscópio óptico.	5
Figura 1.6 – Foto da face de crescimento de um diamante sintetizado pelo método de CVD em um substrato de silício produzido no LAPMA utilizando um microscópio óptico.	5
Figura 2.1 – Poder de freamento eletrônico e nuclear de prótons na água (KRAAN, 2015). Para baixas e médias energias, modelos diferentes reproduzem a perda de energia.	8
Figura 2.2 – Energia perdida em diferentes materiais na região próxima do mínimo, onde as partículas são consideradas MIP (ZYLA et al., 2020).	9
Figura 2.3 – Funções da variação da perda de energia de píons de 500 MeV em silício normalizada no MPV para diferentes espessuras (ZYLA et al., 2020). Quanto maior a espessura, mais próximo de uma gaussiana a distribuição fica.	10

Figura 2.4 – Comparação entre a distribuição de Landau (vermelho) e a gaussiana (preto) (BULYAK; SHUL’GA, 2022). Nota-se que a média da distribuição gaussiana não coincide com o valor mais provável da distribuição de Landau.	10
Figura 2.5 – Gráfico da energia ϵ em função do vetor de onda k para (a) modelo de elétron livre e (b) elétron em uma rede monoatômica de constante a (KITTEL, 2004).	12
Figura 2.6 – Representação dos tipos de materiais no diagrama de bandas (DEROS, 2022). A diferença entre o Semicondutor (esquerda) e o Isolante (centro) é o tamanho da lacuna (E_g). O condutor (direita) não possui banda de valência pois a última banda não é totalmente preenchida.	13
Figura 2.7 – Evolução de uma distribuição de elétrons em um espaço unidimensional sob ação de um campo elétrico. A distribuição se move ao longo do tempo, mantendo o mesmo formato.	14
Figura 2.8 – (Esquerda) Dinâmica da densidade de elétrons quando há apenas difusão. A distribuição alarga-se ao longo do tempo devido à difusão, mas mantém-se na mesma posição. (Direita) Dinâmica da densidade de elétrons com deriva e difusão. Ao mesmo tempo que a distribuição de elétrons se move sob a ação do campo elétrico, ela também se alarga por conta da difusão.	15
Figura 2.9 – Dinâmica de elétrons com deriva e recombinação. Ao longo do tempo, a amplitude da distribuição diminui pela perda de cargas.	16
Figura 2.10 – (Superior) Diagrama de fase das concentrações de carbono, hidrogênio e oxigênio para crescimento de diamante (SCHWANDER; PARTES, 2011). A região preta corresponde a concentração dos três elementos onde é possível haver crescimento de diamante. (Inferior) Diagrama de fase do carbono (SCOTT, 2014). Na região amarela há condições apropriadas para produção da fase do diamante no CVD, mostrando que é um método operante a baixa temperatura e pressão. Desvios nessas duas grandezas durante o processo pode sintetizar o carbono na forma de grafite, gerando mais defeitos.	19
Figura 2.11 – (a) Ilustração do crescimento dos grãos ao longo do tempo no método de CVD para produção de diamante policristalino. (b) Foto de uma amostra de diamante policristalino utilizando um microscópio eletrônico de varredura (TRAJKOV, 2004).	21

Figura 2.12—Ilustração do princípio de funcionamento de um detector de diamante (SHIMAOKA S. KOIZUMI; KANEKO, 2021). Uma partícula MIP passa pelo detector, gerando pares elétron-lacuna no material, que se movem por conta de uma diferença de potencial e induzem corrente nos eletrodos. Essa corrente é posteriormente amplificada em um circuito elétrico.	22
Figura 2.13—Corrente induzida em função do tempo de um elétron em um detector planar.	24
Figura 2.14—Carga induzida em função do tempo de um elétron em um detector planar.	24
Figura 2.15—Elétron sob a ação de um campo elétrico em um detector planar. . . .	24
Figura 2.16—Ilustração dos dois tipos de armadilhas no diagrama de bandas (PIPEK, 2018). Quando o tempo de liberação é muito maior que o tempo de deriva ($\tau_{DD}/T_R \gg 1$), a armadilha é profunda (<i>deep trap</i>). No caso em que o tempo de liberação é comparável ou menor que o tempo de deriva ($\tau_{DS}/T_R < 10$), a armadilha é rasa (<i>shallow trap</i>).	26
Figura 3.1 – Representação do espaço discretizado pela rede. (i, j) é um ponto arbitrário no espaço.	30
Figura 3.2 – Ilustração de uma partícula MIP passando pelo detector. A linha pontilhada é trajetória que ela faria dentro do material quando desconsideramos o efeito de espalhamentos múltiplos.	31
Figura 3.3 – (Superior) Histograma da distribuição de cargas em um detector de uma partícula do tipo MIP incidindo a 0° . A linha vermelha tracejada é a média de pares elétrons-lacuna por intervalo. (Inferior) Histograma bidimensional da distribuição de cargas em um detector de uma partícula do tipo MIP incidindo a 30°	33
Figura 3.4 – Exemplo da simulação em Geant4 de um próton de alta energia no diamante. O paralelepípedo de contornos vermelhos é o diamante, a linha azul é o próton e os pontos amarelos são os locais onde houve perda de energia.	34
Figura 3.5 – Validação do poder de freamento de prótons no diamante da simulação com tabelas do SRIM e do PSTAR.	35
Figura 3.6 – Histograma da carga criada por 10^4 eventos de prótons de 3 GeV em $500 \mu\text{m}$	35
Figura 3.7 – Poder de freamento de uma partícula alfa de 5,8 MeV em função da posição z no diamante.	36
Figura 3.8 – Comparação da carga induzida na simulação com o modelo teórico para um detector planar.	37

Figura 3.9 – Carga induzida com efeito de <i>trapping</i> comparada com o modelo teórico. Utilizou-se $\tau_{i,j}^T = 0,1$ ns para elétrons e $\tau_{i,j}^T = 10$ ns para lacunas.	39
Figura 3.10–Eficiência do detector em relação à razão entre a soma do livre caminho médio dos portadores de carga e a espessura do detector para partículas do tipo MIP. Consideramos que $\lambda_h = 1,3\lambda_e$ (BÄNI et al., 2019).	40
Figura 3.11–Ilustração do modelo de grãos PCD. O tamanho lateral do grão ($d_{\text{grão}}$) é o tamanho da aresta do quadrado.	41
Figura 3.12–(Esquerda) Ilustração do modelo de grãos HOD. O tamanho lateral do grão ($d_{\text{grão}}$) é a largura do cone após a saturação. (Direita) Crescimento dos grãos no modelo HOD. O tamanho lateral do grão cresce linearmente até uma altura de saturação (h_1 ou h_2). A altura até essa saturação é um parâmetro da simulação.	41
Figura 3.13–Eficiência em função da posição inicial de incidência para ângulos de $\pm 1^\circ$ e 0° . O tamanho lateral do grão é de $50 \mu\text{m}$	42
Figura 3.14–(Superior) Eficiência em função da posição inicial de MIPs incidindo com ângulo normal ao detector. (Inferior) Contornos de grão de $20 \mu\text{m}$ discretizados na rede.	43
Figura 3.15–Comparação da carga induzida em MIPs para todos os tipos de diamantes e defeitos. O tamanho lateral do grão do diamante policristalino de todas as curvas é de $30 \mu\text{m}$, com exceção da curva pontilhada roxa, que possui um tamanho lateral do grão de $90 \mu\text{m}$	44
Figura 4.1 – Carga induzida em função do tempo com efeito de liberação de cargas capturadas por armadilhas. Os efeitos da temperatura só influenciam no sinal a partir de 800 K, em que vemos um sinal mais longo e com uma componente mais lenta devido à indução de corrente das cargas liberadas.	48
Figura 4.2 – Eficiência de um diamante policristalino do tipo PCD em função do tamanho lateral do grão comparada com a simulação de (MILAZZO; MAINWOOD, 2004).	49
Figura 4.3 – Eficiência de um diamante policristalino do tipo HOD em função do tamanho lateral do grão comparada com a simulação de (MILAZZO; MAINWOOD, 2004).	50
Figura 4.4 –(Superior) Carga induzida em função do tempo para uma partícula MIP pelo método simplificado. (Inferior) Carga induzida em função do tempo para um próton de 3 GeV no Geant4.	51
Figura 4.5 – Simulação da carga induzida para o diamante monocristalino e policristalino com uma partícula alfa de 5,8 MeV. A espessura do detector é de $30 \mu\text{m}$ e a diferença de potencial é de 100 V.	52

Figura 4.6 – Simulação da corrente induzida para o diamante monocristalino e policristalino com uma partícula alfa de 5,8 MeV. A espessura do detector é de 30 μm e a diferença de potencial é de 100 V.	54
Figura 4.7 – Simulação da carga induzida para diamantes monocristalino e policristalino com um próton de 7 TeV. A espessura do detector é de 500 μm e a diferença de potencial é de 800 V.	55
Figura 4.8 – Simulação da corrente induzida para diamantes monocristalino e policristalino com um próton de 7 TeV. A espessura do detector é de 500 μm e a diferença de potencial é de 800 V.	56
Figura 4.9 – Simulação da carga induzida para o diamante monocristalino e o carbeto de silício com um próton de 7 TeV. A espessura do detector é de 500 μm e a diferença de potencial é de 800 V. Embora o SiC tenha mais carga gerada, o tempo do pulso é consideravelmente maior.	57
Figura A.1 – Ilustração do sistema de condutores aterrados e as corrente induzida pela carga em movimento (SHOCKLEY, 2004).	72

Lista de tabelas

Tabela 1 – Tabela de comparação das propriedades do silício e do diamante a temperatura ambiente (NAPOLI, 2022). 18

Lista de abreviaturas e siglas

LHC	- <i>Large Hadron Collider</i>
CMS	- <i>Compact Muon Solenoid</i>
PPS	- <i>Proton Precision Spectrometer</i>
CVD	- <i>Chemical Vapor Deposition</i>
LAPMA	- Laboratório de Altas Pressões e Materiais Avançados
IF-UFRGS	- Instituto de Física da UFRGS
GASP	- Grupo de Análise e Simulações de Partículas
MIPs	- Partículas Minimamente Ionizantes
SC	- <i>Single Crystalline</i>
PCD	- <i>Randomly oriented polycrystalline</i>
HOD	- <i>Highly oriented diamond</i>
MPV	- Valor Mais Provável
FCC	- Cúbica de face centrada
MIM	- Metal-Isolante-Metal
ALICE	- <i>A Large Ion Collider</i>

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	7
2.1	Interação de partículas carregadas com a matéria	7
2.1.1	Perda de energia	7
2.1.2	Variação da perda de energia	8
2.2	Semicondutores	11
2.2.1	Estrutura eletrônica	11
2.2.2	Dinâmica de elétrons e lacunas	12
2.3	Detectores de diamante	16
2.3.1	Diamante	17
2.3.2	Tipos de diamante no método de CVD	20
2.3.3	Princípio de funcionamento	20
2.3.4	Geração do sinal	21
2.3.5	Efeito dos defeitos do diamante no sinal	25
2.3.5.1	Armadilhas rasas e profundas	25
2.3.5.2	Defeitos por irradiação	26
3	SIMULAÇÃO	29
3.1	Geometria	29
3.2	Geração de carga	30
3.2.1	Partículas Minimamente Ionizantes	31
3.2.2	Geant4	32
3.3	Transporte de carga e geração do sinal no detector	36
3.4	Defeitos no material	37
3.4.1	Defeitos dentro do grão	38
3.4.2	Defeitos de contorno de grão	40
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	47
4.1	Impacto da emissão térmica de cargas capturadas	47
4.2	Eficiência e tamanho lateral do grão	47
4.3	Sinal gerado pelo detector em casos particulares	50
4.3.1	Partículas Minimamente Ionizantes	50
4.3.2	Partículas alfa	52
4.4	Prótons a 7 TeV	53

5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	59
	REFERÊNCIAS	61
	APÊNDICES	69
	APÊNDICE A – TEOREMA DE SHOCKLEY-RAMO	71
A.1	Teorema de Reciprocidade de Green	71
A.2	Dedução do teorema de Schockley-Ramo	72

1 Introdução

Os experimentos realizados em aceleradores de partículas, como o Grande Colisor de Hádrons (do inglês, *Large Hadron Collider* - LHC), compreendem diversos subsistemas destinados a coletar informações sobre o produto das colisões entre partículas de alta energia. Esses subsistemas abordam variados aspectos (CAHN; GOLDHABER, 2009), como o rastreamento da trajetória das partículas, a medição da perda de energia para determinação do quadrimomento, a medida da curvatura da trajetória para estabelecer a massa de repouso, a medição do tempo de voo para rejeição de ruído e determinação da posição do feixe, entre outros. Sendo assim, o emprego usual do detector visa medir o produto oriundo de um processo de interação na colisão de dois feixes de prótons, fazendo uso de subsistemas de detecção de partículas, como mostra a [Figura 1.1](#), que ilustra os subsistemas do experimento Solenoide Compacto de Múons (do inglês, *Compact Muon Solenoid* - CMS).

Apesar da pouca resistência à radiação, detectores a base de silício são largamente utilizados, sobretudo pela facilidade de emprego da eletrônica para aquisição de dados. Tais detectores estão a dezenas de centímetros de distância do ponto de colisão, resultando em uma fluência reduzida e esparsa de partículas. Por outro lado, o experimento CMS possui calorímetros mais próximos ao feixe, como o *Zero Degree Calorimeter* (ZDC) (SILALE et al., 2023), localizado a 140 m de distância do ponto de colisão do CMS, que sofrem muito mais influência da radiação durante os períodos de tomadas de dados. Tais detectores, posicionados nas regiões ditas frontais (próximas à direção do feixe), são largamente utilizados para medidas de partículas em colisões de íons pesados, onde o número de partículas produzido é muito maior que em colisões entre prótons devido ao conteúdo nuclear. Nestes casos, o ZDC acaba sendo usado para restrição na cinemática das partículas envolvidas no detector central do CMS e nem tanto para medidas específicas.

Tipicamente os detectores do CMS procuram medir as partículas produzidas na interação entre prótons, contudo um conjunto de detectores, chamado de Espectrômetro Preciso de Prótons (do inglês, *Proton Precision Spectrometer* - PPS) (ALBROW et al., 2014a; ALBROW et al., 2014b) visa medir os prótons intactos espalhados durante a interação, processos esses conhecidos como exclusivos e característicos de interações eletromagnéticas ou difrativas¹. A assinatura experimental principal é o espalhamento de prótons em baixos ângulos (miliradianos), demandando o uso de detectores ditos "próximos ao feixe". O PPS possui sensores capazes de observar os prótons espalhados em pequenos ângulos visto que estão posicionados a milímetros do feixe de prótons e

¹ Processo similar à difração da luz ocorrendo com partículas e modelada pela interação mediada pela partículas Pomeron. Para detalhes, veja a Ref. (BARONE; PREDAZZI, 2002).

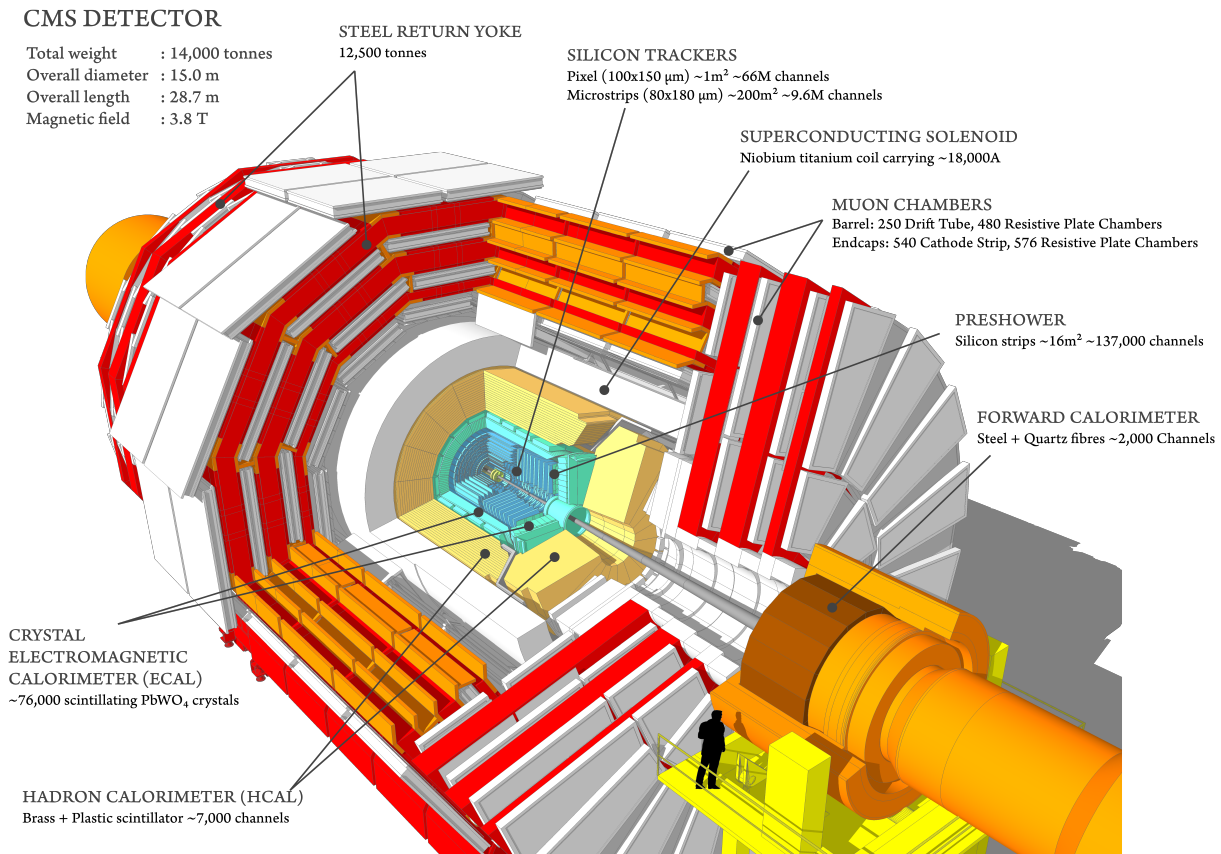


Figura 1.1 – Ilustração dos subsistemas de detectores do experimento CMS (SAKUMA; MCCAULEY, 2014; CMS Collaboration, 2019). Detectores de silício fazem o traçamento de partículas, seguido de calorímetros eletromagnéticos e hadrônicos. Mais afastados encontram-se as câmaras de múons e o calorímetro frontal.

localizados a cerca de 200 m do ponto de interação do CMS, como mostra a Figura 1.2. A detecção desses prótons é feita através de detectores de silício, para o rastreamento da trajetória e determinação de trimomentum dos prótons, e sensores de tempo de voo, feitos de diamante monocristalino, para associação de vértice de interação e rejeição de ruído. Uma foto dos detectores de diamante usados pode ser vista na direita da Figura 1.3. Devido à proximidade com o feixe, esses sensores sofrem com uma fluência de 5×10^{15} prótons/cm² (para uma luminosidade integrada de 100 fb^{-1}) e de perfil não-uniforme, acarretando em perdas de eficiência ao longo da operação, como indicado à esquerda da Figura 1.3, onde mostra uma simulação da fluência de prótons na área do sensor de diamante do PPS. O tempo para determinação da fluência não é contínuo visto que a operação do CMS ocorre em estágios até que se alcance a luminosidade integrada desejada. Comumente utiliza-se a unidade fb^{-1} para fluência por ser uma grandeza efetiva da operação do experimento.

Os diamantes utilizados nesses sensores são sintetizados por meio da técnica de deposição química em fase de vapor (do inglês, *Chemical Vapor Deposition* - CVD)

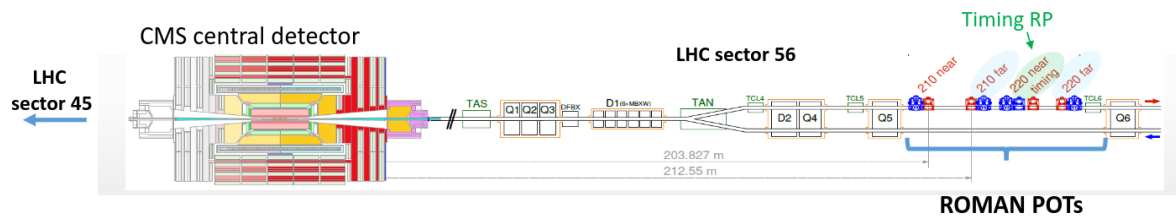


Figura 1.2 – Ilustração de um dos detectores simétricos do PPS, situados a uma distância de ~ 200 metros do ponto de colisão. Esses detectores compreendem os chamados *Roman Pots*, nos quais estão instalados os dispositivos de rastreamento e medição de tempo de voo (BOSSINI, 2020a).

adquiridos junto a empresa Element Six. Os diamantes monocristalinos são caracterizados por uma baixa corrente de fuga, excelente eficiência na coleta de carga e uma alta resistência a radiação (BOSSINI; MINAFRA, 2020). No entanto, esse material apresenta custo elevado e está disponível em quantidade limitada de fornecedores, além de demorada preparação na metalização dos eletrodos nas superfícies para coleta de pulso pela eletrônica associada.

Com a iminente atualização do LHC para o regime de alta luminosidade (do inglês, *High-Luminosity LHC* - HL-LHC), programada para iniciar em 2029 (DAINESE et al., 2019) e prevendo um aumento na luminosidade em aproximadamente 10 vezes em relação aos níveis atuais, a resistência à radiação torna-se uma preocupação fundamental no desenvolvimento de novos sensores, sobretudo por se projetar uma coleta de dados da ordem de 300 fb^{-1} a cada ano de operação. Portanto, diversos estudos estão sendo conduzidos com o objetivo de explorar diferentes materiais e desenhos de detectores para encontrar alternativas que atendam a esses requisitos.

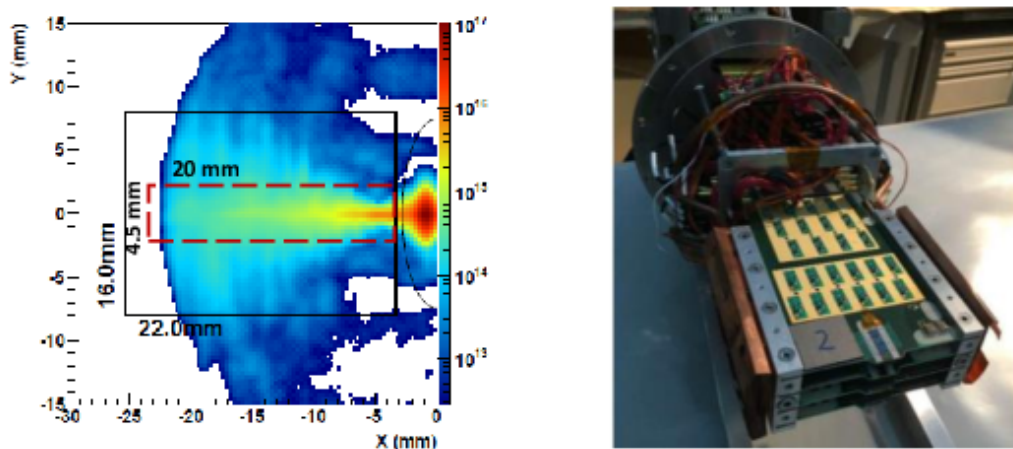


Figura 1.3 – (Esquerda) Simulação da fluência de prótons (próton/cm²) na área do sensor do PPS em 100 fb^{-1} . (Direita) Detectores de tempo de voo do PPS em um Roman Pot, compostos de 4 planos. Informações da Ref. (BOSSINI, 2020b).

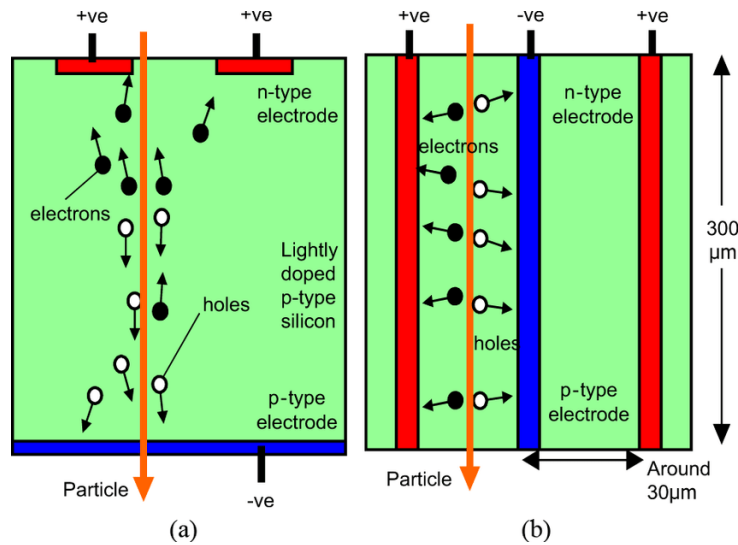


Figura 1.4 – Comparação entre um (a) detector planar e (b) 3D (KOYBASI et al., 2010). No detector 3D, os eletrodos ficam dentro do material, diminuindo o tempo de coleta de carga.

Dada as características da operação do LHC, o diamante monocristalino permanece como a melhor alternativa para uso durante o HL-LHC. Por outro lado, o diamante policristalino, que, embora apresente uma eficácia bem menor na coleta de carga devido a uma maior quantidade de defeitos, destaca-se como um material mais acessível e fácil de produzir em comparação ao diamante monocristalino. Entretanto, com os recentes desenvolvimentos relativos aos detectores 3D, nos quais os eletrodos são incorporados dentro do material, conforme ilustrado na Figura 1.4, o diamante policristalino ganhou renovado interesse devido à significativa melhoria em sua eficiência e resistência à radiação resultantes da redução do tempo de propagação das cargas (LAGOMARSINO et al., 2015; BÄNI et al., 2022). Assim, dentro do contexto de novas tecnologias em detectores de partículas altamente energéticas, o diamante policristalino volta a ser uma alternativa para investigação.

Outro ponto de extrema relevância para este estudo é a expertise do Laboratório de Altas Pressões e Materiais Avançados (LAPMA) do IF-UFRGS na produção de diamantes policristalinos por meio do método de CVD. Essa competência motivou uma colaboração de pesquisa com o Grupo de Análise e Simulações de Partículas (GASP) do IF-UFRGS, visando uma análise preliminar das características estruturais de algumas amostras fornecidas pelo LAPMA. Amostras de diamante foram sintetizados pelo método de CVD utilizando plasma sob um substrato de silício. Na Figura 1.5 e Figura 1.6, temos imagens da seção transversal e da região de crescimento, respectivamente, obtidas através de um microscópio óptico. É possível observar a característica policristalina e colunar do material, que é consequência do substrato em que o diamante foi sintetizado.

