



انجمن حافظ در برابر اشغال ایران

## مقاله پژوهشی

مجله سنجش و اینمنی پرتو، جلد ۹، شماره ۱، زمستان ۱۳۹۹، صفحه ۴۳-۵۴

تاریخ دریافت مقاله: ۱۳۹۹/۰۹/۰۱، تاریخ پذیرش مقاله: ۱۲/۲۴/۱۳۹۹



# امکان سنجی پتانسیل آلایش (دوپینگ) سیلیکون در ستون حرارتی راکتور تحقیقاتی تهران

محمد رضا کاردان، زهره غلامزاده<sup>\*</sup>، الهام باورنگین، عطیه جزء وزیری، یاسر کاسه‌ساز، ارسلان عزتی،  
ناهید صادقی و فاطمه علیزاده

پژوهشکده راکتور و اینمنی هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران.

<sup>\*</sup>تهران، سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده راکتور و اینمنی هسته‌ای، کد پستی: ۱۴۱۵۵-۱۳۳۹

پست الکترونیکی: cadmium\_109@yahoo.com

## چکیده

تولید نیمه‌هادی‌هایی نظیر سیلیکون آلایده شده توسط فسفر در تولید قطعات الکترونیک قدرت و صنایع مختلف نظیر خودروسازی و نیروگاه‌های خورشیدی کاربردهای بسیار زیادی دارد. فرآیند آلایش که اصطلاحاً دوپینگ سیلیکون نامیده می‌شود، با هر یک از روش‌های شیمیایی و هسته‌ای قابل انجام است. از آنجایی که یکنواختی ناخالصی تزریق شده در روش شیمیایی مناسب نیست، روش‌های ناخالص‌سازی سیلیکون به روش تابش‌دهی نوترونی در دنیا به شدت دنبال می‌شود. در این کار، پتانسیل ستون حرارتی راکتور تحقیقاتی تهران برای انجام آلایش سیلیکون با استفاده از کد شیمی‌سازی MCNPX بررسی شده است. نتایج حاصل از این کار نشان می‌دهد شار نوترون‌های حرارتی و نسبت شار نوترون‌های حرارتی به نوترون‌های سریع در مکان بهینه به ترتیب  $10^{12} \text{ n/s.cm}^2$  و ۴۱ می‌باشد که نشان می‌دهد ستون حرارتی راکتور تهران می‌تواند مکان مناسبی برای آلایش سیلیکون باشد.

**کلیدواژگان:** آلایش سیلیکون، راکتور تحقیقاتی تهران، ستون حرارتی، کد MCNPX

## ۱. مقدمه

کاربرد دارند [۱]. نیمه‌رساناهای دو نوع هستند که شامل نیمه‌رسانای ذاتی (خالص) و نیمه‌رسانای غیرذاتی (دارای ناخالصی) می‌باشند. در نیمه‌رسانای ذاتی تعداد حفره و الکترون برابر است، در صورتی که در نیمه‌رسانای غیرذاتی چنین نیست. نیمه‌رسانای غیرذاتی با آلایدن نیمه‌رسانای چهارظرفیتی با یک عنصر سه یا پنج‌ظرفیتی آلاید می‌آید. برای رسیدن به مقاومت الکتریکی مطلوب نیمه‌هادی‌های مورد استفاده در صنایع، نیاز است در حدود ۱ تا ۱۰ ppm ناخالصی به کریستال سیلیکون اضافه شود.

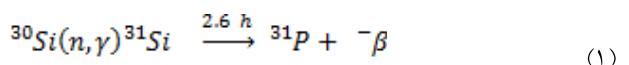
نیمه‌رساناهای در درون دستگاه‌های گوناگونی استفاده می‌شوند. اساس ساخت پردازشگرها و ریزپردازنده‌ها و تمام دستگاه‌هایی که به‌ نحوی اطلاعات و عملیاتی را پردازش می‌کنند، نیمه‌رسانا است. در کامپیوترها، دستگاه‌های عکس‌برداری پزشکی، باتری خورشیدی، سلول‌های فتوولتائیک و پخش‌کننده‌ها از این نیمه‌رساناهای استفاده می‌شود. سیلیکون یکی از عناصر سازنده زمین است که بعد از اکسیژن بیشترین فراوانی را در پوسته زمین دارد به طوری که ۲۵٪ از جرم پوسته زمین از سیلیکون تشکیل شده است. سیلیکون‌ها در تولید بسیاری از نیمه‌هادی‌ها

NTD-Si برای تولید تریستورها استفاده کرد که یک موافق استفاده تجاری عملی در این حوزه محسوب می‌شد [۲]. به دلیل برتری ویژگی‌های نیمه‌رسانای تولید شده به روش NTD، بین سال ۱۹۷۴ و ۱۹۷۶ میلادی روش NTD توسط تعدادی از راکتورهای تحقیقاتی در ایالات متحده، انگلیس و دانمارک به کار گرفته شد و به سرعت مقدار سیلیکون تابش شده به چندین تن رسید [۴].