Dada a perspectiva de utilizar o diamante policristalino na criação de detectores

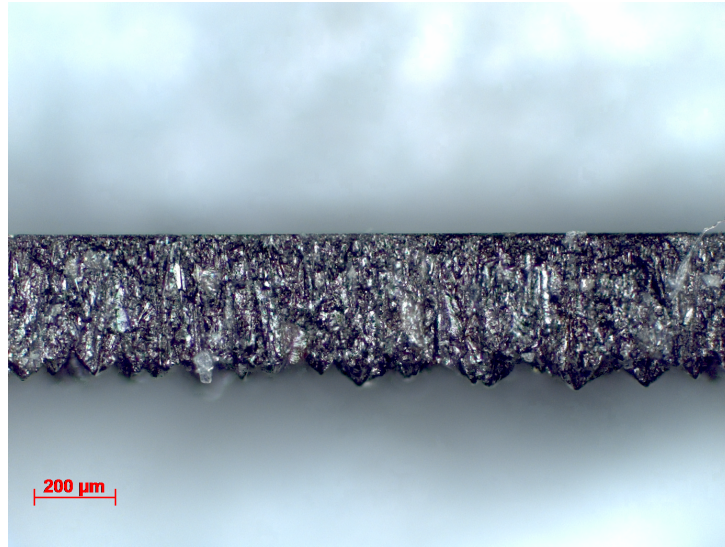


Figura 1.5 – Foto da seção transversal de um diamante sintetizado pelo método de CVD em um substrato de silício produzido no LAPMA utilizando um microscópio óptico.

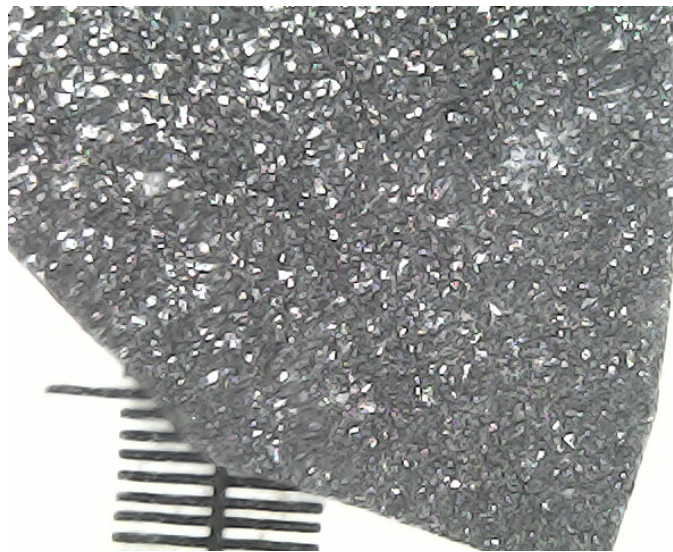


Figura 1.6 – Foto da face de crescimento de um diamante sintetizado pelo método de CVD em um substrato de silício produzido no LAPMA utilizando um microscópio óptico.

de partículas, especialmente considerando a disponibilidade de produção local desse material, torna-se fundamental recorrer a simulações computacionais como ponto de partida para o planejamento e estudo de um detector. Essas simulações são importantes para a determinação de parâmetros e identificação de possíveis limitações do material. Nesse contexto, o objetivo deste trabalho é desenvolver uma simulação computacional de detectores semicondutores, com especial foco em diamantes policristalinos similares aos fabricados pelo LAPMA, para estimar seu desempenho em comparação com o diamante monocristalino. Para isso, buscamos avaliar de que forma a indução de carga no detector

e a sua eficiência são afetadas pelos defeitos inerentes à sintetização do diamante pelo método de CVD, bem como pelo tipo de partícula incidente. Avaliaremos a eficiência do detector em relação ao tamanho lateral dos grãos e também sua resposta sob irradiação de partículas minimamente ionizantes (MIPs), alfa de 5,8 MeV e prótons de 7 TeV, em condições análogas ao PPS.

2 Fundamentação teórica

Neste capítulo abordaremos aspectos teóricos relevantes considerados para o desenvolvimento do trabalho. Iniciaremos com uma breve revisão sobre a interação de partículas carregadas com a matéria, com ênfase na perda de energia. Na seção seguinte discutiremos a estrutura eletrônica por meio do diagrama de bandas e a dinâmica de elétrons-lacunas no material. Por fim, abordaremos os detectores de diamante, seu princípio de funcionamento, a formação do sinal e o impacto dos defeitos no material.

2.1 Interação de partículas carregadas com a matéria

2.1.1 Perda de energia

Ao moverem-se por um material, as partículas carregadas perdem energia por interações nucleares (colisões elásticas com os átomos) e interações eletrônicas (colisões inelásticas com os elétrons). Essa perda de energia é chamada de *poder de freamento* (do inglês, *stopping power*) e a média da perda de energia eletrônica para altas energias é descrita pela equação de Bethe-Bloch modificada (ZYLA et al., 2020)

$$-\frac{dE_{elec}}{dx} = \frac{4\pi r_e^2 m c^2 z^2 Z N_A}{\beta^2 A} \left[\frac{1}{2} \ln \left(\frac{2m c^2 T_{max} \beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \ln I - \frac{C}{Z} - \frac{\delta}{2} \right], \quad (2.1)$$

onde $\beta = (v/c)^2$, sendo v é a velocidade da partícula e c a velocidade da luz, r_e é o raio clássico do elétron, Z é o número atômico do alvo, z é a carga da partícula, A é a massa atômica do alvo, N_A é o número de Avogadro, I é a energia de excitação média do material, T_{max} é valor máximo de energia em uma colisão com um elétron livre, C e δ são correções de densidade e do efeito de camada. Na [Figura 2.1](#), apresenta-se o gráfico do poder de freamento de prótons na água em relação à energia cinética inicial. O ponto mínimo da curva representa a situação em que o próton perde a menor quantidade possível de energia. O estudo de partículas nessa região é importante para detectores de partículas, especialmente em altas energias, uma vez que a maioria das partículas se encontra nesse intervalo. Essas partículas são comumente denominadas como *Partículas Minimamente Ionizantes* (do inglês, *Minimum Ionising Particle* - MIP). Como mostra a [Figura 2.2](#), cada material tem seu valor mínimo de energia perdida, e a região de MIP situa-se entre $\beta\gamma \sim 3-4$ ¹.

É possível observar que para energias menores que MeV, outros dois modelos descrevem a perda de energia: Lindhard-Scharff e Anderson-Ziegler ([LINDHARD; SCHARFF](#),

¹ γ é o fator de Lorentz. Para prótons no diamante, a energia cinética inicial de uma MIP é de aproximadamente 3 GeV ([WEISS et al., 2019](#)).

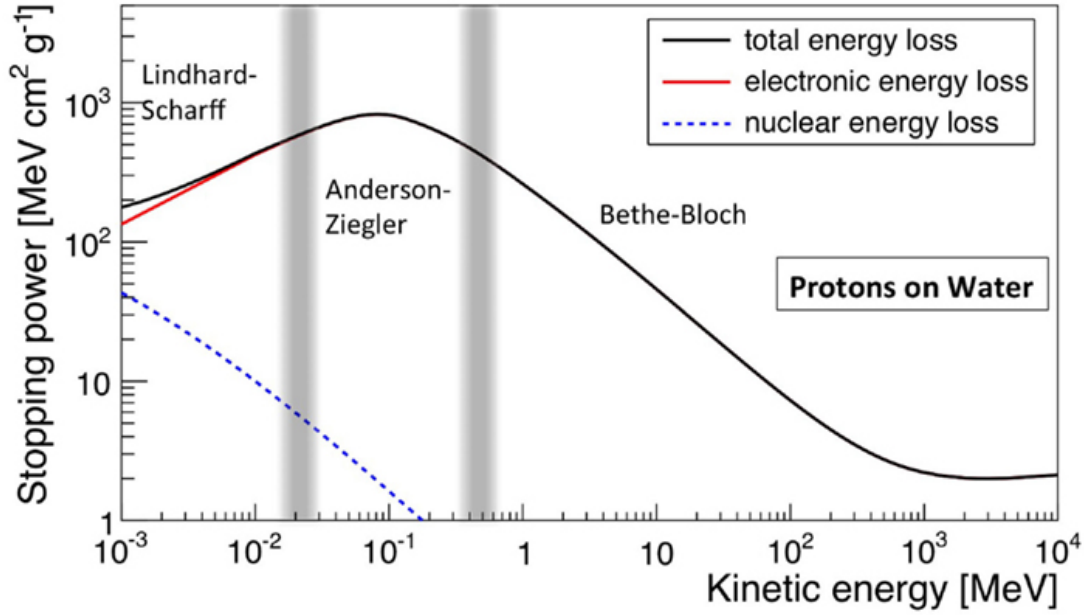


Figura 2.1 – Poder de freamento eletrônico e nuclear de prótons na água (KRAAN, 2015). Para baixas e médias energias, modelos diferentes reproduzem a perda de energia.

1961; ANDERSEN; ZIEGLER, 1977). A contribuição nuclear é preponderante para baixas energias, enquanto que a perda de energia eletrônica domina para altas energias. A perda de energia nuclear também é chamada de poder de freamento nuclear, sendo descrita pela equação (NIKJOO; UEHARA; EMFIETZOGLOU, 2012)

$$-\frac{dE_{nuc}}{dx} = \frac{2\pi N_A}{A} \int \frac{d\sigma_{el}}{d} W(\theta, T) \sin \theta d\theta, \quad (2.2)$$

onde θ é o ângulo de espalhamento, T é a energia cinética da partícula carregada, $W(\theta, T)$ é a energia de recuo e $\frac{d\sigma_{el}}{d}$ é a seção de choque de espalhamento elástico. Dessa forma, o poder de freamento é a soma das contribuições eletrônica e nuclear

$$-\frac{dE}{dx} = -\frac{dE_{nuc}}{dx} - \frac{dE_{elec}}{dx}. \quad (2.3)$$

2.1.2 Variação da perda de energia

O processo de perda de energia decorre de uma série de colisões elásticas e inelásticas que, por sua vez, não são uniformes: em alguns casos, a partícula transfere mais energia, enquanto em outros, transfere menos. Tratando-se, portanto, de um processo estocástico e não puramente determinístico. Por conta disso, observamos uma variação na perda de energia e no alcance da partícula no material (do inglês, *straggling*)

A Figura 2.3 apresenta diversas funções da variação da perda de energia para píons de 500 MeV em silício com diferentes espessuras, ilustrando uma distribuição de perda de energia em torno do valor mais provável (do inglês, *Most probable value* - MPV).

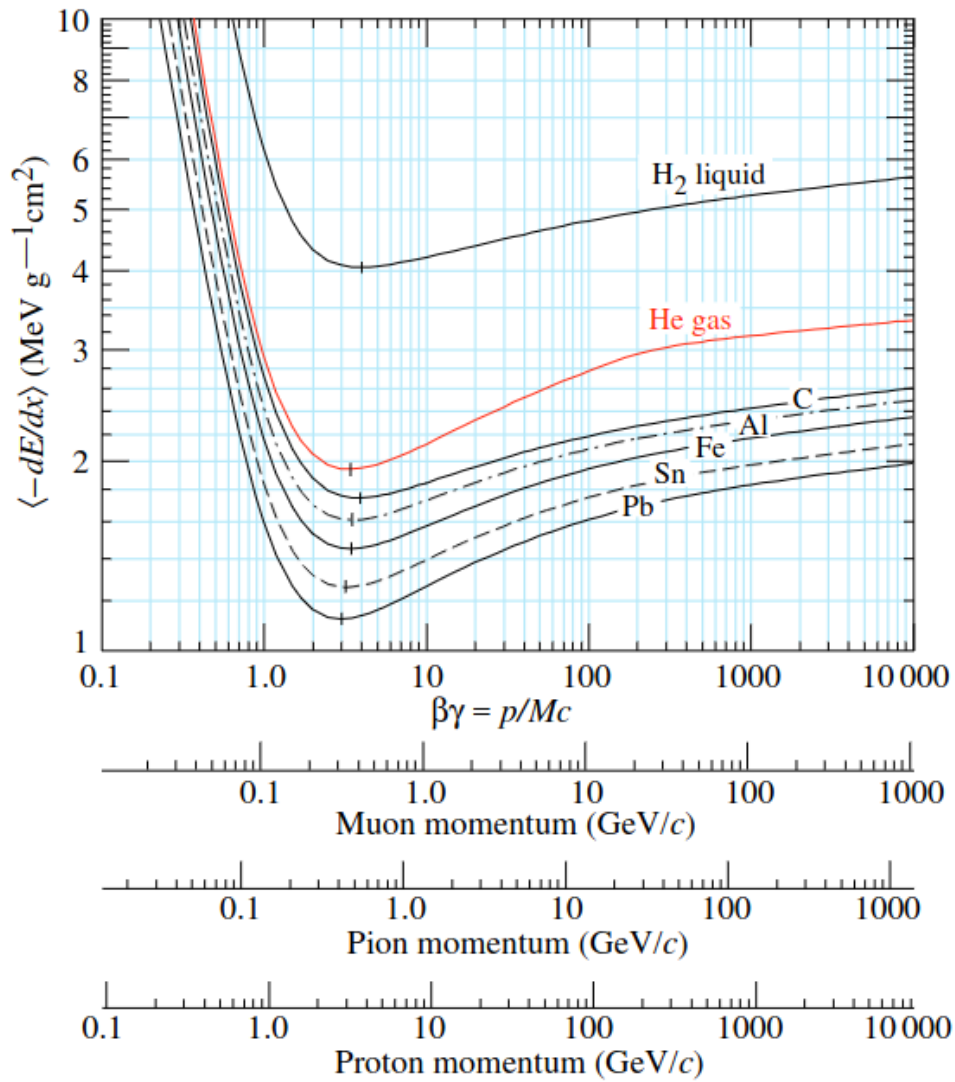


Figura 2.2 – Energia perdida em diferentes materiais na região próxima do mínimo, onde as partículas são consideradas MIP (ZYLA et al., 2020).

Importante notar que a equação de Bethe-Bloch descreve o valor médio, que só coincide com o valor mais provável no caso de uma distribuição gaussiana. Em altas energias, a variação da perda de energia é descrita pelo modelo de distribuição de probabilidade de Landau, que possui uma característica assimétrica. Na Figura 2.4 é feita uma comparação entre a distribuição de Landau e gaussiana, onde é possível observar a discrepância entre o MVP da distribuição de Landau e o valor esperado da distribuição gaussiana.

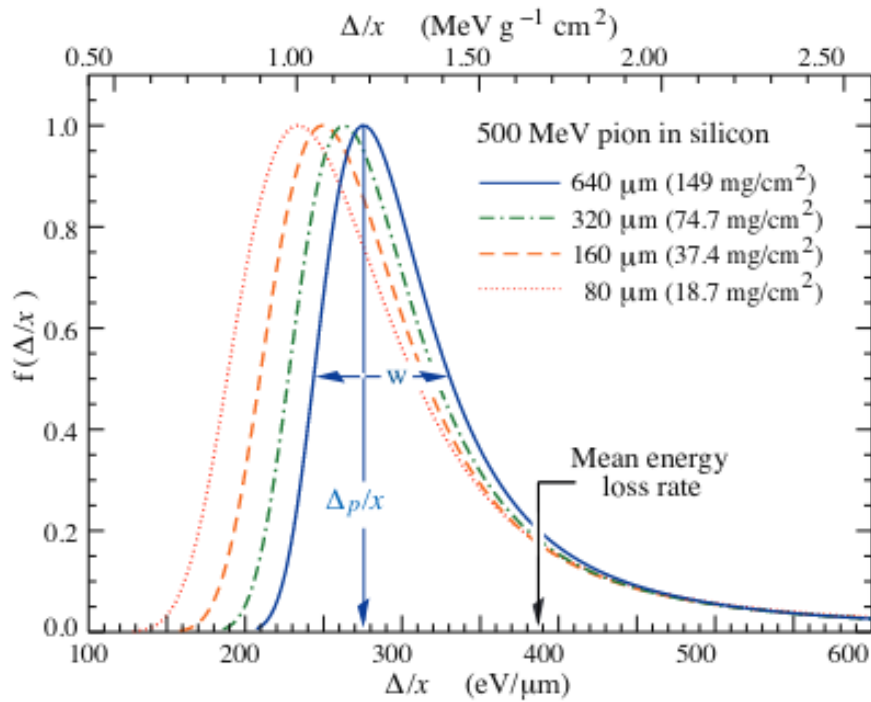


Figura 2.3 – Funções da variação da perda de energia de píons de 500 MeV em silício normalizada no MPV para diferentes espessuras (ZYLA et al., 2020). Quanto maior a espessura, mais próxima de uma gaussiana a distribuição fica.

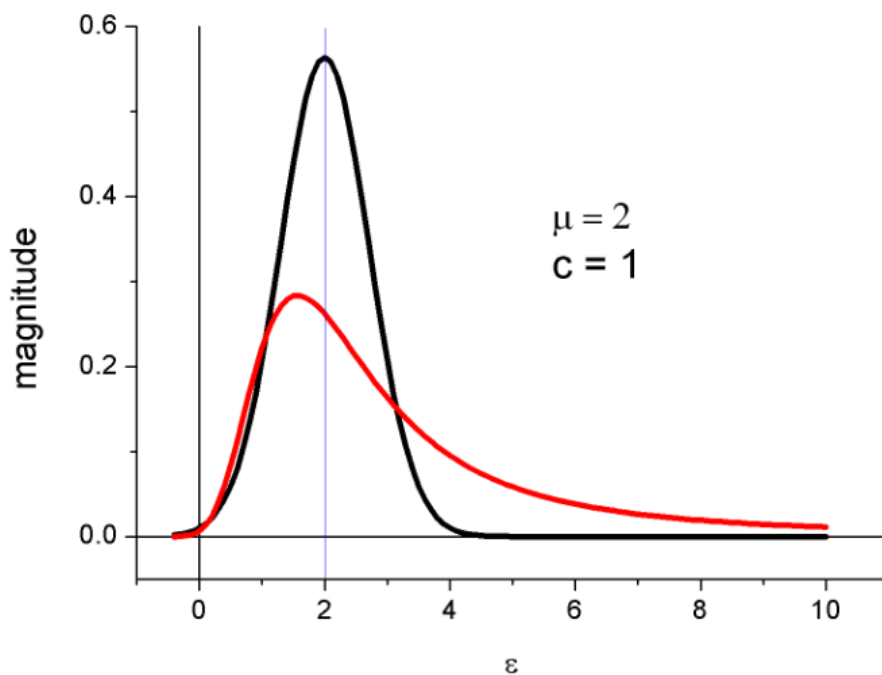


Figura 2.4 – Comparação entre a distribuição de Landau (vermelho) e a gaussiana (preto) (BULYAK; SHUL'GA, 2022). Nota-se que a média da distribuição gaussiana não coincide com o valor mais provável da distribuição de Landau.

2.2 Semicondutores

Os detectores de estado sólido geralmente empregam materiais semicondutores, como silício ou germânio, para a geração e transporte de carga gerada por partículas incidentes. O diamante, embora seja classificado como um isolante e não um semicondutor, compartilha o mesmo princípio de geração e transporte de carga. A principal vantagem do uso do diamante está na sua baixa corrente de fuga – devido ao fato de ser um material isolante – e uma grande resistência a radiação. Nesta seção, exploraremos os conceitos básicos dos semicondutores necessários para embasar o trabalho.

2.2.1 Estrutura eletrônica

A abordagem mais básica para a condução de elétrons é o modelo dos elétrons livres, comumente aplicado na explicação do comportamento dos metais. Nesse modelo, os elétrons são considerados como livres no material e suas energias são descritas pela solução da equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}. \quad (2.4)$$

A solução desse problema é muito conhecida. As autoenergias são contínuas e seguem a seguinte equação

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (2.5)$$

Entretanto, os semicondutores são estruturas cristalinas periódicas e a interação dos elétrons na rede cristalina não pode ser desprezada. O efeito da rede cristalina nos elétrons do material é que ela age como um potencial fraco periódico. A solução da equação de onda para esse caso é definida a partir do Teorema de Bloch, que estabelece que as autofunções da equação de onda têm a seguinte forma

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{\vec{k}}, \quad (2.6)$$

onde $u_{\vec{k}}$ é a série de Fourier dos vetores da rede recíproca. A consequência direta da interação dos elétrons com a rede, conforme descrito pela [Equação 2.6](#), é o surgimento de níveis de energia proibidos. Dado o grande número de níveis e a proximidade entre eles, consideramos essas regiões como aproximadamente contínuas, denominadas bandas de energia. Esse resultado contrasta com o modelo de elétrons livres, utilizado para descrever metais, onde os níveis de energia permitidos eram contínuos. Essa diferença é evidenciada pela comparação dos níveis de energia em função do vetor de onda \vec{k} para um elétron livre e um elétron em uma rede monoatômica, conforme ilustrado na [Figura 2.5](#).

Assim, as propriedades elétricas dos sólidos são definidas em função do preenchimento das bandas de energia. De forma geral, a condutividade do material depende do preenchimento da última banda de energia. Nos metais, por exemplo, a última banda é

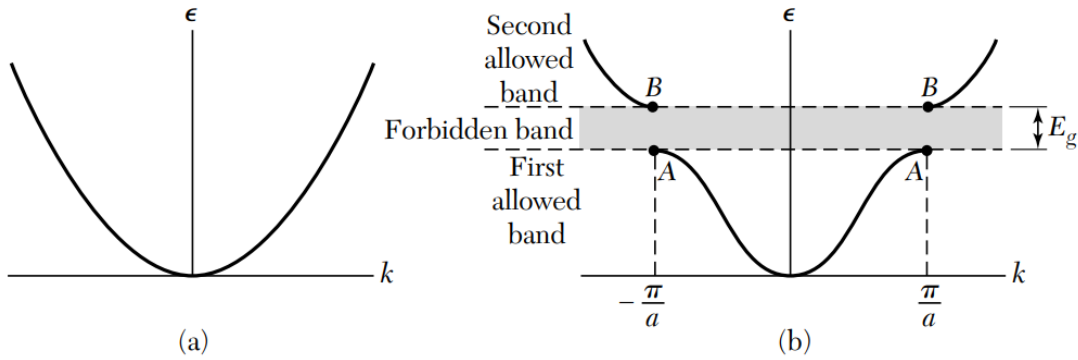


Figura 2.5 – Gráfico da energia ϵ em função do vetor de onda k para (a) modelo de elétron livre e (b) elétron em uma rede monoatômica de constante a (KITTEL, 2004).

semipreenchida, possibilitando a alteração do seu estado com a aplicação de um campo elétrico externo e gerando corrente elétrica. Já nos semicondutores e isolantes, a última banda está completamente preenchida. Portanto, a $T = 0$ K, não é possível gerar corrente elétrica mesmo com a aplicação de um campo elétrico. A grande diferença entre eles está no seu intervalo (*gap*) de energia (E_g), que representa a distância entre a última banda preenchida e a primeira banda desocupada.

Quando a temperatura é maior que 0 K, excitações térmicas podem promover elétrons da última banda preenchida (valência) para a próxima banda (condução). O espaço deixado vago pelo elétron se comporta como uma partícula de carga oposta, denominada buraco ou lacuna. Desse modo, o movimento dos elétrons e das lacunas sob um campo elétrico externo gera corrente elétrica. Quanto menor o valor de E_g , maior a probabilidade de elétrons serem promovidos para a banda de condução por excitação térmica. Materiais isolantes são aqueles em que E_g é tão grande que a quantidade de elétrons promovidos para a banda de condução, mesmo a temperatura ambiente, é ínfima, como é o caso do diamante ($E_g = 5$ eV). Em contrapartida, semicondutores possuem um E_g menor, como o silício ($E_g = 1,1$ eV). Embora a diferença entre as lacunas não seja muito grande, ela tem um impacto significativo na ocupação da banda de condução, visto que ela cresce exponencialmente com o aumento da razão $E_g/k_B T$ (REZENDE, 2004). A Figura 2.6 mostra uma comparação entre os três tipos de materiais na representação de bandas.

2.2.2 Dinâmica de elétrons e lacunas

Podemos estudar a dinâmica dos portadores de carga a partir da equação da continuidade. Seja uma densidade n de elétrons e p de lacunas, as seguintes equações são válidas

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{J}_e + G - R, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{J}_p + G - R, \quad (2.8)$$

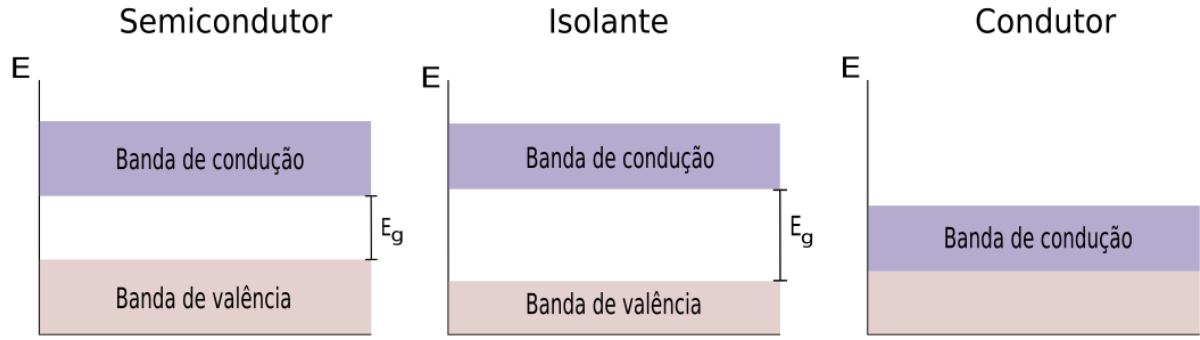


Figura 2.6 – Representação dos tipos de materiais no diagrama de bandas (DEROS, 2022). A diferença entre o Semicondutor (esquerda) e o Isolante (centro) é o tamanho da lacuna (E_g). O condutor (direita) não possui banda de valência pois a última banda não é totalmente preenchida.

onde \vec{J}_e e \vec{J}_p são os vetores densidade de corrente dos elétrons e das lacunas, G e R são termos de geração e recombinação de portadores, respectivamente. Visto que ambas as equações são análogas, a partir de agora, concentraremos nosso estudo nos elétrons, utilizando a Equação 2.7. Os resultados obtidos podem ser facilmente adaptados para as lacunas. O termo \vec{J}_e engloba tanto o termo de difusão quanto o termo de deriva (ou *drift*). Portanto,

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot (\mu n \vec{E} + D_n \nabla n) + G - R, \quad (2.9)$$

onde e é a carga elementar, μ é a mobilidade elétrica, n é o número de elétrons, \vec{E} é o vetor campo elétrico e D_n é o coeficiente de difusão. Para facilitar a análise, vamos considerar um caso unidimensional com campo elétrico uniforme na direção x ($\vec{E} = E\hat{i}$).

Podemos analisar o efeito do campo elétrico no movimento de elétrons. Considerando a Equação 2.9 com $D_e = 0$ (sem difusão) e negligenciando geração e recombinação de portadores ($G = R = 0$) torna-se

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -v_x \frac{\partial n(x, t)}{\partial x}, \quad (2.10)$$

onde $v_x = -\mu E$. É possível verificar que a seguinte solução satisfaz a Equação 2.10

$$n(t) = n_0(x - v_x t), \quad (2.11)$$

ou seja, uma densidade n_0 de elétrons se move com velocidade uniforme, como mostra a Figura 2.7, onde temos a evolução de uma distribuição gaussiana de elétrons em dois instantes de tempo distintos.

Por outro lado, desconsiderando apenas os termos de recombinação e geração de portadores ($G = R = 0$), teremos

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -v_x \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + D_n \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.12)$$

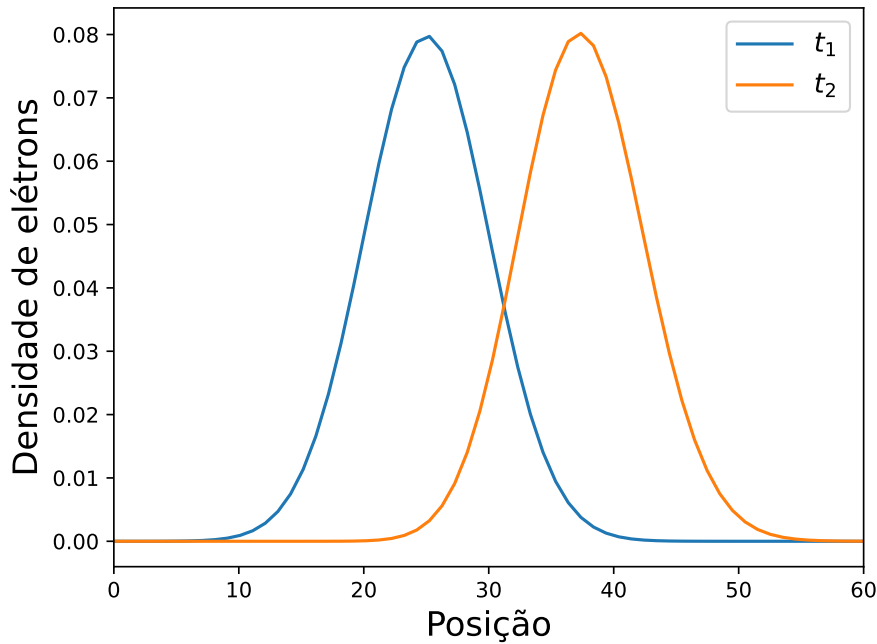


Figura 2.7 – Evolução de uma distribuição de elétrons em um espaço unidimensional sob ação de um campo elétrico. A distribuição se move ao longo do tempo, mantendo o mesmo formato.

Podemos notar que, caso não houvesse um campo elétrico, recairíamos na equação da difusão e a dinâmica aconteceria como uma distribuição de elétrons que ficaria cada vez mais alargada, como ilustra a figura à esquerda na [Figura 2.8](#). Quando consideramos os dois efeitos, em que há deriva junto de um alargamento na distribuição causado pela difusão, teremos um comportamento similar a um alargamento seguindo de uma evolução temporal, como vemos na figura à direita da [Figura 2.8](#).

Adicionalmente, os termos relativos à geração e recombinação de portadores são importantes de serem estudados, uma vez que os defeitos no material representam potenciais fontes de recombinação, resultando na perda de elétrons e prejudicando a eficiência do sensor. Além disso, muitos dos elétrons capturados por esses defeitos podem ser liberados por excitação térmica, constituindo uma possível geração de portadores. Ambos os cenários serão abordados com mais detalhes na próxima seção. Por ora, focaremos no efeito por si só. Inicialmente, consideraremos um material no qual ocorre apenas recombinação ($G = 0$) e deriva de cargas ($D_e = 0$). Seja R uma taxa de recombinação dada por $R = n/\tau_R$, a equação diferencial fica

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -v_x \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} - \frac{n(x, t)}{\tau_R}, \quad (2.13)$$

onde τ_R é o tempo médio para que um elétron seja recombinado. Também chamamos esse termo de tempo de relaxação ou tempo característico. A solução dessa equação diferencial

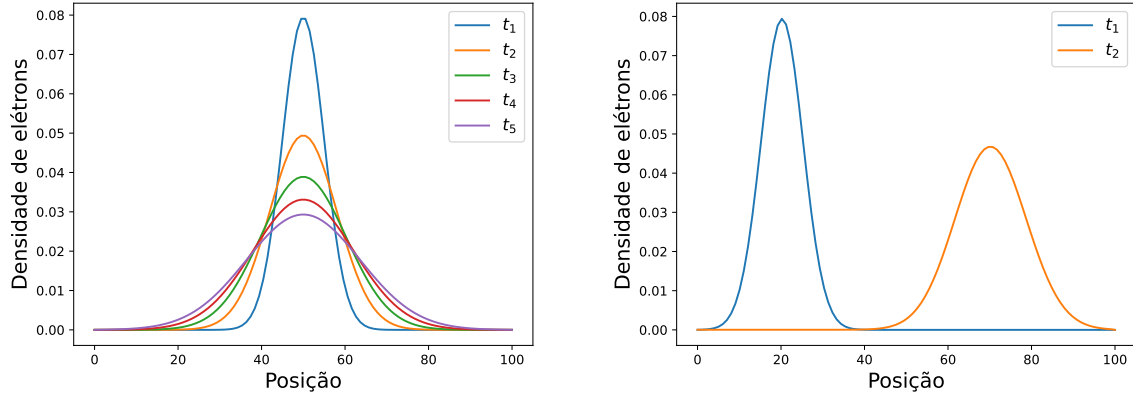


Figura 2.8 – (Esquerda) Dinâmica da densidade de elétrons quando há apenas difusão. A distribuição alarga-se ao longo do tempo devido à difusão, mas mantém-se na mesma posição. (Direita) Dinâmica da densidade de elétrons com deriva e difusão. Ao mesmo tempo que a distribuição de elétrons se move sob a ação do campo elétrico, ela também se alarga por conta da difusão.

é a combinação da deriva com um termo exponencial responsável pela perda das cargas

$$n(t) = n_0(x - v_x t) \exp\left(-\frac{t}{\tau_R}\right). \quad (2.14)$$

Portanto, a dinâmica ocorre como na [Figura 2.9](#), em que a distribuição de elétrons se move e diminui ao longo do tempo devido à recombinação. Quando adicionamos o termo de geração, a soma dos dois termos indicará se haverá uma queda ou um aumento na densidade de elétrons, também de forma exponencial. No caso de detectores de diamante, a geração de partículas por excitação térmica pode ser negligenciada devido à largura da sua banda proibida de energia. O mais provável é a liberação térmica de portadores de carga que estão capturados em defeitos do material. Assim, vamos supor que todas as partículas que são capturadas por defeitos podem ser reemitidas após um tempo τ_G , sem considerar o efeito de deriva por fins de praticidade. Agora temos duas equações diferenciais: a primeira relativa à densidade de elétrons livres (n) e outra relativa aos elétrons capturados (n_c):

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{n}{\tau_R} + \frac{n_c}{\tau_G}, \quad (2.15)$$

$$\frac{dn_c}{dt} = \frac{n}{\tau_R} - \frac{n_c}{\tau_G}. \quad (2.16)$$

Sabemos que $n + n_c = n_0$, logo, a substituindo na [Equação 2.15](#) e diferenciando em relação ao tempo, temos

$$\frac{d^2n}{dt^2} + \frac{dn}{dt} \frac{1}{\tau_{total}} = 0, \quad (2.17)$$

onde $\frac{1}{\tau_{total}} = \frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_G}$. Trata-se de uma equação diferencial de segunda ordem, cuja equação característica é

$$\lambda^2 + \lambda \frac{1}{\tau_{total}} = 0. \quad (2.18)$$

Logo, a solução é dada por

$$n(t) = A + Be^{-t/\tau_{total}}. \quad (2.19)$$

As constantes A e B são definidas pelas condições iniciais. Em $t = 0$, $n(t = 0) = n_0$ e $\frac{dn_c}{dt} = -\frac{n_0}{\tau_R}$. Como resultado, temos:

$$n(t) = n_0 \left[1 + \frac{\tau_{total}}{\tau_R} \left(e^{-t/\tau_{total}} - 1 \right) \right]. \quad (2.20)$$

Essa equação mostra que a densidade de portadores em um dado instante de tempo t vai depender da combinação entre os tempos característicos. Caso a partícula leve muito tempo para ser liberada de uma armadilha ($\tau_G \rightarrow \infty$), recuperamos a [Equação 2.14](#). Caso a emissão de partículas capturadas seja extremamente rápida ($\tau_G \rightarrow 0$), a densidade de cargas permanece constante ao longo do tempo. Isso significa que as partículas, na prática, não são capturadas. Na dissertação de ([PIPEK, 2018](#)) foi feita uma dedução de um modelo com captura e liberação em um nível de energia e apenas captura em outro. Nesse caso, optou-se por explicitar em mais detalhes o caso mais simples, apenas com captura e liberação em um nível, visto que a evolução para o caso mais complexo é apenas uma extensão das equações de continuidade.

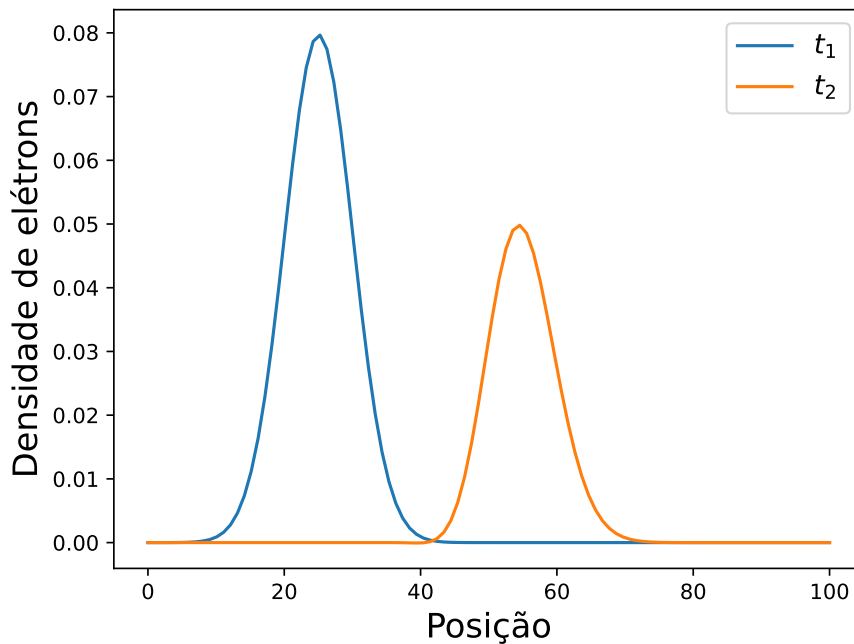


Figura 2.9 – Dinâmica de elétrons com deriva e recombinação. Ao longo do tempo, a amplitude da distribuição diminui pela perda de cargas.

2.3 Detectores de diamante

Os semicondutores, principalmente o silício, são muito utilizados como detectores de partículas e estão presentes nos maiores e mais modernos detectores da atualidade,

como no *Proton Precision Spectrometer* (PPS) (ALBROW et al., 2014a; ALBROW et al., 2014b) e *A Large Ion Collider* (ALICE) (MAGER, 2016). Detectores que empregam um material semiconductor como meio ionizante também são conhecidos como detectores de estado sólido. Seu princípio de funcionamento é bastante semelhante ao das câmaras de ionização, com a distinção de que, nestas últimas, o meio ionizante é um gás.

A viabilidade do uso de um determinado material como detector de partículas depende de uma série de fatores. O fator fundamental é a geração de carga. Para que um número suficiente de cargas seja gerado, a banda de energia não deve ser muito alta, mas também não deve ser muito baixa. Uma banda de energia proibida muito baixa resultaria em uma grande quantidade de pares gerados por excitação térmica, o que introduziria um ruído considerável quando um campo elétrico externo é aplicado. Assim, um material promissor para ser usado como detector deve ter um sinal significativamente maior que o seu ruído intrínseco. Fatores como mobilidade elétrica² e velocidade de saturação³ também são importantes, pois determinam a duração do pulso de sinal, que tem uma influência direta na resolução⁴. Nesse caso, a eficácia do detector em discretizar eventos depende muito do ambiente de operação e se a capacidade do detector de distinguir os eventos é compatível com o fluxo de partículas que incide sobre ele.

Um dos fatores mais cruciais para um material é a sua durabilidade sob ação de radiação. Atualmente, a física de altas energias está caminhando para um aumento significativo na luminosidade de seus experimentos (APOLLINARI et al., 2015), o que impactará consideravelmente os detectores de silício, exigindo ajustes para suportar a fluência esperada de partículas (KUEHN, 2012). Simultaneamente, outros materiais mais resistentes estão sendo estudados, como o carbetto de silício (TAN et al., 2022) e o diamante (ANDERLINI et al., 2022). Detectores de diamante já são amplamente utilizados em experimentos de altas energias, como no PPS (BOSSINI, 2020a), destacando-se pelo baixo ruído e pela grande tolerância à radiação. Essas características tornam o diamante atrativo à medida que ambientes com uma luminosidade cada vez maior se tornam necessários. Nas próximas subseções, exploraremos mais detalhes sobre o diamante e seu uso como detector.

2.3.1 Diamante

O carbono é um elemento alotrópico, o que significa que é possível criar diferentes estruturas com ele. Entre essas estruturas, destacam-se o grafite, o grafeno e o diamante. No caso específico do diamante, os átomos estão ligados em uma hibridização sp^3 de orbitais tetraédricos, formando uma rede cristalina cúbica de face centrada (SCHWANDER; PARTES, 2011). Essa estrutura cristalina confere ao diamante propriedades de grande

² Rapidez do portador de carga no material.

³ Velocidade máxima de um portador quando submetido a um campo elétrico externo.

⁴ Capacidade do detector de distinguir os eventos.

Propriedade	Si	Diamante
Densidade (g/cm ³)	2,33	3,51
Banda proibida de energia (eV)	1,12	5,5
Energia para criação de pares (eV)	3,6	13
Energia de deslocamento (eV)	13-15	43
Mobilidade de elétrons (cm ² /V s)	1450	1800
Mobilidade de lacunas (cm ² /V s)	450	1200
Velocidade de saturação de elétrons (cm/s)	0,8×10 ⁷	2,2×10 ⁷

Tabela 1 – Tabela de comparação das propriedades do silício e do diamante a temperatura ambiente (NAPOLI, 2022).

interesse para a física de detectores, como evidenciado na [Tabela 1](#), que compara as propriedades do silício e do diamante. Observa-se que é necessária uma quantidade significativamente maior de energia no diamante para promover um elétron da banda de valência para a banda de condução. À primeira vista, isso pode parecer desfavorável, no entanto, isso implica em um material com baixo ruído, já que menos elétrons estão na banda de valência por excitação térmica. Isso dispensa a necessidade de resfriamento e dopagem do material, ao contrário dos detectores de silício, que exigem dopagem e operação sob tensão reversa e baixas temperaturas. Além disso, a energia de deslocamento⁵ do diamante é muito maior do que a do silício, resultando em uma resistência muito maior à radiação.

Utilizam-se diamantes sintéticos devido à influência da quantidade de impurezas no diamante natural em sua performance. A síntese do carbono em diamante ocorre principalmente pelo método de CVD. Esse método envolve o aquecimento de uma mistura, geralmente composta de metano e moléculas de hidrogênio, que gera átomos de carbono pela quebra da sua ligação com o hidrogênio, conforme a reação em cadeia (BOSSINI; MINAFRA, 2020)



Os átomos de carbono resultantes da reação descrita pela [Equação 2.21](#) são depositados em um substrato⁶. Esse processo é altamente controlado, pois há restrições quanto à composição dos gases utilizados na reação, como evidenciado na figura superior da [Figura 2.10](#), na região destacada em preto. Nessa área, encontram-se as concentrações ideais de C-H-O no gás para permitir o crescimento do diamante. Além disso, a produção por meio do método de CVD ocorre em baixas temperaturas e pressões, conforme ilustrado no diagrama de fase do carbono na direita da [Figura 2.10](#). Diversas técnicas de aquecimento da mistura são empregadas, incluindo o uso de filamentos, micro-ondas e, de maneira bastante eficiente, plasmas (SHIMAOKA S. KOIZUMI; KANEKO, 2021).

⁵ Energia necessária para remover um átomo da rede cristalina.

⁶ Em diamantes policristalinos, o silício é comumente utilizado como substrato.

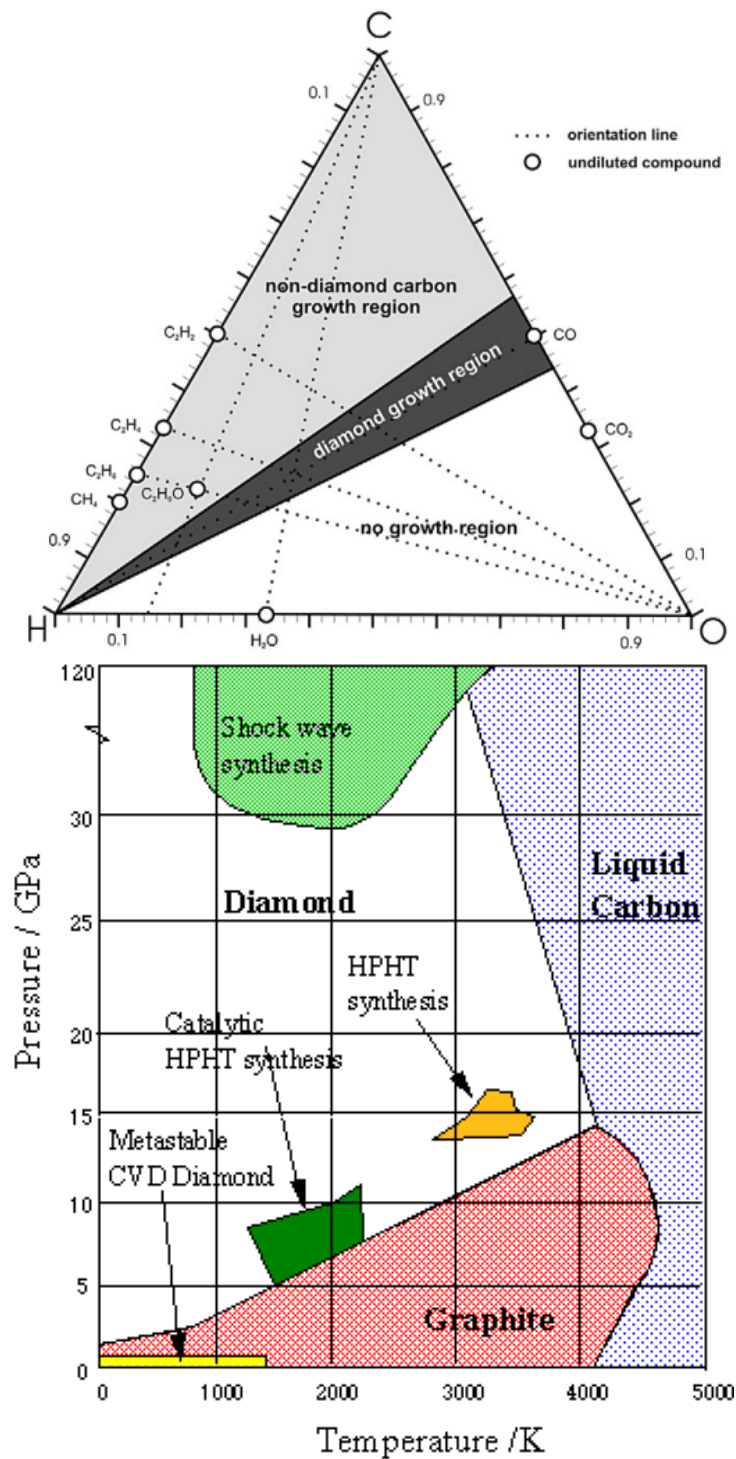


Figura 2.10 – (Superior) Diagrama de fase das concentrações de carbono, hidrogênio e oxigênio para crescimento de diamante (SCHWANDER; PARTES, 2011). A região preta corresponde a concentração dos três elementos onde é possível haver crescimento de diamante. (Inferior) Diagrama de fase do carbono (SCOTT, 2014). Na região amarela há condições apropriadas para produção da fase do diamante no CVD, mostrando que é um método operante a baixa temperatura e pressão. Desvios nessas duas grandezas durante o processo pode sintetizar o carbono na forma de grafite, gerando mais defeitos.

2.3.2 Tipos de diamante no método de CVD

O tipo de substrato no qual o carbono é depositado desempenha um papel importante no tipo de diamante produzido. Dois tipos de diamantes podem ser gerados pelo método de CVD: monocristalino e policristalino. O diamante monocristalino cresce em um substrato de diamante (seja ele natural ou sintético) e exibe uma eficiência e resolução excelentes, sendo utilizado nos detectores de tempo de voo do PPS do CMS (BOSSINI, 2023). No entanto, uma desvantagem significativa associada a esse tipo de diamante é sua limitação de tamanho, restrito a um diâmetro máximo de alguns milímetros (SHIMAOKA S. KOIZUMI; KANEKO, 2021).

Por outro lado, o diamante policristalino cresce sobre um substrato diferente do diamante, geralmente silício ou outros metais. Assim, esse tipo de diamante possui uma estrutura colunar, com vários grãos, devido ao seu crescimento rápido (TRAJKOV, 2004), conforme ilustrado na Figura 2.11, onde a imagem esquemática na figura representa o crescimento colunar de um filme de diamante policristalino pelo método de CVD, enquanto a microscopia eletrônica de varredura mostra a característica colunar desse tipo de diamante. Os defeitos gerados durante seu crescimento, tanto de contorno de grão quanto dentro do grão (JOMARD; BALLUTAUD, 2003; BRUZZI et al., 2002), diminuem sua eficiência e restringem seu uso, especialmente em situações onde a resolução é importante. Apesar de ser possível melhorar a eficiência do diamante policristalino com uma pré-irradiação com radiação ionizante⁷, a qualidade superior desse tipo de diamante ainda possui uma distância de coleta de carga de 250 μm em 500 μm (JOMARD; BALLUTAUD, 2003).

2.3.3 Princípio de funcionamento

O princípio físico por trás do funcionamento de um detector de diamante é análogo ao de um detector de estado sólido. Partículas carregadas, ao atravessarem o material, depositam energia, como explicado na subseção 2.1.1. Esse processo coloca elétrons da banda de valência para a banda de condução. Uma diferença de potencial elétrico é aplicada, que separa os pares elétron-lacuna no material. Esse processo induz corrente, que é detectada por meio de um circuito elétrico e amplificada, como ilustrado na Figura 2.12. A geometria predominante dos detectores é simples, constituída pelo material ionizante (diamante) entre dois metais (também chamados de eletrodos) responsáveis pela aplicação do campo elétrico e pela coleta de carga. Essa configuração é conhecida como Metal-Isolante-Metal (MIM) ou planar, conforme também mostrado na Figura 2.12. Os contatos de metais geralmente são feitos de filmes de crômio-ouro ou titânio-ouro (AHMED, 2015). O crômio e o titânio são utilizados para a aderência do ouro na superfície do diamante. Os filmes são depositados pelo método de *sputtering* ou evaporação química.

⁷ Esse efeito é conhecido como *priming*. (LAN et al., 2012).

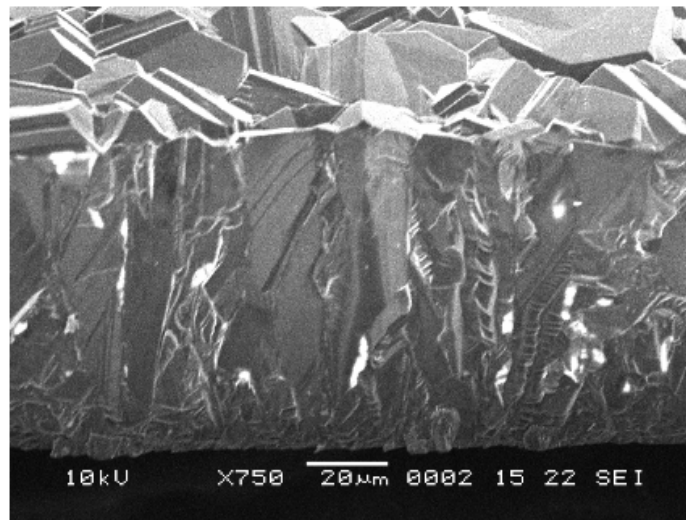
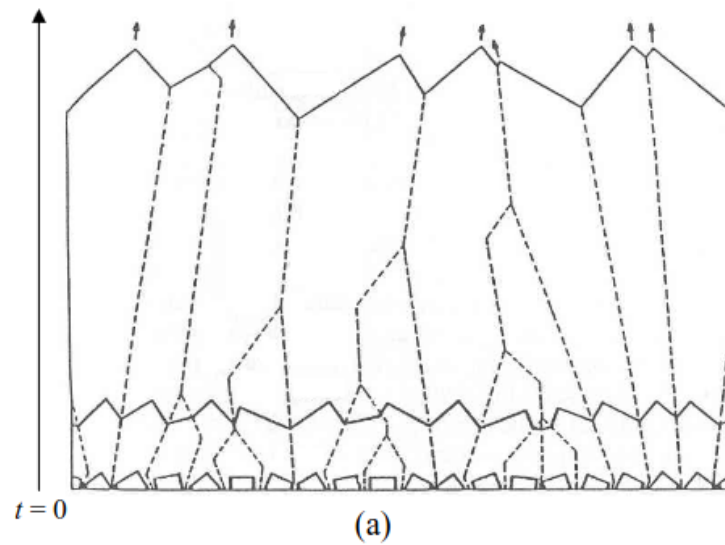


Figura 2.11 – (a) Ilustração do crescimento dos grãos ao longo do tempo no método de CVD para produção de diamante policristalino. (b) Foto de uma amostra de diamante policristalino utilizando um microscópio eletrônico de varredura (TRAJKOV, 2004).