مقاومت یک رسانا رابطه مستقیم با طول آن و رابطه معکوس با سطح مقطع دارد. همان طور که طول و سطح مقطع یک رسانا بر مقاومت الکتریکی آن اثر دارند، جنس ماده تشکیل‌دهنده هادی نیز بر مقاومت الکتریکی تأثیر خواهد داشت. زیرا هادی‌هایی مانند مس، نقره، آلومینیوم و... ویژگی‌های الکتریکی و فیزیکی متفاوتی دارند. لذا عموماً با دخیل کردن چگالی هر رسانا رابطه‌ای با عنوان مقاومت ویژه<sup>۲</sup> با واحد  $\Omega \cdot \text{cm}$  معرفی می‌گردد که برای بیان مقاومت تولید شده در یک کریستال استفاده می‌شود.

در راکتورهای مختلف، ناخالص‌سازی سیلیکون در مکان‌های مختلفی انجام می‌شود. از آنجایی که محل مورد نظر باید به گونه‌ای باشد که شار نوترون سریع در این محل بسیار کمتر از شار نوترون حرارتی باشد، لذا یکی از بهترین مکان‌های پرتوودهی کریستال‌های سیلیکون، ستون حرارتی است. در راکتور ۳۰ مگاوات MARIA در کشور لهستان شار نوترون حرارتی محل ناخالص‌سازی سیلیکون  $n \times 10^{12} \text{ n/s.cm}^2$  و شار نوترون سریع محل  $n \times 10^{10} \text{ n/s.cm}^2$  است. در این راکتور، برای تولید کریستال‌های دارای مقاومت  $100 \Omega \cdot \text{cm}$  برنامه‌ریزی شده است و در مدت ۵ سال  $300 \text{ کیلوگرم}$  کریستال پرتوودهی شده است. در محل پرتوودهی، شار نوترون حرارتی از مرتبه

از سال ۱۹۷۰ میلادی NTD<sup>۱</sup> سیلیکون به طور گستردگی برای تولید سیلیکون نیمه‌هادی دارای مقاومت یکنواخت برای ساخت قطعات الکترونیکی مورد استفاده قرار گرفته است. ایده تولید نیمه‌رساناهای با مقاومت کاملاً یکنواخت توسط روش NTD در ابتدا توسط لارک هولویتز در سال ۱۹۵۱ میلادی ارائه شد [۲]. NTD سیلیکون براساس واکنش هسته‌ای زیر است:



توزیع یکنواخت ایزوتوپ‌های  ${}^{31}\text{P}$  در نمونه کریستال سیلیکون و هم‌چنین امکان کنترل دقیق شار نوترون می‌تواند در دست‌یابی به همگنی مقاومت مشخص شده در محصول نهایی تأثیرگذار باشد. در روش مرسوم، ناخالص‌سازی سیلیکون با افزودن ناخالصی‌ها در هنگام رشد کریستال انجام می‌شود. در بیشتر موارد، این رویه‌ها منجر به توزیع ناهمگن ناخالصی‌ها ( ${}^{31}\text{P}$ ) در کریستال می‌شود، لازم به ذکر است که فسفر در طبیعت تکایزوتوپی است لذا ذکر فسفر-۳۱ در روش شیمیایی فقط به دلیل مقایسه با روش NTD صورت پذیرفته است. به عنوان نمونه، آلایش معمولی نوع n (تزریق فسفر) منجر به تغییرات بزرگ آلایش تا ۵۰٪ می‌شود [۲]. در روش NTD، همگن بودن محصول نهایی به عوامل زیر بستگی دارد:

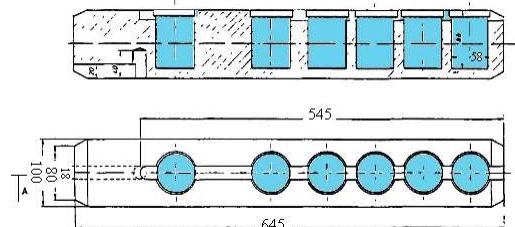
- ۱) یکنواختی کریستال رشد داده شده اولیه، ۲) تفاوت بین غلاظت نهایی و اولیه ناخالصی‌ها، ۳) یکنواختی شار نوترون در راکتور و ۴) ابعاد و قطر کریستال‌های سیلیکون [۳].
- در حالی که تکنیک NTD به مدت دو دهه در آزمایشگاه‌های تحقیقاتی شناخته شده و مورد استفاده قرار گرفته بود، اما تا اواسط دهه ۱۹۷۰ میلادی از نظر تجاری تا حدی قابل استفاده نبود. در سال ۱۹۷۳، یک محقق آلمانی از

<sup>2</sup> Resistivity

<sup>1</sup> Neutron Transmutation Doping

از راکتور حرارتی با توان  $250\text{ کیلووات}$  و متوسط شار در حدود  $2 \times 10^{12} \text{ n/s.cm}^2$  نیز می‌توان برای آلایش کریستال‌های Si استفاده کرد. در این حالت تنها محدودیت، زمان تابش زیاد است (حدود  $350$  ساعت) و با این راکتور می‌توان مقاومت‌هایی در حدود  $50\text{ }\Omega\text{cm}$  تولید کرد [۷].

همچنین لازم به ذکر است که اولین آلایش تجاری سیلیکون در راکتور  $5$  مگاوات DR2 دانمارک در سال ۱۹۷۴ انجام شد. در این راکتور، تابش‌های سیلیکون قطر  $2$  اینچ در قوطی‌های آلومینیومی به قطر  $53$  میلی‌متر در یک استند گرافیت افقی در ستون حرارتی انجام می‌شد، نمایی از این استند در شکل  $2$  نشان داده شده است. ارتفاع هر کریستال  $8\text{ cm}$  و شار نوترون حرارتی محل  $3 \times 10^{12} \text{ n/s.cm}^2$  و نسبت حرارتی به سریع بیش از  $1000$  بوده است [۸].



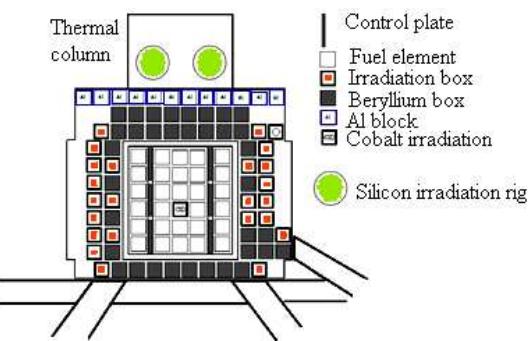
شکل (۲): نگهدارنده پرتودهی کریستال سیلیکون در راکتور DR2 در محل ستون حرارتی [۸].

راکتور  $5$  مگاوات EA-R1 در بزرگی نیز کریستال‌های  $5$  اینچ دارای ارتفاع  $500$  میلی‌متر را برای ایجاد مقاومت  $\Omega\text{cm}^{30}$  پرتودهی می‌کند و ظرفیت تولید آن  $1/2$  تن در سال است [۹].

در کار انجام شده توسط پذیرنده و همکاران (۱۹۹۲) ویفرهای سیلیکون توسط نوترون‌های حرارتی تابش داده شدند. طیف گاما ویفرهای تابش داده شده با شمارش نمونه‌ها توسط یک آشکارساز ژرمانیوم بسیار خالص به دست آمد. نتایج این کار نشان می‌داد که مقاومت الکتریکی ویفرهای سیلیکونی درنتیجه تابش نوترونی افزایش یافته بود که می‌تواند ناشی از آسیب اشعه در ساختار بلوری باشد [۱۰].

$2 \times 10^{12} \text{ n/s.cm}^2$  و عموماً زمان پرتودهی حدود  $15$  ساعت بوده است [۴].

ستون حرارتی در راکتور  $20$  مگاوات ET-RR-2 برای ایجاد یک میدان نوترون حرارتی با شدت و خلوص بالا به منظور انجام کارهای زیر مورد استفاده قرار می‌گیرد: (الف) تهیه یک شار نوترون حرارتی برای ناخالص‌سازی سیلیکون، (ب) ایجاد شار حرارتی برای آنالیز فعال‌سازی نوترون و (ج) تأمین شار نوترون حرارتی با شدت زیاد برای اهداف BNCT در شکل  $1$  نمایی از مکان پرتودهی کریستال سیلیکون در این راکتور نشان داده شده است.