2.3.4 Geração do sinal

Os pares elétron-lacuna gerados no material movem-se seguindo as equações estudadas na [subseção 2.2.2](#). A velocidade de deriva das cargas pode ser descrita através de uma equação semi-empírica (PERNEGGER et al., 2005)

$$\vec{v}_d = \frac{\mu_o \vec{E}}{1 + \frac{\mu_o |\vec{E}|}{v_{sat}}} \quad (2.22)$$

onde μ_o é a mobilidade elétrica a 300 K, \vec{E} é o vetor campo elétrico e v_{sat} é a velocidade de saturação. Assim que a carga é gerada no material, ela induz uma carga superficial

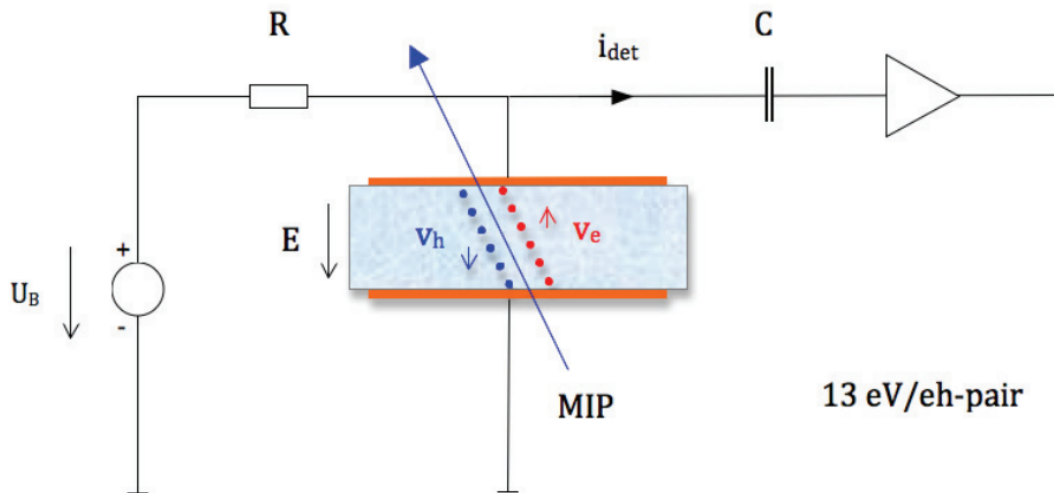


Figura 2.12 – Ilustração do princípio de funcionamento de um detector de diamante (SHIMAOKA S. KOIZUMI; KANEKO, 2021). Uma partícula MIP passa pelo detector, gerando pares elétron-lacuna no material, que se movem por conta de uma diferença de potencial e induzem corrente nos eletrodos. Essa corrente é posteriormente amplificada em um circuito elétrico.

nos eletrodos do detector, gerando um campo elétrico cujo cálculo pode ser feito pelo método das imagens. À medida que a carga se move pelo material, a carga induzida muda, gerando uma corrente induzida no eletrodo. Portanto, é o movimento das cargas no material que induz corrente no eletrodo. Pode-se cair no equívoco de imaginar que só há corrente no momento em que chega ao eletrodo, mas não é isso que acontece. Se fosse verdade, esperaríamos um atraso entre a passagem da partícula e a corrente induzida (KNOLL, 2010). No entanto, experimentalmente, esse fenômeno não é observado. A corrente é induzida assim que as cargas começam a se mover pelo detector e, ao chegarem no eletrodo, o sinal acaba. Essa corrente induzida por partículas pode ser calculada através do Teorema de Shockley-Ramo (SHOCKLEY, 2004; RAMO, 1939)⁸ (para mais detalhes, veja o Apêndice A), que afirma que a corrente induzida por uma carga em movimento em um eletrodo é descrita por

$$i = -q\vec{v} \cdot \vec{E}_0, \quad (2.23)$$

onde q é a carga, \vec{v} é o vetor velocidade e \vec{E}_0 é o campo *weighting*.

A Equação 2.23 merece uma análise mais detalhada. O campo *weighting* é o campo no qual a partícula estaria sujeita se o eletrodo escolhido tivesse potencial unitário, todos os outros fossem nulos e todas as cargas fossem removidas. O potencial *weighting* é obtido

⁸ A corrente induzida também pode ser calculada pelo método das imagens, mas o cálculo do campo elétrico é bastante complexo para geometrias mais sofisticadas de detectores.

pela solução da equação de Laplace

$$\nabla^2 \varphi_0(\vec{r}) = 0. \quad (2.24)$$

Pode-se interpretar, de certa forma, que o campo *weighting* atua como um agente que incorpora a influência da geometria do eletrodo. Assim, seu acoplamento com a velocidade da partícula, governada pelo campo elétrico aplicado, resulta na corrente final induzida. Logo, não se trata do campo elétrico de fato, pois as partículas não seguem as linhas de campo, é um artifício matemático que liga o movimento dos elétrons com a geometria do eletrodo. A carga induzida é a integral no tempo da corrente induzida, portanto

$$\Delta Q = \int_0^t i \, dt = - \int_0^t q\vec{v} \cdot \vec{E}_0 \, dt = -q \int_0^t \vec{E}_0 \cdot d\vec{r} = q\Delta\varphi_0. \quad (2.25)$$

Assim, vemos que a carga induzida independe do caminho percorrido pela carga, mas sim pela sua posição inicial e final do detector, como evidenciado pela [Equação 2.25](#). A título de exemplo, considere um par elétron-lacuna inicialmente localizado em x_0 no instante t_0 . Após um intervalo de tempo t_1 , a lacuna (h) está em x_1 e o elétron (e^-) está em x_2 . A carga induzida em um eletrodo n pode ser expressa como

$$\Delta Q = \int_{t_0}^{t_1} i_{e^-} \, dt + \int_{t_0}^{t_1} i_h \, dt = -q[\varphi_0(x_2) - \varphi_0(x_0)] + q[\varphi_0(x_1) - \varphi_0(x_0)], \quad (2.26)$$

$$\Delta Q = q[\varphi_0(x_1) - \varphi_0(x_2)]. \quad (2.27)$$

Se o elétron chega na superfície do eletrodo n e a lacuna em outro eletrodo, temos uma carga induzida de $-q$. Isso ocorre pois o potencial $V(x) = 1$ no eletrodo n e $V(x) = 0$ nos demais eletrodos. Portanto, após todas as cargas atingirem os eletrodos, a carga total induzida no eletrodo n é equivalente à soma das cargas que atingiram esse mesmo eletrodo ([ROLANDI; RIEGLER; BLUM, 1993](#)).

Vamos agora analisar a corrente e carga induzida em um detector planar, que serão usadas nas simulações ao longo do trabalho. Considere um elétron gerado dentro de um detector de espessura d sob a ação de um campo elétrico vertical para baixo, como mostra a [Figura 2.15](#). Analisaremos a corrente induzida no eletrodo de cima, de forma que seu potencial *weighting* é unitário e no eletrodo de baixo é nulo, indicados por V_0 . No caso do detector planar, a sua espessura é muito menor que a sua área, sendo possível desprezar os efeitos de borda. Dessa forma, a solução da equação de Laplace é conhecida e obtida de forma analítica

$$V_0(z) = \frac{z}{d} \quad (2.28)$$

Assim, o campo *weighting* é

$$\vec{E}_0 = -\frac{dV_0}{dz} \hat{k} = -\frac{1}{d} \hat{k}. \quad (2.29)$$

Portanto, a corrente induzida é, pela [Equação 2.23](#)

$$i = -\frac{qv}{d}. \quad (2.30)$$

A carga induzida ao longo do tempo, por sua vez

$$Q(t) = \int_0^t \frac{qv}{d} dt = -\frac{qv}{d}t. \quad (2.31)$$

Em um detector planar, portanto, a corrente induzida é constante e a carga induzida é uma função linear no tempo, como mostram os gráficos das equações analíticas na Figura 2.13 e a Figura 2.14, respectivamente. Diferentes geometrias de eletrodos resultam em diferentes formatos de corrente induzida. Muitas delas não são possíveis de serem resolvidas analiticamente devido à complexidade da solução das equações de Laplace. Nesse trabalho, focaremos no detector planar.

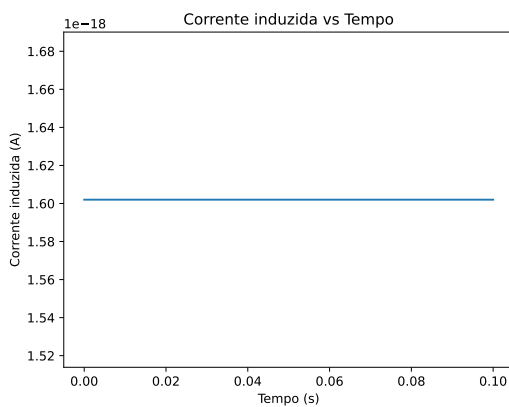


Figura 2.13 – Corrente induzida em função do tempo de um elétron em um detector planar.

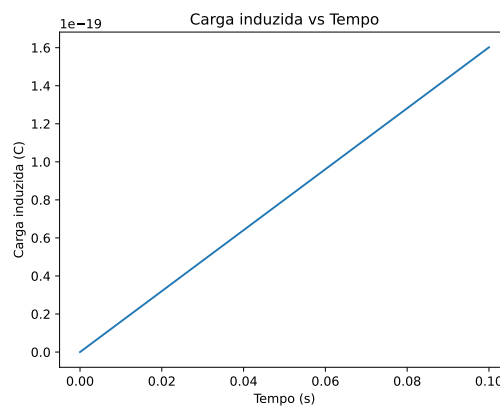


Figura 2.14 – Carga induzida em função do tempo de um elétron em um detector planar.

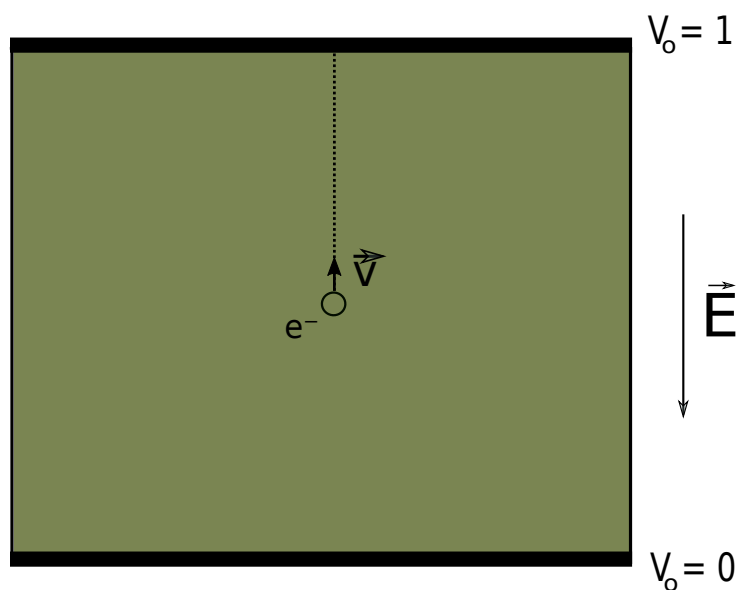


Figura 2.15 – Elétron sob a ação de um campo elétrico em um detector planar.

2.3.5 Efeito dos defeitos do diamante no sinal

Como destacamos na [subseção 2.2.2](#), a geração e recombinação de portadores de carga na rede cristalina afetam a sua dinâmica. Defeitos no diamante, resultantes das condições de crescimento do diamante ou da irradiação, atuam como fontes de geração e recombinação dos portadores gerados pela passagem das partículas. Consequentemente, a eficiência e o formato do sinal do sensor são influenciados por esses processos. Vamos analisar a seguir alguns tipos de defeitos e suas consequências no funcionamento do detector.

2.3.5.1 Armadilhas rasas e profundas

Quando há uma homogeneidade na distribuição de defeitos no material, podemos expressar os efeitos de captura e liberação por excitação térmica de partículas em termos de um tempo característico, ou também chamado de tempo de relaxamento, τ_T e τ_D , respectivamente, pelas equações ([CANALI; NAVA; REGGIANI, 1985](#))

$$\frac{1}{\tau_T} = \frac{1}{N_T \sigma_c v_{th}}, \quad (2.32)$$

$$\frac{1}{\tau_D} = \frac{1}{N_T \sigma_e v_{th}} \exp(E_T/k_B T), \quad (2.33)$$

onde N_T é a densidade de centros de captura (defeitos), E_T é a energia de ativação, k_B é a constante de Boltzmann, v_{th} é a velocidade térmica dos portadores de carga livres, e σ_c e σ_e são a seção de choque de captura e emissão, respectivamente. Se τ_D for muito maior que o tempo de trânsito dos portadores de carga (tempo máximo que um portador leva dentro do detector), podemos considerar que praticamente não ocorre emissão. Esse tipo de defeito é chamado de armadilha profunda (do inglês, *deep trap*). Por outro lado, quando o τ_D é da mesma ordem ou menor, temos uma armadilha rasa (do inglês, *shallow trap*).

Fazendo uso das situações estudadas na [Equação 2.14](#), o caso de um sistema com geração e recombinação pode ser visto como uma armadilha rasa, de forma que temos a seguinte corrente induzida

$$i(t) = -\frac{qv}{d} \left[1 + \frac{\tau_{total}}{\tau_T} \left(e^{-t/\tau_{total}} - 1 \right) \right], \quad (2.34)$$

onde $\frac{1}{\tau_{total}} = \frac{1}{\tau_T} + \frac{1}{\tau_D}$. O caso de uma armadilha profunda é a situação onde $\tau_D \rightarrow \infty$, portanto:

$$i(t) = -\frac{qv}{d} e^{-t/\tau_T}. \quad (2.35)$$

A carga induzida é obtida facilmente

$$Q(t) = -\int_0^t \frac{qv}{d} \exp\left(-\frac{t}{\tau_T}\right) dt = \frac{qv\tau_T}{d} \left(e^{-t/\tau_T} - 1 \right). \quad (2.36)$$

Por fim, podemos ter uma situação mais complexa, onde há armadilhas profundas e rasas coexistindo, como ilustrado na [Figura 2.16](#). Um exemplo poderia ser o diamante

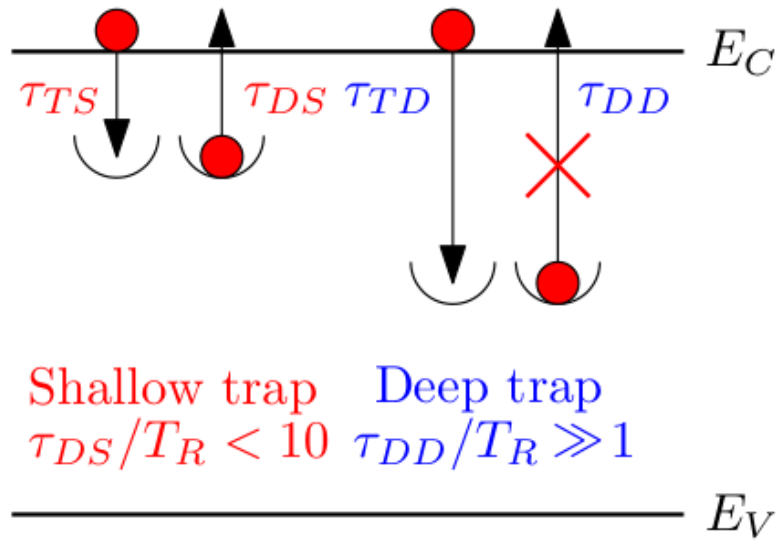


Figura 2.16 – Ilustração dos dois tipos de armadilhas no diagrama de bandas (PIPEK, 2018). Quando o tempo de liberação é muito maior que o tempo de deriva ($\tau_{DD}/T_R \gg 1$), a armadilha é profunda (*deep trap*). No caso em que o tempo de liberação é comparável ou menor que o tempo de deriva ($\tau_{DS}/T_R < 10$), a armadilha é rasa (*shallow trap*).

policristalino, em que as armadilhas rasas são os defeitos dentro do grão e as profundas os contornos de grão. Neste caso teremos uma equação adicional nas equações de continuidade, mas a solução é semelhante ao caso de uma armadilha rasa, porém com uma soma de termos exponenciais (PIPEK, 2018)

$$i(t) = -\frac{qv}{d} [Ae^{-t/\tau_1} + Be^{-t/\tau_2}]. \quad (2.37)$$

2.3.5.2 Defeitos por irradiação

A irradiação do diamante introduz novos defeitos no material, degradando-o com o tempo. Em detectores de altas energias, costuma-se considerar o efeito da irradiação como sendo homogêneo⁹ através de um termo fenomenológico que diminui o livre caminho médio dos portadores de carga da forma devido ao aumento na densidade de armadilhas de forma linear

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_0} + k\Phi, \quad (2.38)$$

onde λ_0 é o livre caminho médio intrínseco, k é a constante de dano e Φ é a fluência de partículas.

A constante de dano depende do material, da partícula incidente e da sua energia inicial. No caso em que há um campo elétrico uniforme e supondo que há apenas armadilhas profundas, é possível obter a eficiência do detector em função do campo elétrico

⁹ Uma exceção é o caso do PPS, em que os defeitos de irradiação são bem localizados devido à proximidade do feixe (CMS and TOTEM Collaborations, 2023).

aplicado e do livre caminho médio de forma analítica, conhecida como equação de Hecht (LEROY; RANCOITA, 2011)

$$\eta = \frac{\lambda_e + \lambda_h}{d} - \left(\frac{\lambda_e}{d}\right)^2 \left(1 - e^{-\frac{d}{\lambda_e}}\right) - \left(\frac{\lambda_h}{d}\right)^2 \left(1 - e^{-\frac{d}{\lambda_h}}\right). \quad (2.39)$$

Dessa forma, a Equação 2.39 é utilizada para obter-se experimentalmente a constante de dano e, assim, estimar a duração do detector com base na fluência de partículas que incidirá sobre ele após um período de funcionamento. Diamantes monocristalino e policristalino produzidos pelo método de CVD foram irradiados com prótons de 800 MeV e 24 GeV e mostrou-se que eles possuem a mesma constante de dano, indicando que o mecanismo de dano por irradiação é o mesmo (BĀNI et al., 2019). Pode-se pensar, de forma bastante simplificada, que o diamante policristalino pode ser entendido como um diamante monocristalino com um λ_0 muito menor devido à perda de carga pelos defeitos intrínsecos do diamante. É claro que essa simplificação despreza a inhomogeneidade dos defeitos e na coleta de carga, mas ainda assim é utilizada para fazer estimativas experimentais.

Neste capítulo, introduzimos os conceitos base que servirão para embasar a simulação computacional. A perda de energia e o regime de partículas MIP, discutidos na subseção 2.1.1 e o princípio de funcionamento de um detector de diamante junto com a geração do sinal, abordado na subseção 2.3.4, serão utilizados na simulação que será melhor discutida no capítulo seguinte.

3 Simulação

Com o objetivo de estudar os efeitos dos defeitos de contornos de grão e internos do grão na geração de sinal e na eficiência dos detectores de diamante, uma simulação computacional foi desenvolvida para o transporte de cargas no material. A simulação é dividida em duas partes: a primeira diz respeito à geração de carga devido à perda de energia de uma partícula no material. Nessa etapa, utilizamos uma abordagem simplificada, restrita a MIPs, e outra mais abrangente através da simulação do transporte de partículas com a matéria, que usa o método Monte Carlo, o **Geant4**. A segunda parte da simulação trata do transporte dessas cargas no diamante, em que utiliza-se uma rede (*grid*) para levar em conta os defeitos inomogêneos do diamante policristalino.

3.1 Geometria

O espaço da simulação é mapeado através de uma rede cuja resolução (espaço entre dois pontos da rede) é pré-definida seguindo as características do problema, como mostra a [Figura 3.1](#). Desta forma, todas as grandezas de interesse para a simulação, como campo elétrico, campo de potencial, velocidade, e entre outros, estão contidas em uma matriz ($m \times n$), com as mesmas dimensões da rede. Considerando que os detectores mais comuns de diamante são os planares, nesta simulação focaremos em um detector com essas características, com um campo elétrico uniforme ao longo do material, de forma que todos os elementos da matriz de campo elétrico possuem um campo dado pela equação

$$\vec{E}_{i,j} = \frac{V}{d} \hat{k}, \quad (3.1)$$

onde V é a diferença de potencial e d a espessura do detector. Dessa forma, a resolução da rede determina o intervalo temporal da simulação, que é calculado por

$$\Delta t = \frac{g_r}{v_k}, \quad (3.2)$$

onde v_k é a componente z da velocidade e g_r é a resolução da rede. Importante ressaltar que o método da [Equação 3.1](#) só é válido para a situação em que o campo elétrico é uniforme em todos os pontos do detector, garantindo, assim, que a velocidade das cargas seja constante. Para situações mais complexas, envolvendo campos mais elaborados ou geometrias distintas nos detectores, é necessário aplicar uma discretização temporal. Essa abordagem leva em conta os diferentes intervalos temporais entre o transporte de partículas de um ponto a outro na rede.

A resolução da rede desempenha um papel importante nos resultados da simulação. Quanto menor a resolução, mais passos são dados, e mais precisos são os resultados. No

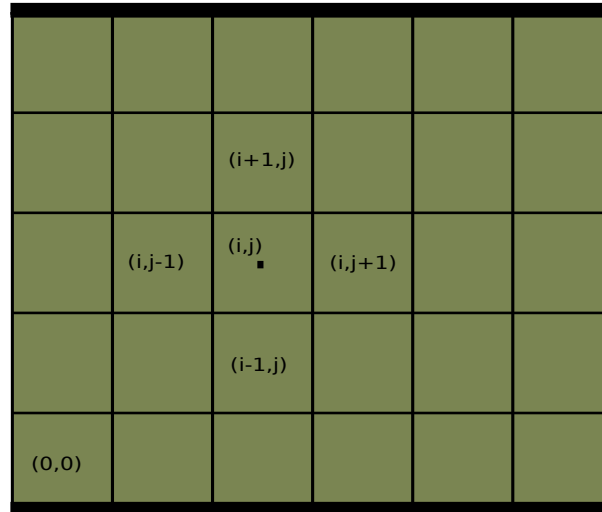


Figura 3.1 – Representação do espaço discretizado pela rede. (i, j) é um ponto arbitrário no espaço.

entanto, esse aumento na precisão implica um maior tempo computacional devido à maior quantidade de passos e à discretização do espaço quando são consideradas inomogeneidades no campo elétrico e no espaço. Assim, é fundamental encontrar um equilíbrio adequado entre precisão e tempo computacional.

3.2 Geração de carga

Conforme abordado no [Capítulo 2](#), a interação de partículas carregadas com um material, neste caso, diamante, resulta na perda de energia. Essa perda de energia promove elétrons para a banda de condução e cria lacunas na banda de valência. Os pares de elétrons e lacunas, uma vez gerados, permanecem livres no material por um determinado tempo, originando uma corrente quando sujeitos a um campo elétrico aplicado. Entretanto, a distribuição de carga proveniente de partículas não é trivial de estimar. Ao contrário de casos ideais, como MIPs, a perda de energia não é uniforme no material. Por exemplo, estima-se que uma partícula do tipo MIP no diamante produza aproximadamente $36 \frac{e^-/h}{\mu\text{m}}$ ([BOSSINI; MINAFRA, 2020](#)). No entanto, para outras partículas ou íons em regimes distintos, são necessárias simulações Monte Carlo apropriadas para realizar cálculos precisos. Para abordar essa questão, adotamos dois modelos de geração de carga. O primeiro, mais simples e restrito à MIPs, é empregado principalmente para fins de validação. O segundo, mais realista, utiliza um simulador Monte Carlo, cujos detalhes serão explorados nas próximas subseções.

3.2.1 Partículas Minimamente Ionizantes

Como observado que a perda de energia de partículas MIP é aproximadamente constante e conhecida, podemos estimar o número de pares elétron-lacuna a partir da distância percorrida pela partícula incidente no material. Assume-se, por hipótese, que a partícula atravessa todo o detector e em linha reta, portanto, sem efeitos significativos de espalhamento múltiplo. Dessa forma, podemos calcular a distância percorrida de uma partícula com ângulo incidente θ por trigonometria, como mostra a [Figura 3.2](#):

$$d = \frac{H}{\text{sen}\theta}, \quad (3.3)$$

onde H é a espessura do detector. O cálculo do número de pares gerados é dado por:

$$N_{e^-/h} = d \left(36 \frac{e^-/h}{\mu\text{m}} \right). \quad (3.4)$$

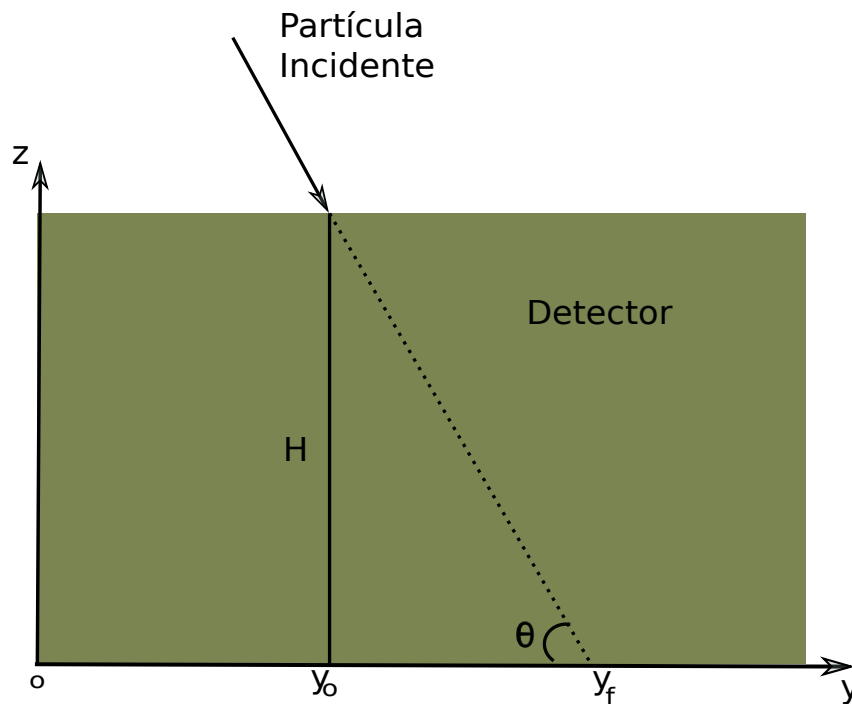


Figura 3.2 – Ilustração de uma partícula MIP passando pelo detector. A linha pontilhada é trajetória que ela faria dentro do material quando desconSIDERAMOS o efeito de espalhamentos múltiplos.

Além disso, como a trajetória da partícula é uma linha reta, podemos descrever seus pontos pela equação

$$y = y_0 - \frac{(z - z_0)}{\text{tg}\theta}. \quad (3.5)$$

Assim, o procedimento seguinte é feito para geração de partículas, assumindo que se sabe, *a priori*, a espessura H do detector, a posição inicial, e o ângulo de incidência:

1. Um número z é sorteado aleatoriamente no intervalo $(0, H)$ utilizando uma distribuição uniforme.
2. Usa-se esse valor z como entrada na [Equação 3.5](#) para obter a posição y correspondente.
3. Repete-se esse processo $N_{e^-/h}$ vezes.

O objetivo desse procedimento é o de manter a distribuição aproximadamente uniforme de perda de energia, como esperado, mas, ao mesmo tempo, adicionar uma flutuação estatística que também é inerente ao processo a fim de conferir-lhe um caráter mais realista e menos idealizado. Esse comportamento é corroborado na ??, onde temos dois exemplos de distribuição de carga de MIPs com ângulos de incidência de 0° na parte superior e 30° na parte inferior.

3.2.2 Geant4

No caso de partículas e íons em geral, a aproximação utilizada na seção anterior não é mais válida, pois a perda de energia das partículas no material não é constante ao longo do seu trajeto. Nesse cenário, faremos uso do *toolkit* de simulação **Geant4** ([AGOSTINELLI et al., 2003](#); [ALLISON et al., 2016](#); [ALLISON et al., 2006](#)), um *software* robusto dedicado à simulação da interação de partículas com a matéria e um dos mais utilizados atualmente na simulação de detectores de Física de Altas Energias ([MAZUREK; CORTI; MULLER, 2021](#); [SRIMANOBHAS et al., 2023](#)). É relevante observar que o **Geant4** não se enquadra como um simulador convencional, mas sim como um *toolkit*, ou seja, uma "caixa de ferramentas". Diferentemente dos simuladores tradicionais, que estão prontos para uso com o usuário definindo parâmetros específicos, o **Geant4** oferece classes abstratas contendo a estrutura comum da simulação. Cabe ao usuário a implementação, por meio de classes concretas, como sua simulação será executada. Isso abrange a definição da geometria, entrada e saída de dados, a estrutura entre eventos, entre outros aspectos.

No escopo do nosso trabalho, a simulação tem objetivo de obter a distribuição de cargas no material para que estas sejam usadas posteriormente em uma outra simulação dedicada ao transporte de cargas. A geometria é um paralelepípedo cujas dimensões e material são pré-definidas por meio de um arquivo de entrada. Foi utilizada a lista física FTFP_BERT, apropriada para simulações de alta energia, e a versão 11.1.0. Cabe também destacar que, embora estejamos interessados no diamante, a simulação é compatível com qualquer material desde que a energia média para geração de pares elétron-lacuna seja conhecida. Um exemplo da geometria da simulação está na [Figura 3.4](#) em que um próton de alta energia atravessa uma camada de diamante. Em cada passo, a perda de energia e as coordenadas espaciais são registradas e salvas em um arquivo de saída para serem posteriormente utilizadas na outra parte da simulação.

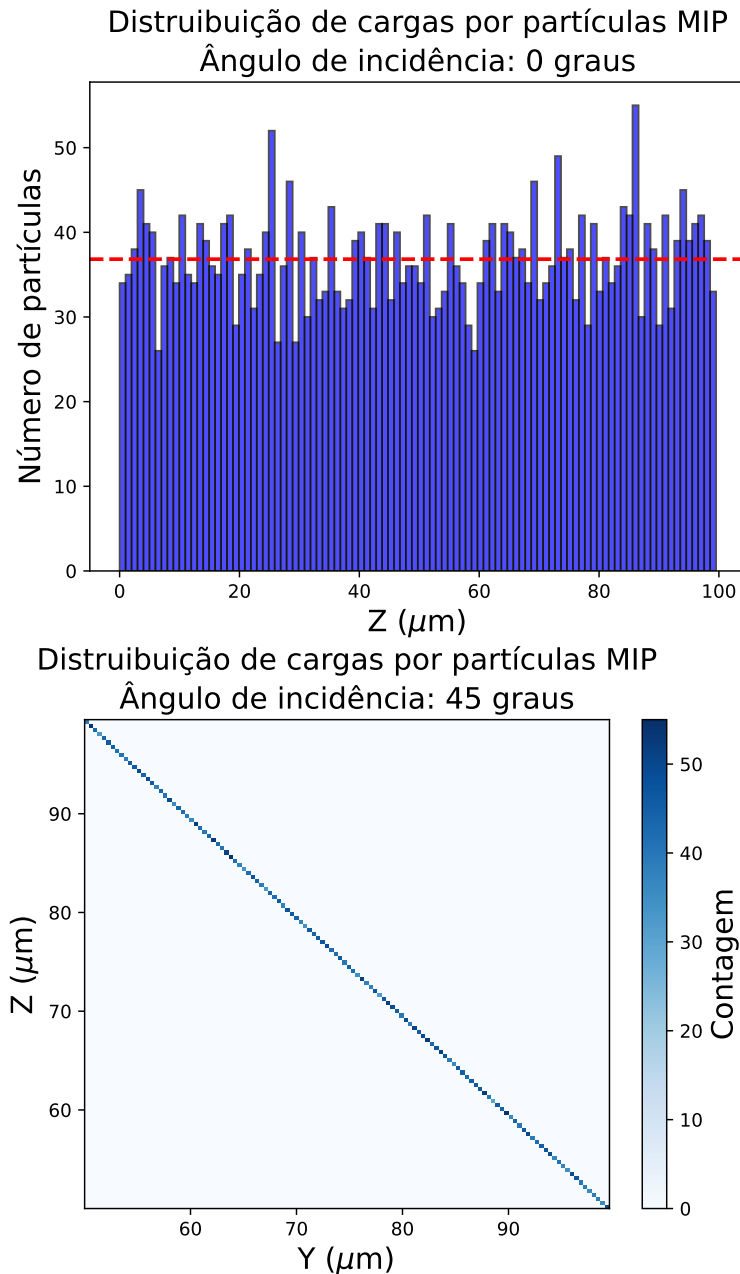


Figura 3.3 – (Superior) Histograma da distribuição de cargas em um detector de uma partícula do tipo MIP incidindo a 0° . A linha vermelha tracejada é a média de pares elétrons-lacuna por intervalo. (Inferior) Histograma bidimensional da distribuição de cargas em um detector de uma partícula do tipo MIP incidindo a 30° .

A fim de validar a simulação, a perda de energia de prótons foi comparada com as tabelas de poder de freamento dos *softwares* SRIM (ZIEGLER; ZIEGLER; BIRSACK, 2010) e PSTAR (BERGER; COURSEY; ZUCKER, 1999), que pode ser visto na Figura 3.5. O programa obtém resultados similares com os outros *softwares*, o que é um bom indicativo de que a perda de energia dos prótons está sendo devidamente calculada. Além disso, é necessário checar se a distribuição de perda de energia é também coerente, pois o poder de freamento nos fornece apenas a média da perda de energia. Para isso, estudamos o caso

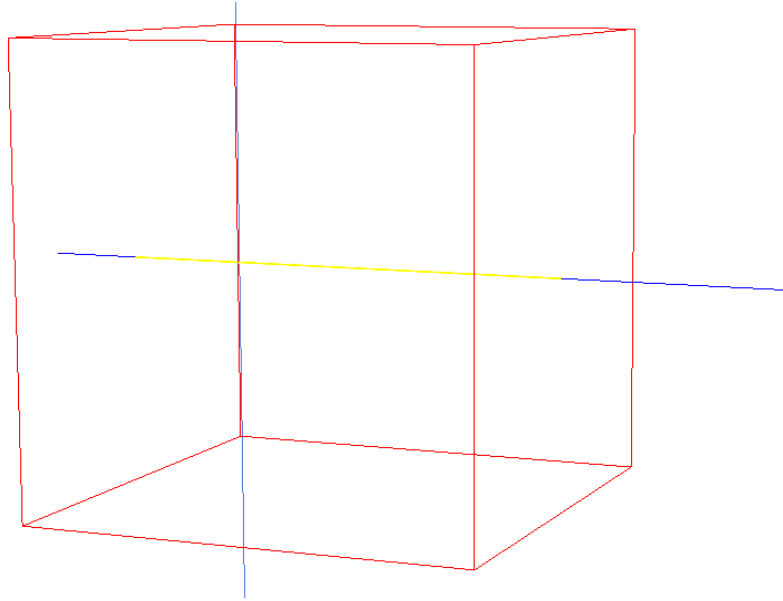


Figura 3.4 – Exemplo da simulação em **Geant4** de um próton de alta energia no diamante. O paralelepípedo de contornos vermelhos é o diamante, a linha azul é o próton e os pontos amarelos são os locais onde houve perda de energia.

de um próton MIP de 3 GeV, pois a carga gerada por uma partícula desse tipo é bastante conhecida na literatura ([WEISS et al., 2019](#))¹ e pode servir como uma boa medida da consistência da simulação. A [Figura 3.6](#) mostra um histograma da carga criada para um diamante de 500 μm , onde a linha vermelha é um ajuste de função utilizando a distribuição de Landau. Podemos observar que a distribuição de carga é bastante condizente com o tipo de Landau e o MPV obtido foi de 2,7 fC, bastante próximo do esperado.

Conforme mencionado anteriormente, o uso do **Geant4** não se limita exclusivamente a prótons, abrangendo também qualquer partícula ou íon, desde que devidamente validados. Um exemplo relevante é a partícula alfa, onde o uso de detectores de diamante surge como uma alternativa aos de silício devido à sua maior resistência à radiação, tornando-os mais adequados para ambientes com elevada exposição radiação ([KUMAR; TOPKAR, 2016](#)). Outro exemplo, no contexto específico do diamante, é o estudo da eficiência nos lados de crescimento e substrato, pois partículas alfa com energias na ordem de alguns MeV apresentam uma penetração limitada no material², com a maior ionização no fim da sua trajetória. Isso faz com que apenas um tipo de carga (elétron ou lacunas, dependendo da polarização) contribua significativamente para o sinal, pois a outra é rapidamente coletada ([BEHNKE et al., 1998](#)). Dessa forma, foram utilizadas partículas alfa de 5,8 MeV na simulação e a perda de energia em função da profundidade no detector foi analisada. Conforme mostrado na [Figura 3.7](#), os resultados indicam um alcance de aproximadamente 15 μm , com a maior perda de energia ocorrendo no final da trajetória, o que é consistente

¹ Espera-se que uma partícula MIP gere cerca aproximadamente 2,9 fC de carga em 500 μm de diamante.

² Aproximadamente 16 μm para partículas alfa de energias de 5,8 MeV.

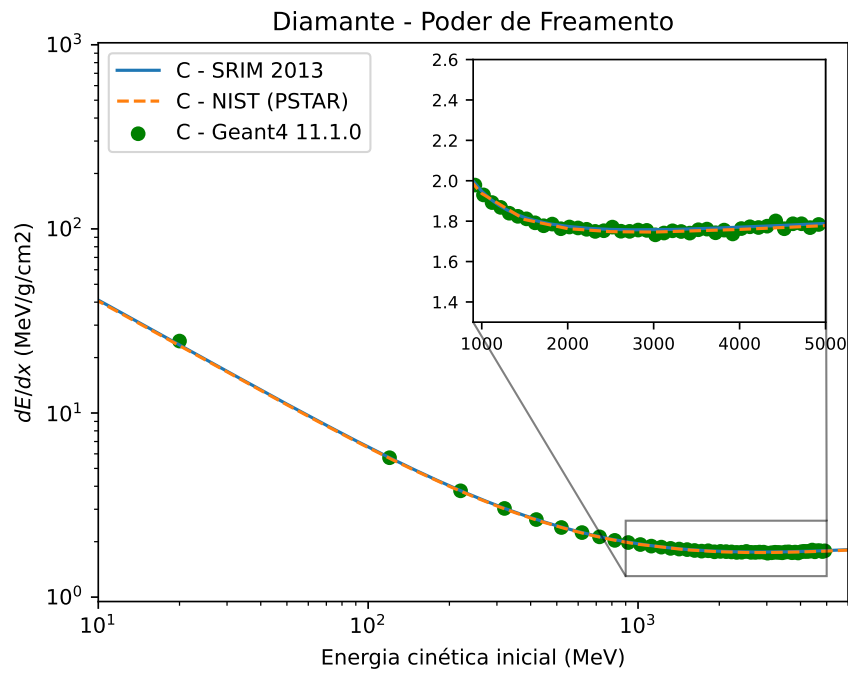


Figura 3.5 – Validação do poder de freamento de prótons no diamante da simulação com tabelas do SRIM e do PSTAR.

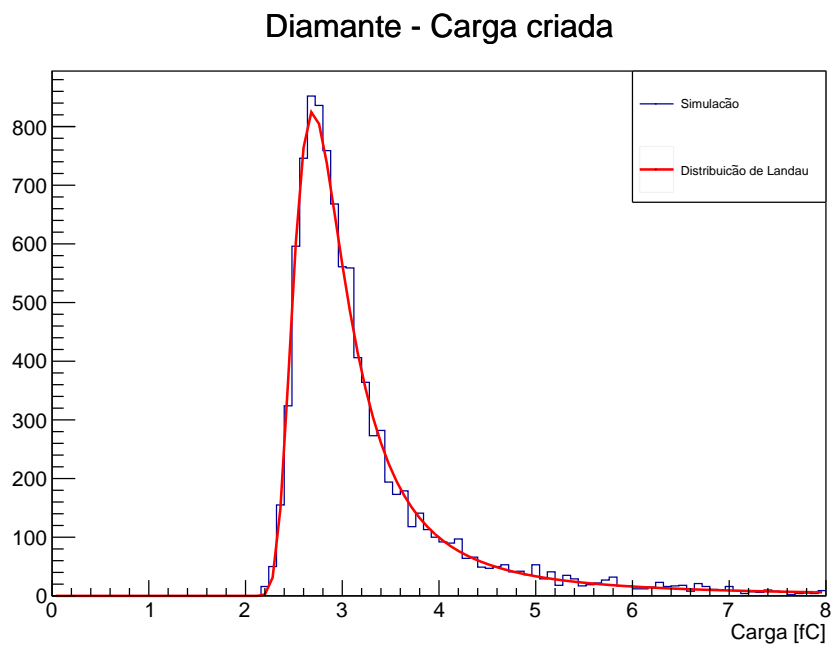


Figura 3.6 – Histograma da carga criada por 10^4 eventos de prótons de 3 GeV em $500 \mu\text{m}$.

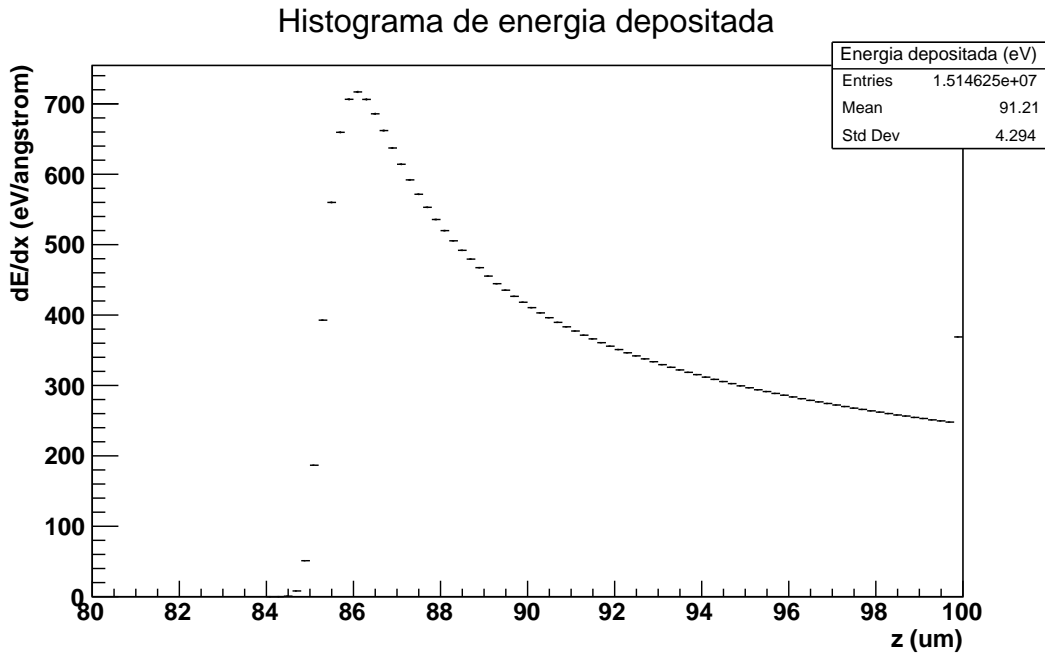


Figura 3.7 – Poder de freamento de uma partícula alfa de 5,8 MeV em função da posição z no diamante.

com a literatura.

3.3 Transporte de carga e geração do sinal no detector

Considerando que as partículas são geradas por um dos métodos descritos na [seção 3.2](#), o passo seguinte é calcular o sinal gerado pelas mesmas no detector. Para isso, as cargas devem ser propagadas na rede, levando-se em consideração tanto o campo elétrico aplicado quanto a geometria do detector. Além disso, no caso de um diamante policristalino, é preciso considerar os defeitos do material, representados, neste caso, pelos contornos de grãos. Diante dessas considerações, desenvolvemos uma simulação em Python para propagar as partículas ao longo do material e calcular o sinal gerado por essas cargas nos detectores de diamante.

A velocidade das cargas em uma célula (i, j) é calculada pela [Equação 2.22](#), porém adaptadas para a forma matricial

$$\vec{v}_{i,j} = \frac{\mu_0 \vec{E}_{i,j}}{1 + \frac{\mu_0 |\vec{E}_{i,j}|}{v_{sat}}}, \quad (3.6)$$

onde $\vec{E}_{i,j}$ é o vetor campo elétrico na célula (i, j) . A geração de sinal é calculada a partir do movimento das cargas seguindo o teorema de Schokley-Ramo, descrito na [Equação 2.23](#). A corrente induzida na passagem de uma carga de um ponto a outro da rede é dada por ([MILAZZO; MAINWOOD, 2003](#))

$$i_{i \rightarrow (i+1)} = -q \vec{v}_{i,j} \cdot \vec{E}_{i,j}. \quad (3.7)$$

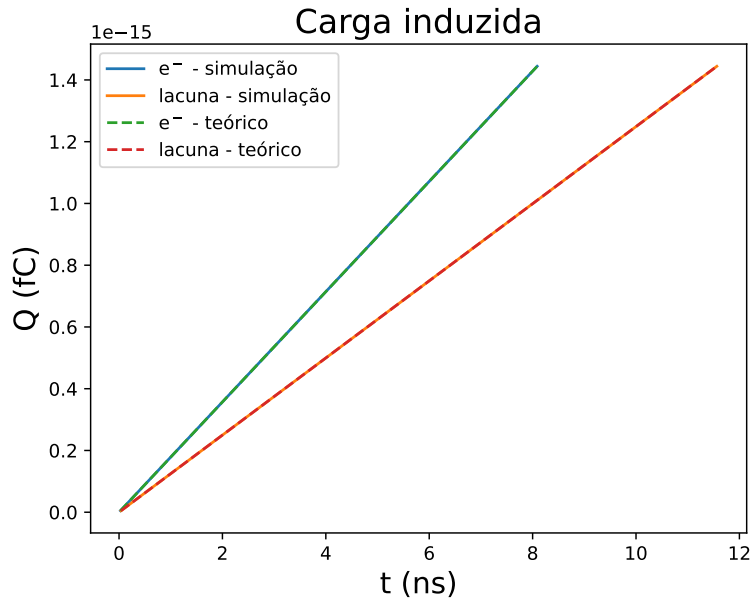


Figura 3.8 – Comparação da carga induzida na simulação com o modelo teórico para um detector planar.

A carga induzida é a integral no domínio do tempo da corrente induzida. Em um espaço discretizado, temos

$$\Delta Q_{i \rightarrow (i+1)} = -q \vec{v}_{i,j} \cdot \vec{E}_{i,j} \Delta t. \quad (3.8)$$

A carga total induzida é a soma de todas as cargas induzidas

$$\Delta Q_{\text{total}} = \sum_i Q_{i \rightarrow (i+1)}. \quad (3.9)$$

A partir da carga total induzida, podemos definir a eficiência de coleta de carga do detector como sendo a razão entre a carga total induzida e a carga das partículas geradas inicialmente (Q_0)

$$\eta = \frac{\Delta Q_{\text{total}}}{Q_0}. \quad (3.10)$$

Para validar o modelo, apresentamos na [Figura 3.8](#) o resultado de uma simulação de 18.000 pares (escolhemos esse valor pois sabe-se que uma MIP gera esse número de pares em $500 \mu\text{m}$ de diamante) elétron-lacuna posicionados no centro do detector. A carga induzida ao longo do tempo mostra uma boa concordância com o valor teórico, conforme descrito pela [Equação 2.31](#). Esse resultado sugere que o teorema de Schockley-Ramo e o modelo de transporte de cargas foram implementados corretamente.

3.4 Defeitos no material

Adotaremos um modelo de *trapping-detrapping* (armadilhamento-desarmadilhamento) de dois níveis previamente empregado por (MILAZZO; MAINWOOD, 2004) na simulação

de diamantes policristalinos. Esse modelo obteve sucesso ao reproduzir os resultados experimentais obtidos por (HAN; WAGNER, 1996). Nele, consideramos dois tipos de defeitos: aqueles localizados dentro do grão e os situados nos contornos de grãos. A inclusão desses defeitos é realizada por meio de uma matriz de tempo de relaxamento, τ_T , permitindo o mapeamento espacial dos defeitos em cada ponto do espaço. Para os grãos, dois modelos são considerados e discretizados na rede, provocando alterações na configuração da matriz de tempo de relaxamento. É importante destacar que, dado o pressuposto de discretização do modelo na rede, a simulação pode ser expandida não apenas para esses tipos de grãos específicos, mas também para quaisquer outros defeitos ou inomogeneidades espaciais de interesse.

3.4.1 Defeitos dentro do grão

Os defeitos dentro do grão são assumidos como homogêneos no espaço, de forma bastante semelhante à modelagem de danos causados pela radiação nos detectores quando irradiados por partículas de alta energia. Esse tipo de defeito é definido como uma armadilha rasa (do inglês, *shallow trap*), pois é permitido que haja liberação de cargas presas por excitação térmica, que é o processo de *detrapping*. A probabilidade de que uma partícula seja capturada no transporte de uma célula i para $(i + 1)$ é:

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow (i+1)}^T = \frac{\tau_{i,j}^T}{\Delta t}. \quad (3.11)$$

Para o *detrapping*, temos uma expressão análoga:

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow (i+1)}^D = \frac{\tau_{i,j}^D}{\Delta t}. \quad (3.12)$$

Na simulação, há duas matrizes de partículas, uma para as partículas livres (\overleftrightarrow{P}) e outra para as partículas capturadas pelo processo de *trapping* (\overleftrightarrow{T}). Assim que uma partícula é capturada, ela é registrada na matriz de \overleftrightarrow{T} , e pode retornar para a matriz \overleftrightarrow{P} caso seja liberada e assim é propagada no espaço novamente. O algoritmo da simulação desse processo é o seguinte:

1. Em cada cela, há $N_{i,j}$ partículas. A cada passo, $N_{i,j}$ sorteios para cada cela são feitos utilizando um valor aleatório r entre $[0,1]$.
2. Caso $r < \mathcal{P}_{i \rightarrow (i+1)}^T$, subtraímos uma partícula do elemento de matriz $P_{i,j}$ e adicionamos no elemento de matriz $T_{i,j}$.
3. Após propagar as partículas livres no passo, $N_{i,j}$ sorteios são feitos para cada elemento da matriz \overleftrightarrow{T} .
4. Caso $r < \mathcal{P}_{i \rightarrow (i+1)}^D$, subtraímos uma partícula do elemento de matriz $T_{i,j}$ e adicionamos no elemento de matriz $P_{i,j}$.

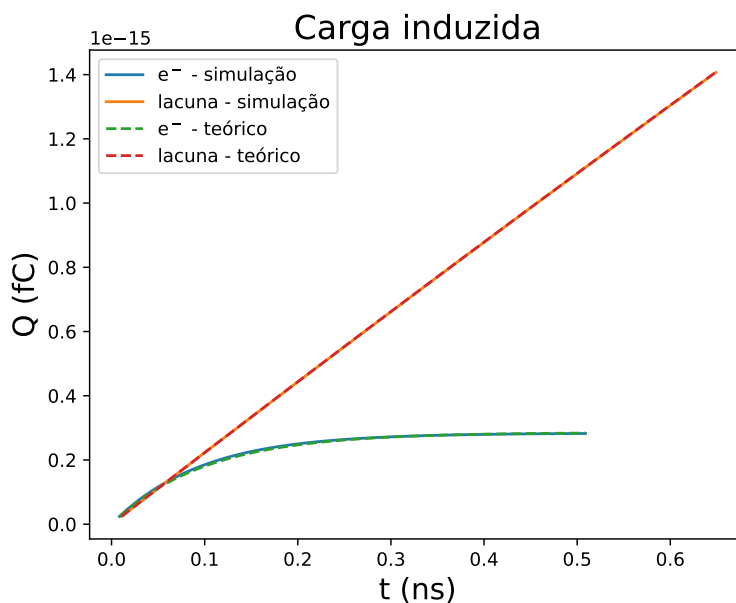


Figura 3.9 – Carga induzida com efeito de *trapping* comparada com o modelo teórico. Utilizou-se $\tau_{i,j}^T = 0,1$ ns para elétrons e $\tau_{i,j}^T = 10$ ns para lacunas.

5. O algoritmo é repetido até que a soma das partículas coletadas e capturadas sem retorno sejam igual ao número total de partícula geradas.

Para fins de comparação, exploramos o efeito de *trapping* sem *detrapping* ($\tau_{i,j}^D \rightarrow \infty$), considerando que a solução da equação de transporte é analítica e, portanto, mais facilmente validada. Nessa abordagem, posicionamos 18.000 pares elétron-lacuna no centro do detector e os propagamos utilizando um tempo médio de *trapping* de $\tau_{i,j}^T = 0,1$ ns para elétrons e $\tau_{i,j}^T = 10$ ns para lacunas, dentro da faixa de parâmetros utilizada por (MILAZZO; MAINWOOD, 2004). Os resultados apresentados na Figura 3.9 indicam que o modelo está adequadamente implementado.

Uma preocupação importante relacionada a esse modelo é a resolução da rede, que pode impactar nos resultados. Quanto maior a resolução, menos sorteios são feitos e menos preciso é o processo de *trapping*. Entretanto, uma resolução muito pequena aumenta o tempo de simulação, principalmente devido ao maior número de passos e sorteios, assim como a demora na discretização de partículas e inomogeneidades na rede. Dessa forma, escolhemos uma resolução de $0,84 \mu\text{m}$, que é a mesma usada na simulação feita por (MILAZZO; MAINWOOD, 2004), e mostra uma concordância razoável levando-se também em conta o tempo computacional. Essa escolha é corroborada ao compararmos a eficiência do detector, calculada a partir da simulação com o modelo de Hecht para partículas do tipo MIP, que é dado pela Equação 2.39. Como mostrado pela Figura 3.10, a simulação concorda muito bem com os diferentes valores de livre caminho médio (λ_e e λ_h) das cargas.

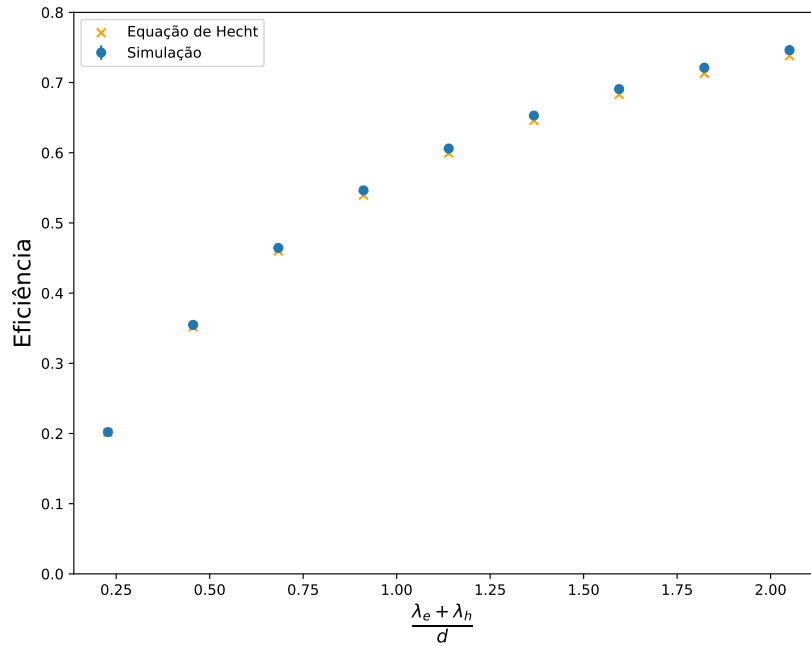


Figura 3.10 – Eficiência do detector em relação à razão entre a soma do livre caminho médio dos portadores de carga e a espessura do detector para partículas do tipo MIP. Consideramos que $\lambda_h = 1,3\lambda_e$ (BÄNI et al., 2019).