شکل (۱): محل پرتودهی کریستال سیلیکون در محل ستون حرارتی راکتور  $2$  ET-RR-2 [۶].

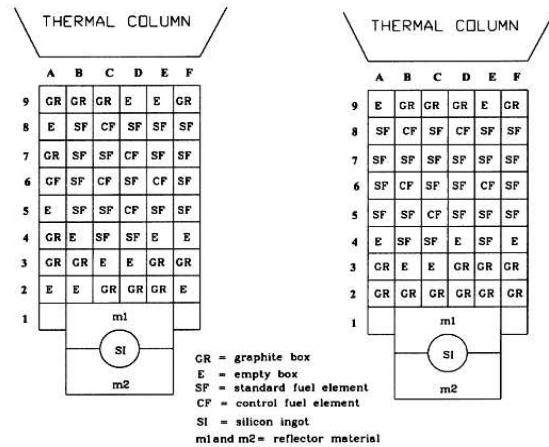
در این راکتور، در محل‌های A و B شار نوترون حرارتی  $n/s.cm^2 1 \times 10^{12}$  و در محل C شار نوترون حرارتی  $n/s.cm^2 5 \times 10^{11}$  است [۵].

یک عامل مهم بهینه‌سازی فرایند آلایش سیلیکون استفاده از نسبت مقاومت نهایی به مقاومت اولیه حداقل بزرگتر از  $10$  در یک مکان معین است. شار سریع معمولاً بخشی از طیف نوترون با انرژی بیش از  $18\text{ MeV}$  درنظر گرفته شده است. مطلوب است تا حد ممکن طیف نوترون در محل ناخالص‌سازی سیلیکون بسیار حرارتی شده باشد تا آسیب به شبکه کریستالی توسط نوترون‌های سریع تا حد ممکن کاهش یابد. ممکن است عملیات حرارتی برای رفع نقص در شبکه کریستالی پس از NTD انجام گردد. ثابت شده است که حتی

در پرتودهی کریستال‌های سیلیکون، یکنواختی شارش دریافتی اهمیت بسزایی دارد و لازم است اختلاف شارش بیشینه و کمینه در راستای شعاعی و یا محوری کریستال تقسیم بر شارش کمینه دریافتی کریستال کمتر از ۱۰٪ باشد؛ این فاکتور اصطلاحاً ARV<sup>۱</sup> نامیده می‌شود. در واقع هرچه شار محوری و شعاعی یکنواخت‌تر باشد امکان دستیابی به این فاکتور ساده‌تر خواهد بود. در راکتور WWR-K ۶ مگاواتی جمهوری قزاقستان، در کریستال سیلیکون پرتودهی شده با شارش  $n/cm^2 \times 10^{16}$  ۴ به مدت ۴ ساعت ویفرهایی با مقاومت‌های  $\Omega cm$  ۴۰۰ تولید شده است. در محل پرتودهی این کریستال نسبت شارش نوترون حرارتی به سریع بیش از ۱۲ و سرعت چرخش شعاعی کریستال حدود ۲ rpm بوده است [۱۱].

هم‌چنین در کار انجام شده توسط محققان در سال ۲۰۱۲ به این موضوع اشاره شده است که نوترون‌های سریع و پرتوهای گاما باعث نقص و جابه‌جایی شبکه در کریستال سیلیکون می‌شوند. در توصیه‌های مدارک منتشرشده توسط آژانس انرژی اتمی بین‌المللی در زمینه ناخالص‌سازی سیلیکون به این موضوع اشاره شده است که نسبت شار حرارتی به سریع باید حدود ۷ باشد و دما در موقعیت تابش‌دهی باید کمتر از ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد باشد [۷]. از آنجایی که مطلوب‌ترین حالت تولید سیلیکون نیمه‌رسانا به روش NTD استفاده از مکانی است که کمترین نقص و جابه‌جایی<sup>۲</sup> شبکه‌های کریستالی سیلیکون را ایجاد کند، ستون حرارتی راکتور تحقیقاتی تهران به عنوان مکان مناسب انتخاب شده است و در این کار به بررسی پتانسیل استفاده از این مکان برای ناخالص‌سازی سیلیکون پرداخته خواهد شد.