3.4.2 Defeitos de contorno de grão

Os diamantes policristalinos crescem, preferencialmente, de forma colunar, com grãos cujo tamanho inicial é de, aproximadamente, $1 \mu\text{m}$ e seu tamanho cresce linearmente com a espessura do material (ZHAO et al., 1993). Dependendo das condições de temperatura e pressão, o diamante pode não ter uma direção preferencial de crescimento (NETO et al., 2022). Portanto, dois modelos de grãos serão estudados nesse trabalho. No primeiro, em que não há uma orientação preferencial de crescimento (*Partially Oriented Polycrystalline - PCD*), os grãos são quadrados, como mostra a Figura 3.11. No segundo, em que os grãos crescem de forma colunar (*Highly Oriented - HOD*), temos uma estrutura em formato de cone, que começa com $1 \mu\text{m}$ e cresce linearmente até uma região de saturação, onde o crescimento cessa e o grão cresce com tamanho lateral constante, como ilustrado na esquerda da Figura 3.12, em que $d_{\text{grão}}$ é o tamanho lateral do grão, muitas vezes chamado de tamanho do grão. A altura máxima em que o grão cresce até saturar não é bem definido e é um parâmetro livre na simulação. Como indicado na direita da Figura 3.12, é possível ter duas formas de crescimento que levam ao mesmo tamanho lateral de grão. No caso do grão vermelho, ele cresce linearmente até uma altura h_1 e cessa. Já no grão azul, o crescimento linear cessa em uma altura $h_2 > h_1$. Chamaremos esse parâmetro de altura de saturação. Assim, quanto maior o tamanho lateral do grão, menor a inclinação da reta de crescimento para uma mesma altura de crescimento. A fim de dirimir confusões na

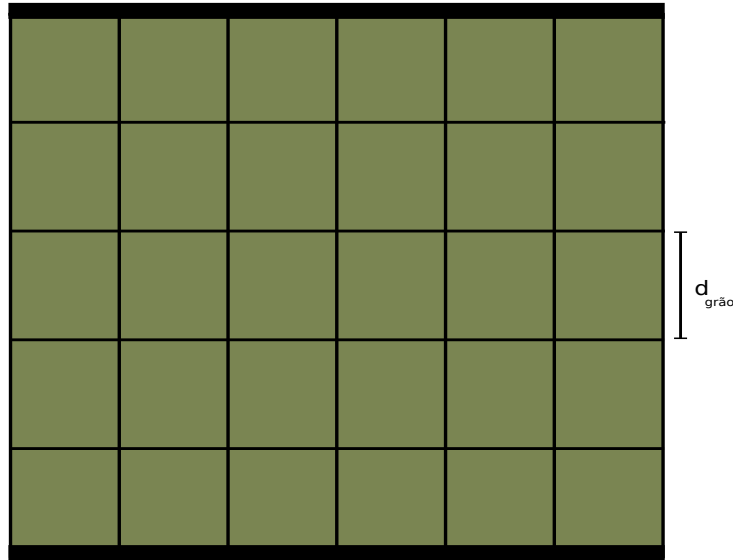


Figura 3.11 – Ilustração do modelo de grãos PCD. O tamanho lateral do grão ($d_{\text{grão}}$) é o tamanho da aresta do quadrado.

terminologia quando tratarmos do grão colunar, chamaremos $d_{\text{grão}}$ de tamanho lateral de grão e h de altura de saturação.

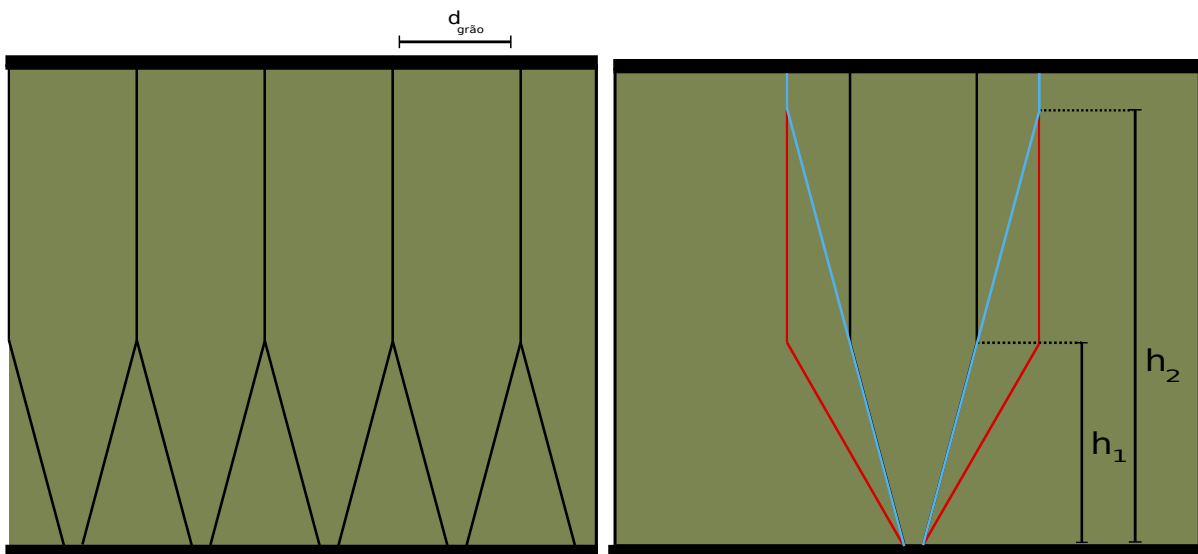


Figura 3.12 – (Esquerda) Ilustração do modelo de grãos HOD. O tamanho lateral do grão ($d_{\text{grão}}$) é a largura do cone após a saturação. (Direita) Crescimento dos grãos no modelo HOD. O tamanho lateral do grão cresce linearmente até uma altura de saturação (h_1 ou h_2). A altura até essa saturação é um parâmetro da simulação.

Os defeitos de contorno de grão são classificados como armadilhas profundas (do inglês, *deep traps*), o que significa que as partículas que são capturadas por esse tipo de defeito não são capazes de voltar ($\tau_{i,j}^D \rightarrow \infty$). Esses modelos são gerados a partir de funções, que geram uma série de pontos que são transportados para a matriz de tempo de

relaxação ($\overleftrightarrow{\tau}^T$). Uma vez que uma ou mais partículas entram em um ponto da rede que possui um contorno de grão, ela é capturada. Portanto, nesse caso:

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow (i+1)}^T = 1. \quad (3.13)$$

Foram realizados testes de consistência com o objetivo de verificar a coerência na discretização das funções na matriz. No caso do modelo PCD, incidimos MIPs com ângulo de incidência de $\pm 1^\circ$ e 0° ao longo de um grão de $10 \mu\text{m}$, como pode ser visto na Figura 3.13. Espera-se que a eficiência seja a mesma ao longo do grão devido à simetria, exceto nas bordas, o que de fato pode ser visto na Figura 3.13. Quanto ao modelo HOD, a eficiência de MIPs foi calculada com ângulo de 0° em várias posições de um grão com tamanho de $20 \mu\text{m}$. Como indicado no gráfico superior da Figura 3.14, os valores de eficiência apresentam uma razoável simetria. As pequenas discrepâncias ocorrem devido à discretização dos grãos na rede, que não é perfeitamente simétrica, como evidenciado na parte inferior da Figura 3.14. Outros estudos que abordaram simulações computacionais de diamantes policristalinos,

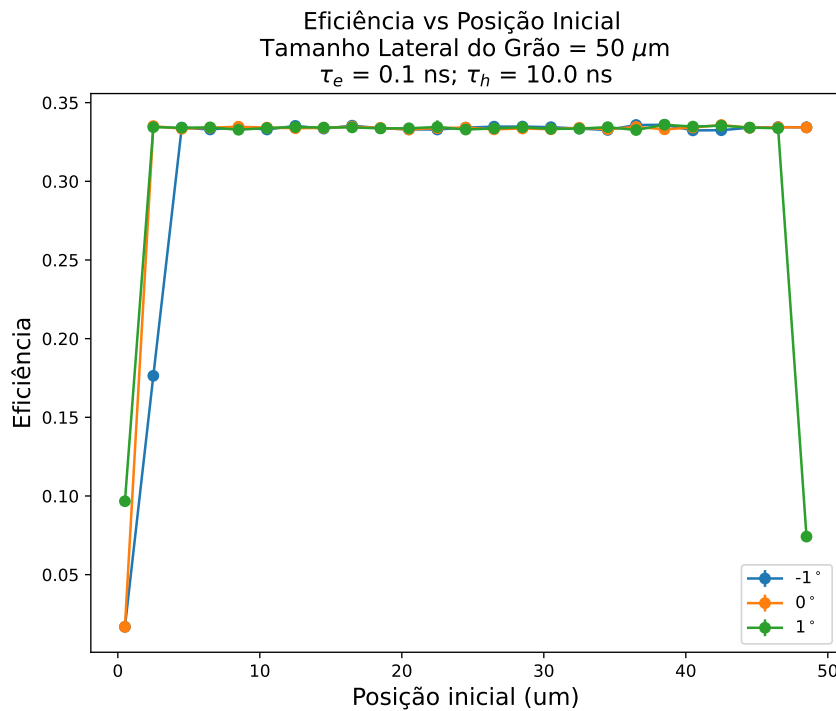


Figura 3.13 – Eficiência em função da posição inicial de incidência para ângulos de $\pm 1^\circ$ e 0° . O tamanho lateral do grão é de $50 \mu\text{m}$.

como o trabalho de (OH, 1999), incorporaram uma maior probabilidade de *trapping* à medida que as partículas se aproximam do contorno de grão, utilizando uma função que calcula a distância entre a partícula e o grão mais próximo. Em nosso trabalho, adotamos uma abordagem semelhante, embora mais rudimentar: para cada ponto da rede onde há partículas, verificamos os seus 8 primeiros vizinhos. Se houver um contorno de grão em um desses pontos, a partícula é capturada. Isso reflete a consideração de que os contornos

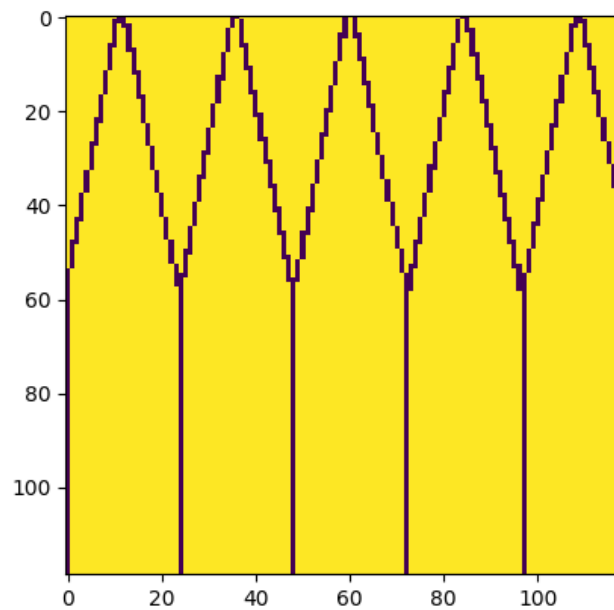
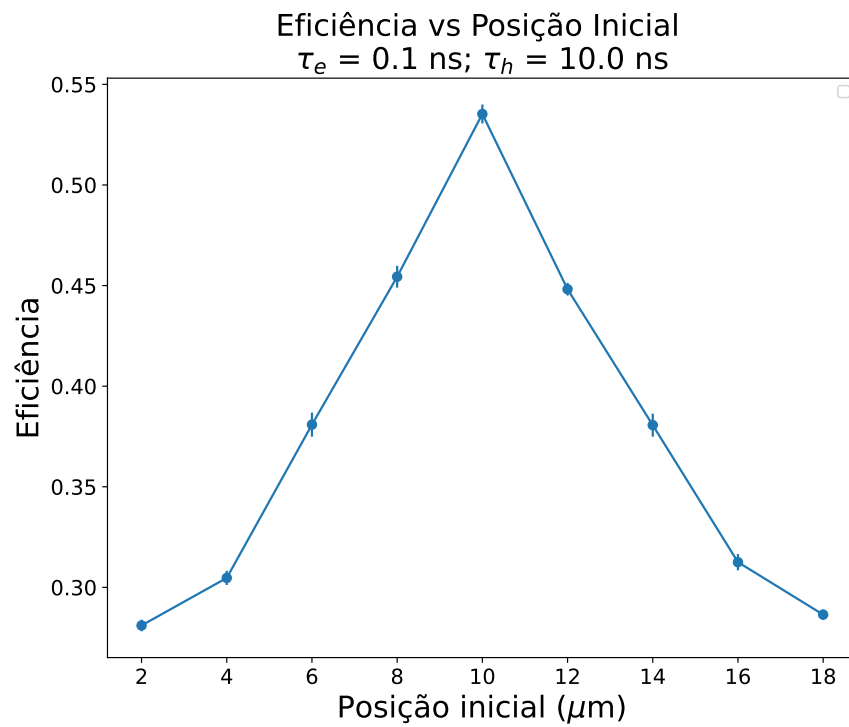


Figura 3.14 – (Superior) Eficiência em função da posição inicial de MIPs incidindo com ângulo normal ao detector. (Inferior) Contornos de grão de $20 \mu\text{m}$ discretizados na rede.

não são objetos perfeitos, de modo que nas suas proximidades há mais defeitos do que no centro do grão.

Com o objetivo de explorar a influência de cada tipo de defeito na eficiência do detector, realizou-se uma comparação da carga induzida considerando cada tipo de defeito

separadamente e comparamos com o diamante monocristalino. Conforme apresentado na Figura 3.15, é possível observar como esses defeitos afetam a coleta de carga. O tamanho lateral do grão utilizado é de $30\ \mu\text{m}$ para todas as curvas, com exceção da pontilhada roxa, em que o tamanho de grão é de $90\ \mu\text{m}$, como indicado na legenda entre parênteses. O diamante monocristalino possui a melhor performance, como esperado, e o diamante policristalino de crescimento colunar (HOD) apresenta a melhor alternativa para a coleta de carga. No diamante HOD em que há apenas defeitos de contornos de grão, vemos que quanto maior o tamanho lateral do grão, mais próximo ele se aproxima do diamante monocristalino. Os defeitos internos são significativos e contribuem para a redução da eficiência. Para fins de comparação, simulamos o diamante monocristalino irradiado até o tempo de vida dos portadores ser igual ao utilizado para o diamante policristalino com defeitos internos. Vemos que a sua performance fica entre o HOD sem defeitos e o HOD com defeitos. Assim, podemos concluir que quanto menos defeitos internos (e também mais pureza) e maior o tamanho do grão, mais a curva se aproxima do comportamento do diamante monocristalino (SC) sem defeitos.

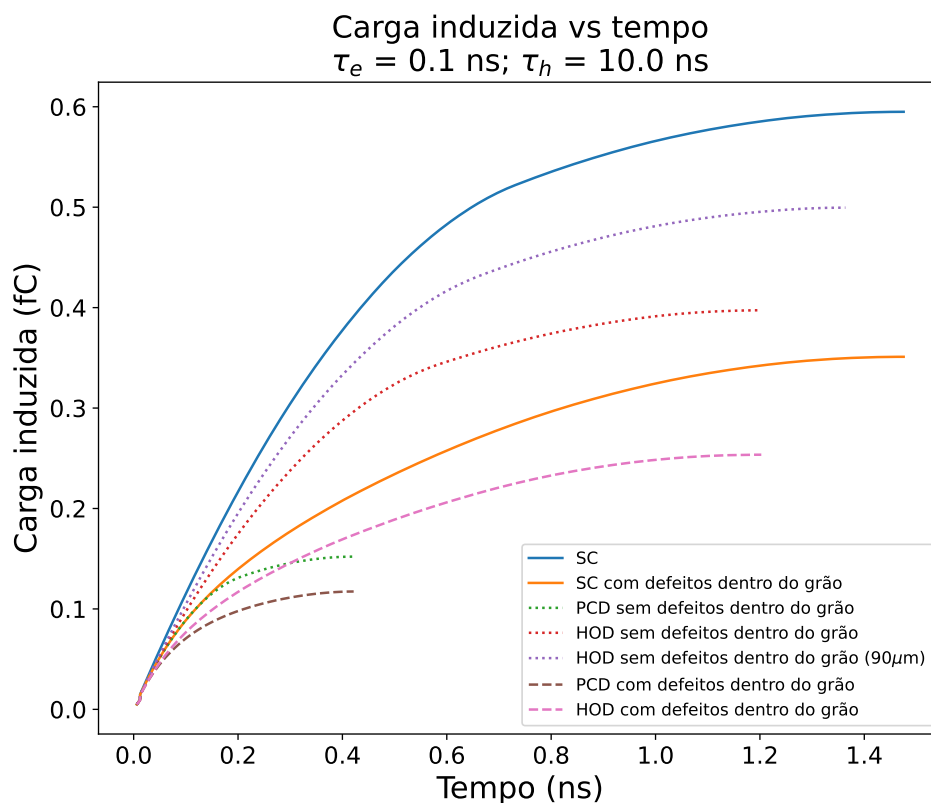


Figura 3.15 – Comparação da carga induzida em MIPs para todos os tipos de diamantes e defeitos. O tamanho lateral do grão do diamante policristalino de todas as curvas é de $30\ \mu\text{m}$, com exceção da curva pontilhada roxa, que possui um tamanho lateral do grão de $90\ \mu\text{m}$.

Neste capítulo, explicitamos a simulação computacional desenvolvida para calcular

a corrente induzida em detectores planares de diamante policristalinos. Na [seção 3.2](#) mostramos o processo de geração de carga utilizando o `Geant4`, e um método simplificado para MIPs. Na [seção 3.3](#) descrevemos o transporte de carga no detector e os modelos utilizados para adicionar os efeitos de contornos de grão e os defeitos internos do grão. Assim, no capítulo seguinte mostraremos os resultados de casos específicos fazendo uso dessa simulação.

4 Resultados e discussão

Neste capítulo, apresentaremos os resultados obtidos por meio da simulação detalhada no capítulo anterior. Inicialmente, abordaremos a influência da temperatura pela liberação de cargas capturadas na indução de carga. Em seguida, examinaremos o efeito dos contornos de grãos, estimando seu impacto na eficiência do detector. Por último, analisaremos o desempenho do detector em situações específicas no regime de alta energia que são de interesse: MIPs, prótons de 7 TeV e íons de alta energia.

4.1 Impacto da emissão térmica de cargas capturadas

A liberação de partículas presas em armadilhas ocorre, principalmente, por efeitos térmicos. Conforme indicado pela [Equação 2.33](#), quanto maior a temperatura do sólido, maior a probabilidade de emissão. A [Figura 4.1](#) apresenta uma simulação da carga induzida em função do tempo para MIPs em um diamante monocristalino em diversas temperaturas. Observa-se que até temperaturas de pelo menos 500 K, a emissão tem pouco impacto no sinal gerado. No entanto, à medida que a temperatura aumenta, podem-se identificar dois comportamentos na carga induzida: o primeiro, mais rápido, devido à deriva das cargas livres; e o segundo, mais lento, resultante das cargas liberadas por excitação térmica.

Embora a liberação de cargas ocorra com maior frequência, aumentando a eficiência do sensor, esse aumento na temperatura também amplia o tamanho do pulso, diminuindo a resolução. Dado que a emissão de cargas é relevante para o sinal apenas em temperaturas mais extremas, e considerando que os detectores de diamante geralmente operam de maneira estável em temperatura ambiente ([ANTCHEV et al., 2017](#)), é possível desprezar esse efeito nas futuras simulações, já que isso gera grande ganho de tempo computacional.

4.2 Eficiência e tamanho lateral do grão

O tamanho lateral dos grãos no diamante policristalino está relacionado com a quantidade de contornos de grãos e, portanto, com a eficiência dos detectores fabricados com esse material. Devido à heterogeneidade dos defeitos, cada posição inicial e ângulo de incidência da partícula resulta em uma eficiência diferente. Com o objetivo de abranger uma variedade de casos, para cada partícula incidente, foram sorteadas a sua posição inicial no detector e o seu ângulo de incidência, variando entre -5° e 5° e calculando, em seguida, a média de 100 eventos. Esse intervalo angular foi escolhido para tentar considerar diversos tipos de partículas incidentes, mas não a ponto de enviesar os dados, pois ângulos muito grandes gerariam uma divisão na coleta de cargas (elétrons muito próximos do

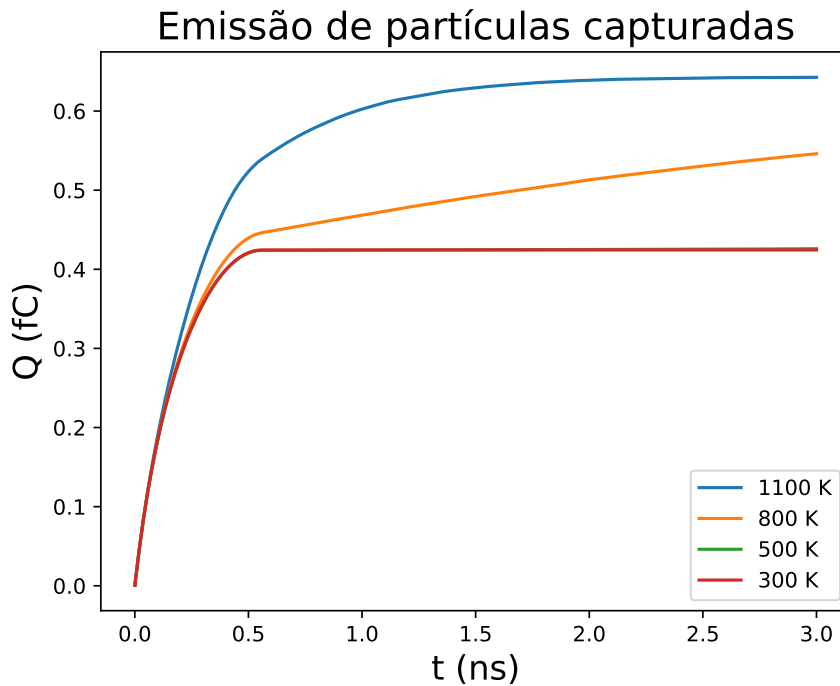


Figura 4.1 – Carga induzida em função do tempo com efeito de liberação de cargas capturadas por armadilhas. Os efeitos da temperatura só influenciam no sinal a partir de 800 K, em que vemos um sinal mais longo e com uma componente mais lenta devido à indução de corrente das cargas liberadas.

eletrodos) que aumentaria artificialmente a eficiência. Nas simulações, adotou-se uma diferença de potencial de 100 V, uma espessura de 100 μm , uma largura de 500 μm , e partículas MIP, seguindo os mesmos parâmetros utilizados por (MILAZZO; MAINWOOD, 2004) para fins de comparação. Nas próximas subseções, discutiremos os resultados para cada tipo de diamante policristalino.

Nos grãos do tipo PCD, nos quais não há uma orientação preferencial de crescimento, o modelo simplificado, no qual cada grão é considerado um quadrado, implica em um aumento linear da eficiência com o tamanho lateral do grão, conforme ilustrado na Figura 4.2. Os valores obtidos nesse modelo assemelham-se aos encontrados por (MILAZZO; MAINWOOD, 2004). Tais imperfeições no diamante podem surgir em casos nos quais há algum problema na temperatura ou pressão durante o método de CVD. Portanto, esse comportamento linear pode ocorrer em diamantes cujo processo de crescimento apresentou falhas na sintetização do diamante. O diamante com crescimento colunar tipo HOD, em contraste com o caso PCD, não exhibe um aumento linear da eficiência conforme cresce o tamanho lateral do grão. Pelo contrário, observa-se um crescimento que tende para uma saturação, conforme indicado na Figura 4.3. Isso ocorre à medida que o tamanho lateral do grão aumenta e a quantidade de contornos de grão diminui, fazendo com que os defeitos dominantes no transporte sejam os internos do grão. No caso do grão tipo cone, além do

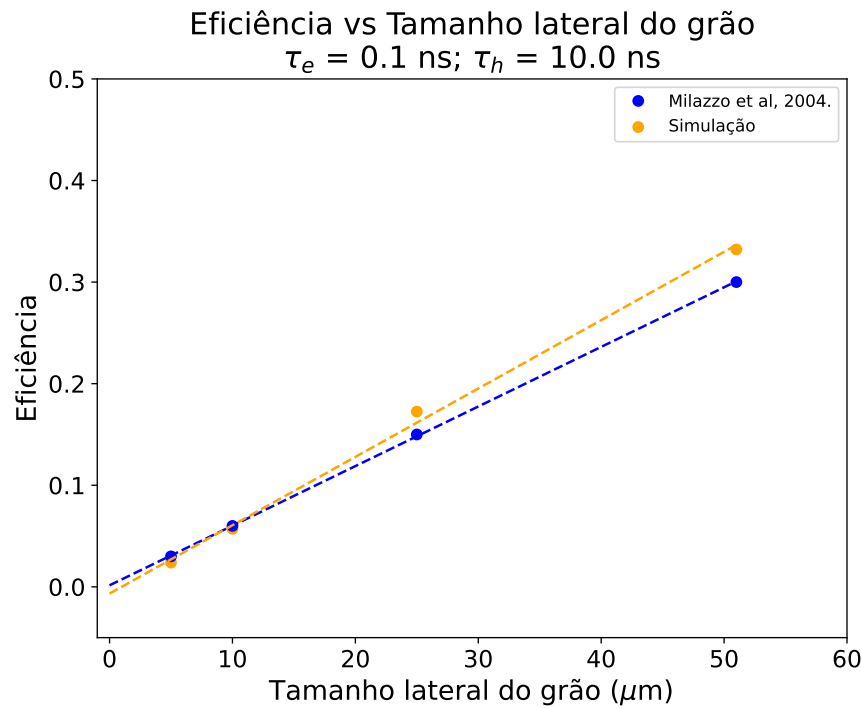


Figura 4.2 – Eficiência de um diamante policristalino do tipo PCD em função do tamanho lateral do grão comparada com a simulação de (MILAZZO; MAINWOOD, 2004).

tamanho lateral do grão, há uma região de crescimento linear. Devido à falta de indicação sobre a altura em que o crescimento do grão começa a saturar, foram realizadas simulações com alturas de saturação variando de $50 \mu\text{m}$ a $100 \mu\text{m}$.

Os resultados obtidos diferem dos encontrados por (MILAZZO; MAINWOOD, 2004), tanto nos valores quanto na forma. No entanto, é importante destacar que o caso do diamante HOD envolve diversas variáveis não explícitas no trabalho que impede a reprodução completa da simulação, como o modelo de crescimento do grão, a altura do grão e as condições das partículas incidentes (ângulo de incidência e posição). Esses fatores são relevantes pois alteram a geometria dos defeitos no espaço e a distribuição de cargas, podendo contribuir para a divergência nos resultados.

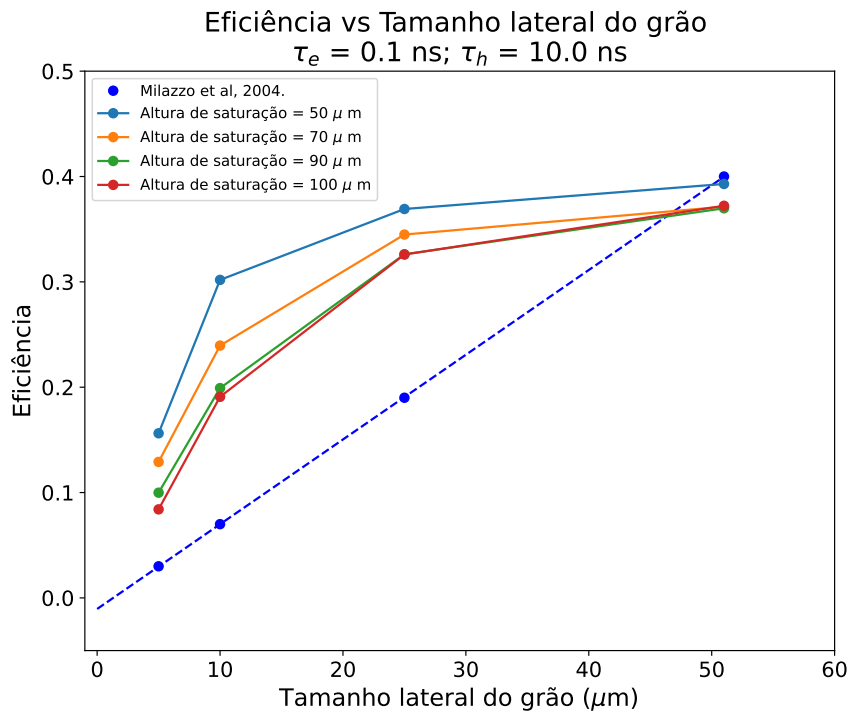


Figura 4.3 – Eficiência de um diamante policristalino do tipo HOD em função do tamanho lateral do grão comparada com a simulação de (MILAZZO; MAINWOOD, 2004).

4.3 Sinal gerado pelo detector em casos particulares

Utilizaremos a integração com o **Geant4** para estudar a resposta do detector de diamante monocristalino e policristalino quando partículas de condições não ideais incidem sobre o sensor. De início, faremos um teste com prótons no regime de MIP pelo **Geant4**, mas também estudaremos o regime da escala TeV, que é de interesse para o uso no CERN. Por fim, exploraremos o diamante para detecção de partículas alfa. Em todos os casos, utilizamos grãos com uma altura de saturação de 50 μm .

4.3.1 Partículas Minimamente Ionizantes

Para o estudo de MIPs, utilizamos uma distribuição de carga obtida pelo **Geant4** de prótons de 3 GeV em um detector de 100 μm de espessura sob uma diferença de potencial de 100 V. Como forma de comparação, fizemos a mesma simulação utilizando o modelo de geração de MIP explicitado na subseção 3.2.1.

Podemos observar na Figura 4.4, o gráfico de carga induzida pelo método simplificado (superior) e pelo **Geant4** (inferior) são bastante semelhantes, o que indica, mais uma vez, a consistência entre os dois métodos. Ainda assim, a distribuição do **Geant4** é a mais precisa e leva em conta mais fatores de flutuação que o modelo simplificado,

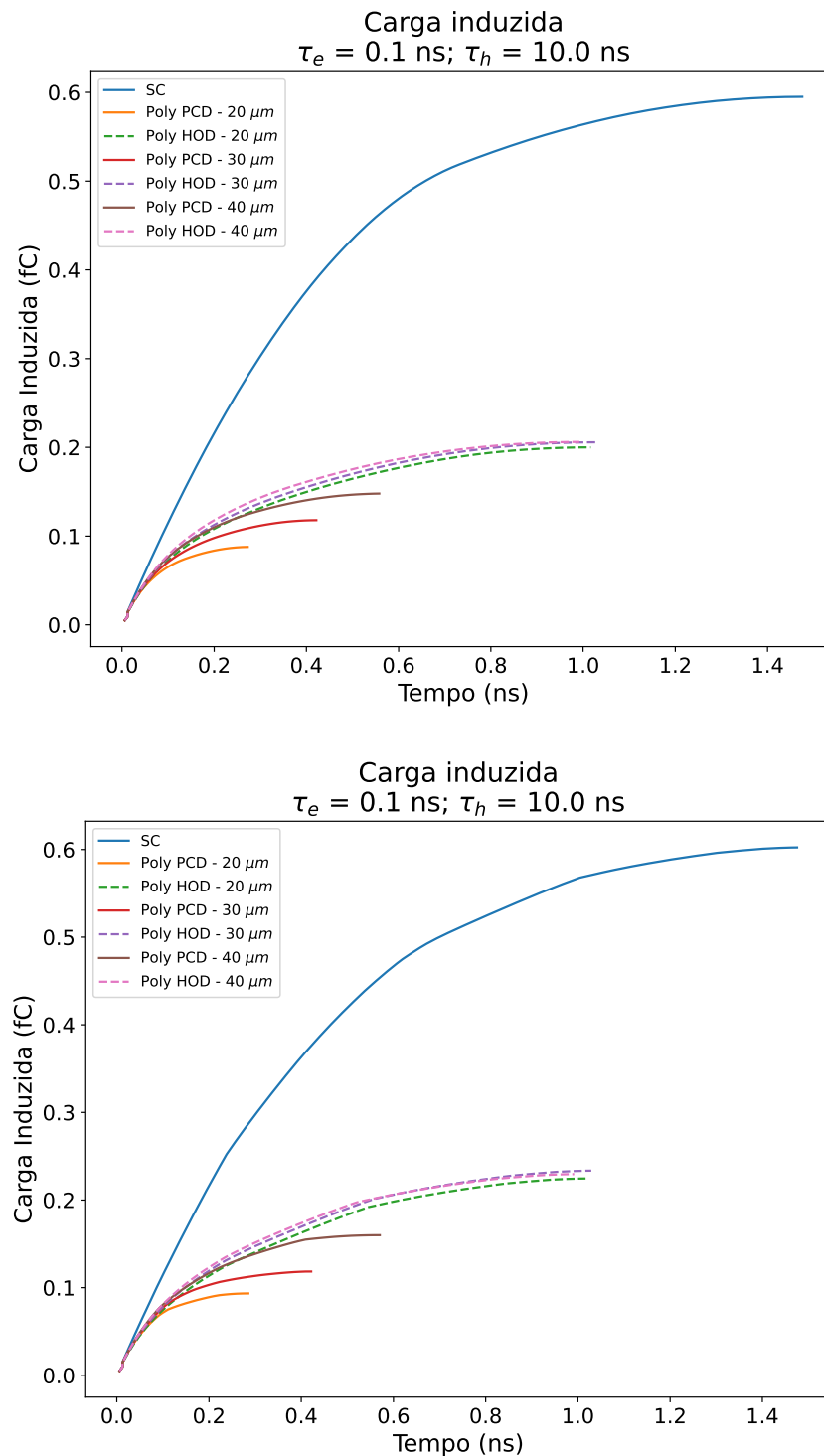


Figura 4.4 – (Superior) Carga induzida em função do tempo para uma partícula MIP pelo método simplificado. (Inferior) Carga induzida em função do tempo para um próton de 3 GeV no Geant4.

como espalhamento múltiplo e etc. Como esperado, a eficiência dos detectores de diamante policristalino é bem baixa quando comparada com o monocristalino (média entre 13% a 40%), com o modelo PCD sendo o pior em termos de eficiência.

4.3.2 Partículas alfa

No que tange à detecção de íons, o diamante se destaca como uma alternativa promissora ao silício, principalmente devido à sua resistência à radiação, pois íons danificam bastante o material. Embora não seja ideal para situações que exigem alta resolução, como na determinação precisa da energia do íon, o diamante pode ser empregado como um contador de partículas, aproveitando a vantagem de gerar uma corrente muito maior em relação ao ruído. Em particular, partículas alfa com energias em torno de 5,8 MeV possuem um alcance de aproximadamente 15 μm . Esse fator representa uma vantagem significativa em comparação aos prótons de alta energia, pois conhecendo o alcance da partícula é possível minimizar a espessura do detector para aumentar a sua eficiência. Para investigar a resposta do detector nesse cenário, empregamos um diamante policristalino com tamanho lateral de grão de 10 μm , espessura de 30 μm e diferença de potencial de 100 V, reproduzindo as condições do experimento conduzido por (SOUW; MEILUNAS, 1997). Na Figura 4.5, são apresentadas as cargas induzidas de elétrons e lacunas para os dois tipos de diamante policristalino (PCD e HOD), juntamente com o monocristalino.

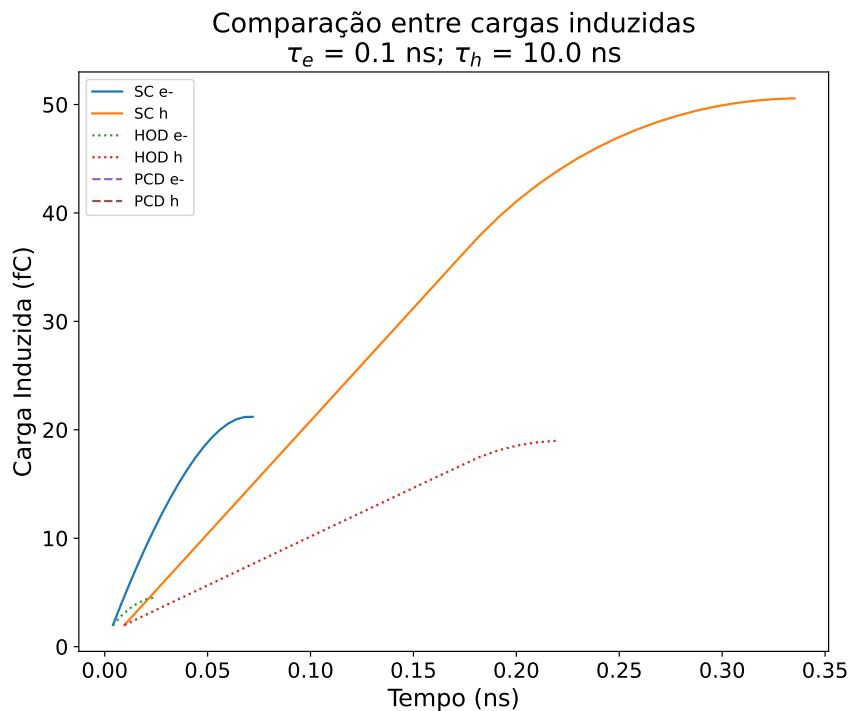


Figura 4.5 – Simulação da carga induzida para o diamante monocristalino e policristalino com uma partícula alfa de 5,8 MeV. A espessura do detector é de 30 μm e a diferença de potencial é de 100 V.

O diamante do tipo PCD tem a pior performance, com eficiência de apenas 0,5%, nem mesmo aparecendo na figura devido à rápida captura das cargas geradas. A geometria dos grãos, que inclui contornos na direção normal à trajetória das cargas, e sua concentração em uma região do espaço favorecem a rápida captura por um contorno de grão. Por outro

lado, o diamante do tipo HOD apresenta uma resposta superior, e a indução de carga é predominantemente causada pelas lacunas devido à polarização do campo junto com a proximidade dos elétrons do eletrodo, fazendo com que a diferença de potencial de *weighting* seja menor. A eficiência na coleta de carga alcançada nesse caso foi de aproximadamente 33%. Este resultado é bastante consistente com os dados experimentais, onde a distância de coleta de carga foi de 10 μm em 30 μm , representando uma eficiência de 33,3% e indicando que a eficiência do detector está limitada ao tamanho lateral do grão. Outros experimentos foram realizados com geometrias e espessuras diferentes (WANG et al., 2005), obtendo eficiências de 42,9% e 37,4%, respectivamente, o que não difere muito dos resultados da simulação, especialmente para a geometria tipo sanduíche, que é semelhante à nossa configuração simulada.

A aplicação do diamante para uso em íons pesados é bastante estudada devido à rápida coleta de carga e resistência a radiação, pois é de se esperar que íons pesados danifiquem muito mais o material. A limitação na eficiência da coleta de carga do diamante é balanceada pela grande ionização dos íons, fazendo com que seja um material bastante apropriado para contagem de grandes fluxos de íons (BERDERMANN et al., 1999). Experimentos com íons de Chumbo e Urânio mostraram uma capacidade de contagem superior a 10^8 íons/s (BERDERMANN et al., 2001). Podemos ver isso quando analisamos a amplitude de corrente induzida da partícula alfa, como mostra a Figura 4.6. Embora os elétrons sejam rapidamente capturados pelo eletrodo, no instante em que se inicia o sinal, há uma corrente da ordem de 10^{-4} A (sem levar em consideração a amplificação do sinal), muito maior que o ruído intrínseco do material. Em íons mais pesados, mais carga é depositada e maior ainda é a amplitude inicial da corrente.

4.4 Prótons a 7 TeV

A irradiação de prótons de alta energia na escala de TeV é relevante para aplicações no CERN que testam o Modelo Padrão das Partículas Elementares e buscam por indício de nova física. Uma das motivações deste trabalho é avaliar o uso de detectores de diamante na operação a alta energia do LHC. Existe particular interesse em avaliar o uso destes detectores no experimento CMS dado que esse detector possui propósito geral para medir diversos mecanismos de produção e testar a validade de propostas do Modelo Padrão e de suas extensões (BAYATIAN et al., 2007; RESSEGOTTI, 2019). Assim, buscou-se estimar a eficiência do detector de diamante policristalino em condições análogas ao do PPS.

Os diamantes monocristalinos utilizados como sensores de tempo de voo no PPS possuem uma espessura de 500 μm e operam sob uma diferença de potencial em torno de 800 V (ANTCHEV et al., 2017). Surge, então, a questão se seria possível utilizar diamantes policristalinos, que são mais econômicos e menos eficientes. Para explorar essa

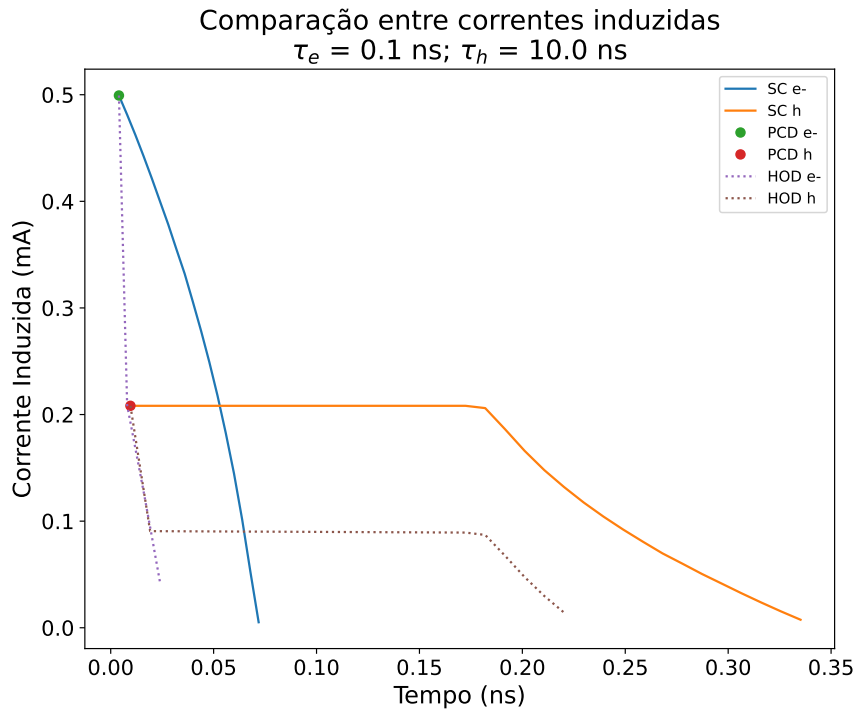


Figura 4.6 – Simulação da corrente induzida para o diamante monocristalino e policristalino com uma partícula alfa de 5,8 MeV. A espessura do detector é de $30 \mu\text{m}$ e a diferença de potencial é de 100 V.

possibilidade, realizamos simulações da carga induzida por um próton de 7 TeV, utilizando os parâmetros mencionados, com resultados apresentados na Figura 4.7. Na simulação, utilizamos uma altura de saturação do grão de $50 \mu\text{m}$ e diferentes tamanhos laterais de grão (entre $20 \mu\text{m}$ e $40 \mu\text{m}$), representados na legenda do gráfico. Observa-se que a eficiência para o tipo PCD diminui drasticamente (até 5% em média), o que pode ser atribuído, em parte, ao fato de que agora não há uma perda de energia aproximadamente constante ao longo do material, o que facilita a captura de um número maior de cargas por defeitos de contorno de grão. A eficiência do tipo HOD é pior do que o caso de MIP: aproximadamente de 30% em média.

A não linearidade na distribuição de carga é corroborada pela análise da corrente induzida na Figura 4.8. Se a distribuição de cargas fosse constante, esperaríamos uma queda aproximadamente linear na corrente do diamante monocristalino. Observamos também no diamante PCD que o pulso acaba muito rapidamente, indicando uma recombinação rápida de cargas devido aos contornos de grão. O diamante HOD possui uma corrente menor que o monocristalino, mas com tempo de pulso bastante semelhante. Isso mostra que, neste caso, a influência dos contornos de grão não é tao intensa como no PCD. Do ponto de vista de detecção, vemos que as correntes são da ordem de μA , muito superior ao ruído intrínseco do diamante, que é da ordem de pA.

Embora a detecção seja possível, a eficiência extremamente baixa do diamante PCD sugere que a sintetização do material deve ser muito controlada para diminuir ao máximo as falhas durante o processo de crescimento. Ainda assim, considerando que o objetivo principal do uso do diamante é a sua resistência a radiação no regime de alta luminosidade, a eficiência do diamante HOD é também muito baixa quando leva-se em conta que ela diminuirá ao longo do seu tempo de uso. Ao compararmos com diamante monocristalino, que possui uma eficiência inicial de aproximadamente 100%, concluímos que não se justifica substituir um material com uma coleta de carga muito menor e que terá menor durabilidade. Portanto, os resultados mostram que o diamante policristalino não é uma boa alternativa ao monocristalino para uso em condições análogas ao do PPS considerando a configuração padrão de campo elétrico constante em detector planar. Alterações para campos elétricos não-uniformes e outras geometrias poderiam trazer alternativas para incrementar a eficiência de coleta de carga.

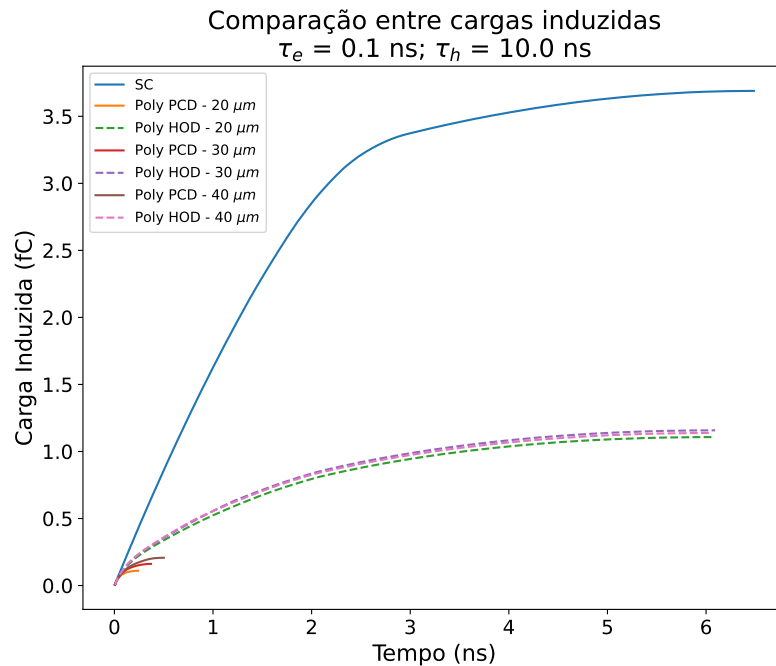


Figura 4.7 – Simulação da carga induzida para diamantes monocristalino e policristalino com um próton de 7 TeV. A espessura do detector é de $500 \mu\text{m}$ e a diferença de potencial é de 800 V.

Como já mencionado anteriormente, embora o objeto de estudo seja o diamante, a simulação não é restrita a ele, sendo possível avaliar o sinal para qualquer material ionizante, desde que as características do mesmo sejam bem conhecidas. O carbeto de silício (SiC) é um material também bastante resistente a radiação, sendo bastante estudado para uso em ambientes de alta fluência e temperatura. Dentre os diversos tipos de SiC, o 4H-SiC é o mais utilizado para esse fim devido à sua maior banda proibida de energia, que faz com que o material tenha uma menor corrente de fuga a temperatura ambiente que o silício,

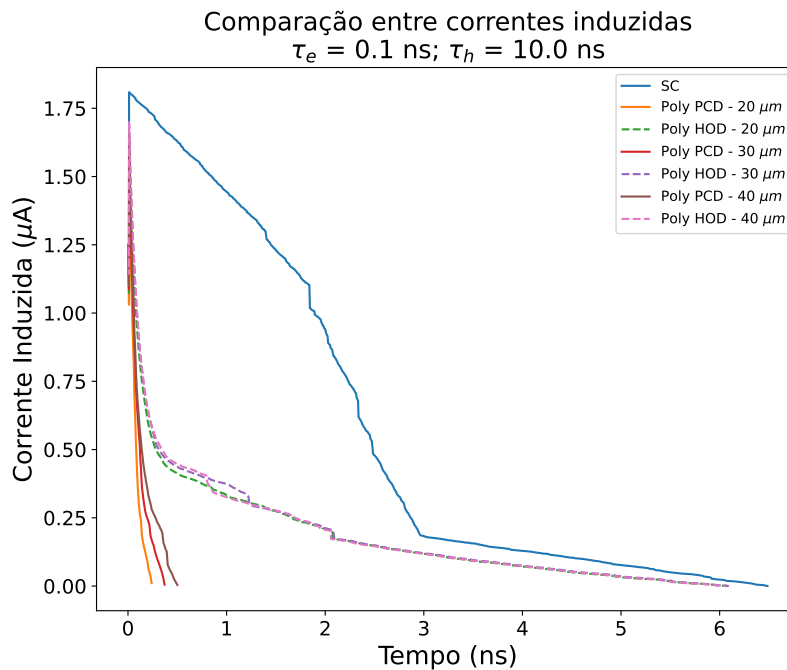


Figura 4.8 – Simulação da corrente induzida para diamantes monocristalino e policristalino com um próton de 7 TeV. A espessura do detector é de $500 \mu\text{m}$ e a diferença de potencial é de 800 V.

junto de uma maior mobilidade dos portadores (NAPOLI, 2022). Os detectores de carbeto de silício mais comuns são os diodos Schottky, utilizados principalmente para detecção de prótons, partículas alfa e íons pesados com uma eficiência na coleta de carga próxima de 100% (LIU et al., 2017). A Figura 4.9 mostra a carga induzida de uma simulação de um detector planar de SiC e diamante monocristalino para prótons de 7 TeV. Neste caso, embora a carga induzida seja maior devido à menor banda proibida de energia, o tempo do pulso do SiC é muito maior, diminuindo a sua resolução, o que inviabilizaria o uso em alta luminosidade. Em particular, como o PPS estuda empregar detectores rápidos de prótons, na escala de dezenas de picossegundo, o SiC acabaria resultando numa resolução temporal muito baixa e difícil rejeição do ruído, inviabilizando medidas no regime de alta luminosidade.

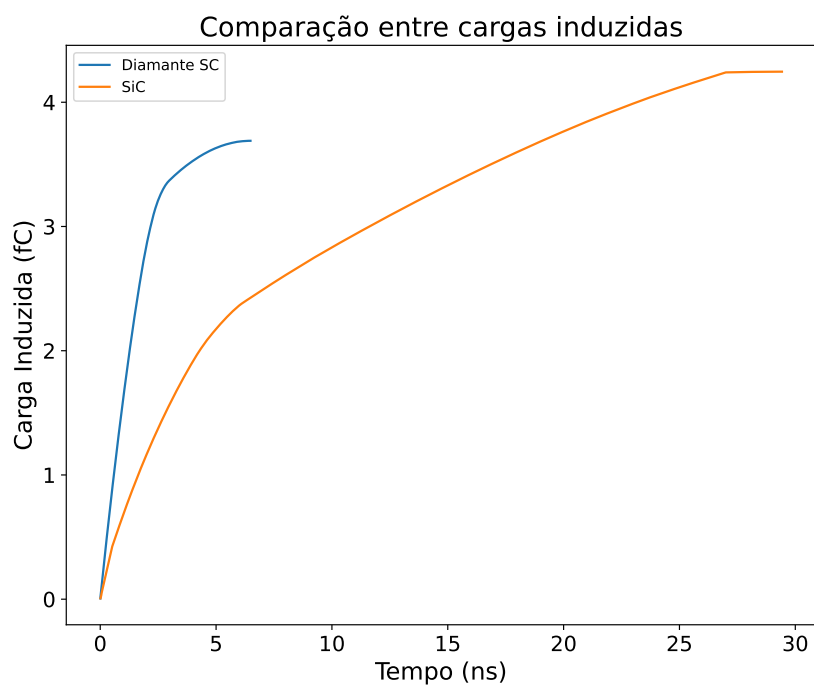


Figura 4.9 – Simulação da carga induzida para o diamante monocristalino e o carbeto de silício com um próton de 7 TeV. A espessura do detector é de $500 \mu\text{m}$ e a diferença de potencial é de 800 V. Embora o SiC tenha mais carga gerada, o tempo do pulso é consideravelmente maior.

5 Conclusões e perspectivas

Neste trabalho foi desenvolvida uma simulação computacional de detectores planares de diamante policristalino, explorando a viabilidade desse material como uma alternativa aos detectores de diamante monocristalino, especialmente considerando a capacidade de produção local desse material. Analisamos o desempenho do diamante policristalino em comparação com o diamante monocristalino em cenários específicos de interesse, como a interação com prótons de alta energia e partículas alfa de 5,8 MeV.