در سال ۲۰۰۲ شیبانی و همکارانش به بررسی پرتودهی کریستال سیلیکون در یک باکس نزدیک قلب راکتور با استفاده CITATION و WIMS MCNP از کدهایی مانند پرداخته‌اند. طرح این پرتودهی در شکل ۳ ارائه شده است [۲].



شکل (۳): نمایی از طراحی مکان پرتودهی کریستال سیلیکون با قطر بیشینه ۳ اینچ در کار انجام شده توسط شیبانی و همکاران [۲].

طبق نتایج ارائه شده توسط شیبانی و همکارانش، نسبت شار نوترون حرارتی به سریع در محل بررسی شده برای ناخالص سازی سیلیکون بین ۶/۵ تا ۲/۵ در راستای شعاعی کریستال تعییر می‌کند [۲].

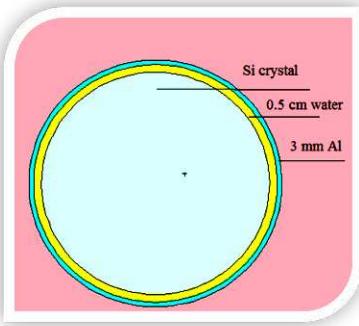
لازم به ذکر است هرچه قدر کندکننده بیشتری در مسیر کریستال قرار گیرد، شار نوترون سریع دریافتی در کریستال کاهش می‌یابد که این موضوع باعث می‌گردد الزام حرارت‌دهی کریستال بعد از پرتودهی به علت رفع جابه‌جایی‌های اتفاق‌افتداده در شبکه کریستالی به واسطه نوترون‌های سریع (نقص شبکه) حذف گردد از طرفی فاصله گرفتن از قلب، شار نوترون حرارتی را کاهش می‌دهد و زمان پرتودهی را افزایش خواهد داد. لذا مشخص نمودن یک مکان بهینه که اهداف مورد نظر را به طور همزمان برآورده کند، حائز اهمیت است.

<sup>1</sup> Axial Resistivity Variation

<sup>2</sup> displacement

شده است. قطر این کریستال ۶ اینچ و ارتفاع آن ۶۰ سانتی متر

در نظر گرفته شده است. این کریستال درون یک قوطی الومینیومی با ضخامت بدنه ۳ میلی متر در نظر گرفته شده است و برای خنک سازی آن بین کریستال و بدنه قوطی ۰/۵ سانتی متر آب قرار داده شده است.

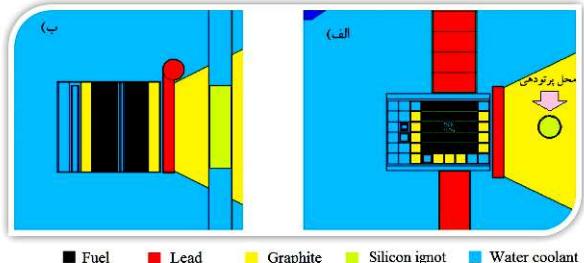


شکل (۵): سطح مقطع کریستال سیلیکون مدل سازی شده توسط کد MCNPX

در ادامه، محل مناسب کریستال سیلیکون به منظور افزایش نسبت شار حرارتی به شار سریع، کاهش گرمای به جای مانده ناشی از ذرات نوترون و گاما درون کریستال و نیز حفظ شار حداقلی  $1 \times 10^{12} \text{ n/s.cm}^2$  تعیین گردید. در ابتدا، برای محاسبات شار نوترون درون کریستال از قابلیت مش تالی کد MCNPX استفاده شد و توزیع شار نوترون محوری و شعاعی در دو گروه  $E_n < 4 \text{ eV}$  و  $E_n > 0.18 \text{ MeV}$  به عنوان نماینده های گروه انرژی حرارتی و سریع به ترتیب بررسی شد. فاصله مرکز کریستال سیلیکون از مرکز قلب در درون دهانه ستون حرارتی به ترتیب  $80 \text{ cm}$  و  $90 \text{ cm}$  انتخاب شد که مکان  $100 \text{ cm}$  انتهای دهانه ستون حرارتی است و فراتر رفتن از آن امکان پذیر نیست. پس از تخمین مکان مناسب کریستال، بررسی توزیع شار محوری و شعاعی نوترون در گروه های انرژی مختلف نیز بررسی شد. برای محاسبات گرمای به جای مانده درون کریستال از قابلیت تالی F6 کد محاسباتی استفاده شد. در نهایت مکان مناسب کریستال به جهت برآورده کردن مفروضات مطلوب بیان شده در قبل پیشنهاد گردید.