A eficiência do diamante policristalino PCD mostra um crescimento linear proporcional ao tamanho lateral dos grãos. Por outro lado, para o diamante HOD, cuja geometria de crescimento é colunar, a eficiência tende a saturar à medida que o tamanho lateral do grão aumenta uma vez que os defeitos internos do grão predominam no transporte de carga. Em situações de incidência de MIPs, os diamantes policristalinos apresentam eficiência na faixa de 13% a 40%, sendo a geometria PCD a menos eficaz. Em cenários semelhantes ao do PPS, com prótons de 7 TeV e diamantes de considerável espessura (500 μm), a eficiência atinge, no máximo, aproximadamente 30%. Isso sugere que, nessas configurações, esse tipo de diamante não pode ser considerado uma alternativa viável ao monocristalino. Entretanto, em casos envolvendo íons, como partículas alfa, cujo alcance de penetração é bem conhecido, é possível ajustar a espessura do material para maximizar a eficiência. Com partículas alfa de 5,8 MeV e uma espessura de 30 μm , a eficiência atinge 33% para o diamante HOD, semelhante a resultados experimentais nas mesmas condições. Por outro lado, o diamante PCD apresenta uma eficiência próxima de zero nessas condições, indicando que não é adequado para tais situações.

A baixa eficiência de coleta de carga do diamante policristalino sugere que esse material é adequado para uso como contador de partículas, mas não para realizar medidas de natureza espectroscópica. É importante ressaltar que a simulação se baseia em modelos simplificados de grãos, uma vez que, na prática, os grãos variam em tamanho e não apresentam uma perfeita forma colunar. Uma perspectiva interessante para futuras investigações é o desenvolvimento de um gerador de crescimento de grãos de forma probabilística e o aprimoramento da geometria da simulação para três dimensões, que reproduziria de maneira mais fiel a complexidade do problema. Isso permitiria uma análise mais precisa, evidenciando ainda mais a redução na eficiência dos detectores construídos com esse material. A simulação se concentrou em detectores planares, dada a sua predominância e a disponibilidade de resultados comparativos na literatura. No entanto, outras geometrias podem ser mais eficazes para determinados tipos de partículas e energias, como os detectores 3D. Outra perspectiva de aprimoramento para a simulação é implementar outras geometrias para que seja possível investigar formas de aumentar a eficiência dos detectores.

Referências

- AGOSTINELLI, S. et al. Geant4—a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 506, n. 3, p. 250–303, 2003. ISSN 0168-9002. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688>. Citado na página 32.
- AHMED, S. N. 5 - solid-state detectors. In: AHMED, S. N. (Ed.). *Physics and Engineering of Radiation Detection (Second Edition)*. Second edition. Elsevier, 2015. p. 259–329. ISBN 978-0-12-801363-2. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B978012801363200005X>. Citado na página 20.
- ALBROW, M. et al. CMS-TOTEM Precision Proton Spectrometer. 9 2014. Disponível em: <https://cds.cern.ch/record/1753795>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 17.
- ALBROW, M. et al. Scope and implementation plan of the CT-PPS baseline program. 12 2014. CERN-LHCC-2014-026. Disponível em: <https://cds.cern.ch/record/1973331>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 17.
- ALLISON, J. et al. Geant4 developments and applications. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, v. 53, n. 1, p. 270–278, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/TNS.2006.869826>. Citado na página 32.
- ALLISON, J. et al. Recent developments in geant4. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 835, p. 186–225, 2016. ISSN 0168-9002. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900216306957>. Citado na página 32.
- ANDERLINI, L. et al. A 4d diamond detector for hl-lhc and beyond. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 1040, p. 167230, 2022. ISSN 0168-9002. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900222005848>. Citado na página 17.
- ANDERSEN, H.; ZIEGLER, J. *Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements*. Pergamon Press, 1977. (Stopping and ranges of ions in matter). ISBN 9780080216058. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=nCNRAAAAMAAJ>. Citado na página 8.
- ANTCHEV, G. et al. Diamond detectors for the totem timing upgrade. *Journal of Instrumentation*, v. 12, 01 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/1748-0221/12/03/P03007>. Citado 2 vezes nas páginas 47 e 53.
- APOLLINARI, G. et al. High-Luminosity Large Hadron Collider (HL-LHC) : Preliminary Design Report. 12 2015. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.23731/CYRM-2020-0010>. Citado na página 17.

- BÄNI, L. et al. A study of the radiation tolerance of poly-crystalline and single-crystalline cvd diamond to 800 mev and 24 gev protons. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 52, n. 46, p. 465103, aug 2019. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1088/1361-6463/ab37c6>. Citado 3 vezes nas páginas 16, 27 e 40.
- BARONE, V.; PREDAZZI, E. *High-Energy Particle Diffraction*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2002. v.565. (Texts and Monographs in Physics, v.565). ISBN 978-3-540-42107-8. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-662-04724-8>. Citado na página 1.
- BAYATIAN, G. L. et al. CMS technical design report, volume II: Physics performance. *J. Phys. G*, v. 34, n. 6, p. 995–1579, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/0954-3899/34/6/S01>. Citado na página 53.
- BEHNKE, T. et al. The charge collection properties of cvd diamond. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 414, n. 2, p. 340–356, 1998. ISSN 0168-9002. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900298006962>. Citado na página 34.
- BERDERMANN, E. et al. First applications of cvd-diamond detectors in heavy-ion experiments. *Nuclear Physics B - Proceedings Supplements*, v. 78, n. 1, p. 533–539, 1999. ISSN 0920-5632. Advanced Technology and Particle Physics. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092056329900599X>. Citado na página 53.
- BERDERMANN, E. et al. The use of cvd-diamond for heavy-ion detection. *Diamond and Related Materials*, v. 10, n. 9, p. 1770–1777, 2001. ISSN 0925-9635. Proceedings of the 7th International Conference on New Diamond Science and Technology(ICNDST-7). Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925963501004435>. Citado na página 53.
- BERGER, M.; COURSEY, J.; ZUCKER, M. *ESTAR, PSTAR, and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions (version 1.21)*. [S.l.]: <http://physics.nist.gov/Star>, 1999. Citado na página 33.
- BOSSINI, E. The cms precision proton spectrometer timing system: performance in run 2, future upgrades and sensor radiation hardness studies. *Journal of Instrumentation*, IOP Publishing, v. 15, n. 05, p. C05054–C05054, maio 2020. ISSN 1748-0221. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1088/1748-0221/15/05/C05054>. Citado 3 vezes nas páginas 13, 3 e 17.
- BOSSINI, E. The CMS Precision Proton Spectrometer timing system: performance in Run 2, future upgrades and sensor radiation hardness studies. *JINST*, v. 15, n. 05, p. C05054, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/1748-0221/15/05/C05054>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 3.
- BOSSINI, E. The cms precision proton spectrometer: Precision timing with sccvd diamond crystals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 1047, p. 167823, 2023. ISSN 0168-9002. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900222011159>. Citado na página 20.

BOSSINI, E.; MINAFRA, N. Diamond detectors for timing measurements in high energy physics. *Frontiers in Physics*, v. 8, 2020. ISSN 2296-424X. Disponível em: <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphy.2020.00248>. Citado 3 vezes nas páginas 3, 18 e 30.

BRUZZI, M. et al. Deep levels and trapping mechanisms in chemical vapor deposited diamond. *Journal of Applied Physics*, v. 91, n. 9, p. 5765–5774, 04 2002. ISSN 0021-8979. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1461891>. Citado na página 20.

BULYAK, E.; SHUL'GA, N. *Landau distribution of ionization losses: history, importance, extensions*. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2209.06387>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 10.

BäNI, L. et al. Radiation tolerance of diamond detectors. *Journal of Physics: Conference Series*, IOP Publishing, v. 2374, n. 1, p. 012172, nov 2022. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/2374/1/012172>. Citado na página 4.

CAHN, R. N.; GOLDBERGER, G. *The experimental foundations of particle physics*. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2009. ISBN 9780521521475. Disponível em: <http://www.cambridge.org/uk/catalogue/catalogue.asp?isbn=9780521521475>. Citado na página 1.

CANALI, C.; NAVA, F.; REGGIANI, L. Drift velocity and diffusion coefficients from time-of-flight measurements. In: _____. *Hot-Electron Transport in Semiconductors*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1985. p. 87–112. ISBN 978-3-540-38849-4. Disponível em: https://doi.org/10.1007/3-540-13321-6_3. Citado na página 25.

CMS and TOTEM Collaborations. Proton reconstruction with the CMS-TOTEM Precision Proton Spectrometer. *JINST*, v. 18, n. 09, p. P09009, 2023. Submitted to the Journal of Instrumentation. All figures and tables can be found at <http://cms-results.web.cern.ch/cms-results/public-results/publications/PRO-21-001> (CMS Public Pages). Disponível em: <https://cds.cern.ch/record/2836521>. Citado na página 26.

CMS Collaboration. *Cutaway diagrams of CMS detector*. 2019. CMS-OUTREACH-2019-001; Este trabalho é licenciado sob "Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY-4.0) International License". Para ver uma cópia da licença, visite <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>. Acessado em 10/12/2023. Disponível em: https://cds.cern.ch/record/2665537/files/cms_160312_02.pdf. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 2.

DAINESE, A. et al. Report on the Physics at the HL-LHC, and Perspectives for the HE-LHC. *CERN Yellow Rep. Monogr.*, v. 7, p. 1–1418, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1902.10229>. Citado na página 3.

DEROS, M. *Estudo dos limites de detecção de Sensores Monolíticos de Pixeis Ativos para o regime de íons de 4 a 100 MeV e seu potencial para análise por feixe de íons*. Dissertação (Trabalho de conclusão de curso) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2022. Disponível em: <http://hdl.handle.net/10183/240337>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 13.

HAN, S.; WAGNER, R. S. Grain boundary effects on carrier transport in undoped polycrystalline chemical-vapor-deposited diamond. *Applied Physics Letters*, v. 68, n. 21, p. 3016–3018, 05 1996. ISSN 0003-6951. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.116682>. Citado na página 38.

- JOMARD, F.; BALLUTAUD, D. Sims analysis of hydrogen diffusion and trapping in cvd polycrystalline diamond. *Applied Surface Science*, v. 203-204, p. 478–481, 2003. ISSN 0169-4332. Secondary ion mass spectrometry SIMS XIII. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433202007456>. Citado na página 20.
- KITTEL, C. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2004. ISBN 9780471415268. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=kym4QgAACAAJ>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 12.
- KNOLL, G. *Radiation Detection and Measurement*. Wiley, 2010. ISBN 9780470131480. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=4vTJ7UDel5IC>. Citado na página 22.
- KOYBASI, O. et al. Design, simulation, fabrication, and preliminary tests of 3d cms pixel detectors for the super-lhc. *Nuclear Science, IEEE Transactions on*, v. 57, p. 2897 – 2905, 11 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/TNS.2010.2085448>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 4.
- KRAAN, A. Range verification methods in particle therapy: Underlying physics and monte carlo modeling. *Frontiers in oncology*, v. 5, p. 150, 07 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.3389/fonc.2015.00150>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 8.
- KUEHN, S. Silicon sensors for hl-lhc tracking detectors. In: *2012 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference Record (NSS/MIC)*. [s.n.], 2012. p. 1653–1656. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/NSSMIC.2012.6551392>. Citado na página 17.
- KUMAR, A.; TOPKAR, A. Alpha particle response study of polycrystalline diamond radiation detector. *AIP Conference Proceedings*, v. 1731, n. 1, p. 060001, 05 2016. ISSN 0094-243X. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.4947807>. Citado na página 34.
- LAGOMARSINO, S. et al. Radiation hardness of three-dimensional polycrystalline diamond detectors. *Applied Physics Letters*, v. 106, n. 19, p. 193509, 05 2015. ISSN 0003-6951. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.4921116>. Citado na página 4.
- LAN, L. et al. Priming effect on a polycrystalline cvd diamond detector under 60co gamma-rays irradiation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 672, p. 29–32, 2012. ISSN 0168-9002. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900211021954>. Citado na página 20.
- LEROY, C.; RANCOITA, P. *Principles of Radiation Interaction in Matter and Detection*. World Scientific, 2011. (G - Reference, Information and Interdisciplinary Subjects Series). ISBN 9789814360517. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=3xxqDQAAQBAJ>. Citado na página 27.
- LINDHARD, J.; SCHARFF, M. Energy dissipation by ions in the kev region. *Physical Review*, APS, v. 124, n. 1, p. 128, 1961. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.128>. Citado na página 8.
- LIU, L. et al. Properties of 4h silicon carbide detectors in the radiation detection of 86mev oxygen particles. *Diamond and Related Materials*, v. 73, p. 177–181, 2017. ISSN 0925-9635. 10th International Conference on New Diamond and Nano Carbons – NDNC 2016.

Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925963516302217>. Citado na página 56.

MAGER, M. Alpile, the monolithic active pixel sensor for the alice its upgrade. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 824, p. 434–438, 2016. ISSN 0168-9002. Frontier Detectors for Frontier Physics: Proceedings of the 13th Pisa Meeting on Advanced Detectors. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900215011122>. Citado na página 17.

MAZUREK, M.; CORTI, G.; MULLER, D. *New simulation software technologies at the LHCb Experiment at CERN*. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2112.04789>. Citado na página 32.

MILAZZO, L.; MAINWOOD, A. Computer simulation of the detection mechanism in diamond detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 514, n. 1, p. 87–92, 2003. ISSN 0168-9002. Proceedings of the 4th International Conference on Radiation Effects on Semiconductor Materials, Detectors and Devices. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203023763>. Citado na página 36.

MILAZZO, L.; MAINWOOD, A. Modeling of diamond radiation detectors. *Journal of Applied Physics*, v. 96, n. 10, p. 5845–5851, 11 2004. ISSN 0021-8979. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1804620>. Citado 6 vezes nas páginas 16, 37, 39, 48, 49 e 50.

NAPOLI, M. D. Sic detectors: A review on the use of silicon carbide as radiation detection material. *Frontiers in Physics*, v. 10, 2022. ISSN 2296-424X. Disponível em: <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphy.2022.898833>. Citado 3 vezes nas páginas 19, 18 e 56.

NETO, J. V. S. et al. Growth and characterization of polycrystalline cvd diamond films obtained by mwpacvd at high power 2,45ghz microwave discharge. *Materials Research*, ABM, ABC, ABPol, v. 25, p. e20220052, 2022. ISSN 1516-1439. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/1980-5373-MR-2022-0052>. Citado na página 40.

NIKJOO, H.; UEHARA, S.; EMFIETZOGLOU, D. Interaction of heavy charged particles with matter. In: _____. *Interaction of radiation with matter*. Taylor & Francis, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1201/b12109>. Citado na página 8.

OH, A. *Particle detection with CVD diamond*. Tese (Doutorado) — Universit@Hamburg, 1999. Disponível em: <http://lib.ugent.be/catalog/rug01:000508834>. Citado na página 42.

PERNEGGER, H. et al. Charge-carrier properties in synthetic single-crystal diamond measured with the transient-current technique. *Journal of Applied Physics*, v. 97, n. 7, p. 073704, 03 2005. ISSN 0021-8979. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1863417>. Citado na página 21.

PIPEK, J. Charge transport in semiconducting radiation detectors. In: . [s.n.], 2018. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:149865486>. Citado 3 vezes nas páginas 15, 16 e 26.

RAMO, S. Currents induced by electron motion. *Proceedings of the IRE*, v. 27, n. 9, p. 584–585, 1939. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/JRPROC.1939.228757>. Citado na página 22.

RESSEGOTTI, M. Overview of the CMS Detector Performance at LHC Run 2. *Universe*, v. 5, n. 1, p. 18, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/universe5010018>. Citado na página 53.

REZENDE, S. *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*. Editora Livraria da Física, 2004. ISBN 9788588325272. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=YN07KGEfrlYC>. Citado na página 12.

ROLANDI, L.; RIEGLER, W.; BLUM, W. Particle detection with drift chambers. In: . [s.n.], 1993. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:117878983>. Citado na página 23.

SAKUMA, T.; MCCAULEY, T. Detector and Event Visualization with SketchUp at the CMS Experiment. *J. Phys. Conf. Ser.*, v. 513, p. 022032, 2014. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/513/2/022032>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 2.

SCHWANDER, M.; PARTES, K. A review of diamond synthesis by cvd processes. *Diamond and Related Materials*, v. 20, n. 9, p. 1287–1301, 2011. ISSN 0925-9635. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925963511002913>. Citado 3 vezes nas páginas 14, 17 e 19.

SCOTT, J. Forging the jewels of the curriculum: Educational practice inspired by a thermodynamic model of threshold concepts. *Waikato Journal of Education*, v. 19, 01 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.15663/wje.v19i2.103>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 19.

SHIMAOKA S. KOIZUMI, J. H. T.; KANEKO. Recent progress in diamond radiation detectors. *Functional Diamond*, Taylor & Francis, v. 1, n. 1, p. 205–220, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/26941112.2021.2017758>. Citado 4 vezes nas páginas 15, 18, 20 e 22.

SHOCKLEY, W. Currents to Conductors Induced by a Moving Point Charge. *Journal of Applied Physics*, v. 9, n. 10, p. 635–636, 04 2004. ISSN 0021-8979. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1710367>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 22 e 72.

SILALE, A. et al. CMS ZDC Data Monitoring for Run 3. *Acta Phys. Polon. Supp.*, v. 16, n. 8, p. 8–A2, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.5506/APhysPolBSupp.16.8-A2>. Citado na página 1.

SOUW, E.-K.; MEILUNAS, R. Response of cvd diamond detectors to alpha radiation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 400, n. 1, p. 69–86, 1997. ISSN 0168-9002. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900297009637>. Citado na página 52.

SRIMANOBHAS, N. et al. *Full Simulation of CMS for Run-3 and Phase-2*. Geneva, 2023. Disponível em: <https://cds.cern.ch/record/2872289>. Citado na página 32.

TAN, Y. et al. Timing performance simulation for 3d 4h-sic detector. *Micromachines*, v. 13, n. 1, 2022. ISSN 2072-666X. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2072-666X/13/1/46>. Citado na página 17.

TRAJKOV, E. The study of defect and trapping levels in cvd polycrystalline diamond with applications to ultraviolet dosimetry. In: . [s.n.], 2004. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:137477024>. Citado 3 vezes nas páginas 14, 20 e 21.

WANG, L. et al. Cvd diamond alpha-particle detectors with different electrode geometry. *Optics express*, v. 13 21, p. 8612–7, 2005. Disponível em: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:24172653>. Citado na página 53.

WEISS, C. et al. Particle interactions with diamond detectors. *Proceedings of the 8th International Beam Instrumentation Conference*, JACoW Publishing, Geneva, Switzerland, IBIC2019, p. Sweden, 2019. Disponível em: <http://jacow.org/ibic2019/doi/JACoW-IBIC2019-MOPP016.html>. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 34.

ZHAO, S. et al. Electrical properties in cvd diamond films. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, Springer Science and Business Media LLC, v. 302, n. 257, 1993. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1557/PROC-302-257>. Citado na página 40.

ZIEGLER, J. F.; ZIEGLER, M.; BIRSACK, J. Srim – the stopping and range of ions in matter (2010). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, v. 268, n. 11, p. 1818–1823, 2010. ISSN 0168-583X. 19th International Conference on Ion Beam Analysis. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X10001862>. Citado na página 33.

ZYLA, P. et al. Review of Particle Physics. *PTEP*, v. 2020, n. 8, p. 083C01, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1093/ptep/ptaa104>. Citado 4 vezes nas páginas 13, 7, 9 e 10.

Apêndices

APÊNDICE A – Teorema de Shockley-Ramo

O Teorema de Shockley-Ramo é amplamente utilizado para determinar o pulso e a corrente induzida nos eletrodos de detectores, tendo como ponto forte a sua simplicidade, pois outra forma de calcular o sinal é através do método das imagens, contudo, envolve cálculos bem mais complexos. A maior dificuldade reside na solução da equação de Laplace para determinar o potencial *weighting* dada as condições de contorno do eletrodo. Para provar o teorema, é necessário utilizar o Teorema da Reciprocidade de Green, então iremos tratar disso primeiramente.

A.1 Teorema de Reciprocidade de Green

Suponha que temos uma distribuição de carga ρ e um potencial V , e outra distribuição $\bar{\rho}$ e um potencial \bar{V} , completamente distintos e independentes da anterior. O Teorema da Reciprocidade de Green diz que

$$\int_{\text{espaço}} \rho \bar{V} \, d\tau = \int_{\text{espaço}} \bar{\rho} V \, d\tau, \quad (\text{A.1})$$

onde $d\tau$ é o elemento infinitesimal volumétrico.

Para provar a afirmação acima, vamos considerar a seguinte integral

$$\int_{\text{espaço}} \vec{E} \cdot \vec{\bar{E}} \, d\tau, \quad (\text{A.2})$$

podemos escrever $\vec{E} = -\nabla V$ e fazendo uso da seguinte propriedade do cálculo vetorial

$$\nabla \cdot (f \vec{A}) = (\nabla \cdot \vec{A})f + \vec{A} \cdot \nabla f, \quad (\text{A.3})$$

identificamos que $\vec{A} \cdot \nabla f$ nada mais é que $\vec{E} \cdot \nabla V$. Colocando isso na [Equação A.2](#) temos

$$-\int_{\text{espaço}} \vec{E} \cdot \nabla V \, d\tau = -\int_{\text{espaço}} \nabla \cdot (V \vec{E}) \, d\tau + \int_{\text{espaço}} (\nabla \cdot \vec{E}) V \, d\tau. \quad (\text{A.4})$$

O primeiro termo da [Equação A.4](#) pode ser reescrito fazendo $\vec{E} = -\nabla \bar{V}$ e utilizando o teorema da divergência

$$-\int_{\text{espaço}} \nabla \cdot (V \vec{E}) \, d\tau = \oint_{\text{superfície}} (V \nabla \bar{V}) \cdot d\vec{A}. \quad (\text{A.5})$$

Considerando que as distribuições de carga são finitas, isso significa que no infinito $V \rightarrow 0$ e $\bar{V} \rightarrow 0$. Assim, se tomarmos a superfície como sendo uma esfera suficientemente grande, dado que as cargas possuem distribuição finita, a integral é nula pois os potenciais tendem a 0. Ficamos então com

$$\int_{\text{espaço}} \vec{E} \cdot \vec{\bar{E}} \, d\tau = \int_{\text{espaço}} (\nabla \cdot \vec{E}) V \, d\tau, \quad (\text{A.6})$$

que podemos reescrever fazendo uso da Lei de Gauss

$$\int_{\text{espaço}} \vec{E} \cdot \vec{E} \, d\tau = \frac{1}{\epsilon_0} \int_{\text{espaço}} \rho V \, d\tau. \quad (\text{A.7})$$

Se fizermos o mesmo cálculo reescrevendo o campo elétrico em função do gradiente do potencial para \vec{E} ao invés de \vec{E} , obteríamos o caso contrário

$$\int_{\text{espaço}} \vec{E} \cdot \vec{E} \, d\tau = \frac{1}{\epsilon_0} \int_{\text{espaço}} \rho \bar{V} \, d\tau. \quad (\text{A.8})$$

Portanto, provamos o Teorema de Reciprocidade de Green. O cálculo foi feito utilizando duas distribuições de cargas por fins de simplicidade, mas é claro que o teorema é extensível para um número maior de cargas e potenciais, basta adicionar mais termos na integral da [Equação A.2](#).

A.2 Dedução do teorema de Shockley-Ramo

Temos o seguinte problema: Seja uma carga pontual q com velocidade \vec{v} em um sistema de condutores estacionários aterrados, como ilustrado na [Figura A.1](#). A carga pontual é considerada como um condutor muito pequeno, e será identificado com o número 0, e os demais condutores de 1, ..., n . O condutor (também chamado de eletrodo no contexto de detectores) no qual queremos calcular a corrente induzida será o 1. Então, podemos

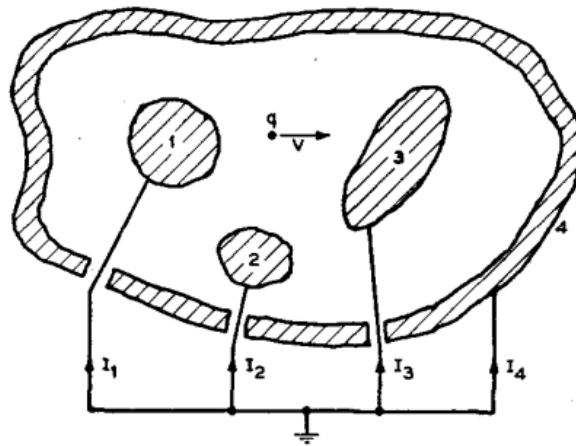


Figura A.1 – Ilustração do sistema de condutores aterrados e as correntes induzidas pela carga em movimento ([SHOCKLEY, 2004](#)).

considerar duas situações: Na primeira, todos os condutores são aterrados e o condutor 0 possui carga q ($Q_0 = q; V_1 = V_2 = V_3 = V_4 = 0$); na segunda, removemos a carga do condutor 0, e assumimos que o condutor 1 possui potencial unitário ($\bar{Q}_0 = 0; \bar{V}_0 = V_1(\vec{r}); \bar{V}_1 = 1, \bar{V}_2 = \bar{V}_3 = \bar{V}_4 = 0$). Essa escolha se dá porque queremos calcular a corrente induzida nesse eletrodo em específico.

Visto que estamos tratando de condutores, o potencial elétrico é constante, então pela [Equação A.1](#) e estendendo para N eletrodos:

$$\sum_i^N Q_i \bar{V}_i = \sum_i^N \bar{Q}_i V_i. \quad (\text{A.9})$$

Portanto, aplicando a equação acima, ficamos com:

$$Q_1 = -qV_1(\vec{r}). \quad (\text{A.10})$$

Finalmente, a corrente induzida é a derivada temporal da carga induzida:

$$I(t) = -\frac{dQ_1}{dt} = q \frac{dV_1(\vec{r}(t))}{dt} = q(\nabla V_1) \cdot \frac{d\vec{r}}{dt}. \quad (\text{A.11})$$

Finalmente,

$$I(t) = -q\vec{E}_1 \cdot \vec{v}, \quad (\text{A.12})$$

onde o campo \vec{E}_1 é o campo elétrico resultante do fato de que o eletrodo 1 é unitário e os outros são aterrados. Esse campo é chamado de campo de potencial (tradução livre de *weighting field*), e é característica da geometria do eletrodo, uma vez que é solução da equação de Laplace. Esse campo não é o responsável pela deriva das cargas, mas sim é um termo que acopla a geometria do detector com o movimento das cargas. Podemos notar que a derivação foi feita com argumentos puramente eletrostáticos, portanto efeitos retardados significativos podem invalidar o uso do teorema em determinadas situações. Concluimos que a corrente induzida no eletrodo não é gerada apenas quando a carga chega no mesmo, mas durante o seu movimento no detector.