## ۲. مواد و روش ها

کد محاسباتی MCNPX قادر به تراپردازی ۳۴ نوع ذره از جمله ذرات نوترون و فوتون است. این کد محاسباتی قادر است انواع مسائل راکتور و شتابدهنده ها را مدل سازی کرده و با هم خوانی خوبی نسبت به اندازه گیری های تجربی رفتار نوترونیک و یا پرتو زایی آنها را مشخص نماید [۱۳]. لذا در این کار از کد MCNPX برای مدل سازی قلب راکتور تحقیقاتی تهران استفاده شده است. راکتور تحقیقاتی تهران یک راکتور ۵ MW است که مطابق شکل ۴ توسط این کد محاسباتی شبیه سازی شده است.



شکل (۴): شبیه سازی محل پرتو دهنده کریستال سیلیکون در محل دهانه ستون حرارتی راکتور تحقیقاتی تهران (الف) نمای افقی قلب، (ب) نمای عمودی قلب.

در واقع کد محاسباتی MCNPX با دردست داشتن کتابخانه سطح مقطع برهم کنش های مختلف نوترون با مواد مختلف در انرژی های مختلف نوترون و نیز کتابخانه واپاشی ایزو توپ ها، نیمه عمر رادیوایزو توپ های مختلف، ثوابت واپاشی، ماتریس های رزنанс و غیره با روش مونت کارلو به محاسبه احتمال برخورده، نشت و یا جذب یک نوترون ضمن تراپرداز آن در محیط هندسه شبیه سازی شده می پردازد و به صورت آماری پس از محاسبات فوق با توجه به روابط و فرمول هایی که در برنامه خود دارد شار نوترون و یا گرمای به جای مانده را در هر بخش از ماده و هندسه قلب مدل سازی شده محاسبه می کند. در شکل ۵ کریستال سیلیکون استوانه ای شکل تعییه شده در دهانه ستون حرارتی نشان داده

$$H(E) = \sigma_T(E) H_{ave}(E) \quad (4)$$

که

$$H_{ave}(E) = E - \sum_i P_i(E) [\bar{E}_{out}(E) - Q_i + \bar{E}_{\gamma i}(E)] \quad (5)$$

سطح مقطع کل نوترون =  $\sigma_T$

انرژی نوترون تابشی =  $E$

احتمال واکنش  $i$  ام =  $P_i(E)$

میانگین انرژی نوترون خروجی برای واکنش  $i$  ام =  $E_{out}$

مقدار  $Q_i$  واکنش  $i$  ام =  $Q_i$

انرژی متوسط گام‌های خروجی برای واکنش  $i$  ام =  $E_{\gamma i}$

پاسخ گرما در تالی F6 برای فوتون‌ها از طریق رابطه ۶  
محاسبه می‌شود:

$$H(E) = \sigma_T(E) H_{ave}(E) \quad (6)$$

$$H_{ave}(E) = \sum_{i=1}^3 P_i(E) * (E - \bar{E}_{out}) \quad (7)$$

که

$i$  = پراکندگی ناهمسان (کامپتون) با فاکتورهای شکل

$i$  = تولید زوج الکترون/پوزیترون

$i$  = فوتوالکتریک [۱۳-۱۴].

هم‌چنین فاکتور پیک شعاعی و محوری کریستال در هر مکان پرتودهی با نسبت شار بیشینه به میانگین محاسبه گردید. لازم به ذکر است که هرچه قدر عدد به یک نزدیک‌تر باشد مطلوب‌تر است.

### ۳. نتایج و بحث

در ابتدا کریستال سیلیکون در فاصله ۸۰ cm از مرکز قلب درون دهانه ستون حرارتی قرار داده شد. در این مکان ۳۴ cm گرافیت، ۸ cm سرب و ۷ cm بازتاباننده گرافیت بین لبه آخرین ردیف سوخت‌های قلب و لبه کانال محتوی کریستال سیلیکون قرار دارد. در شکل ۶ توزیع شار نوترون شعاعی این مکان نشان داده شده است.

برای محاسبات شار نوترون در کد MCNPX از تالی F4 استفاده می‌شود در واقع، برای تعیین شار ذرات ورودی به یک حجم، از این تالی استفاده می‌شود. اگر ذره‌ای با وزن  $W$  و انرژی  $E$  در یک سلول مشخص دارای حجم  $V$  ارتفاع پیمایش  $T$  ایجاد کند، این ارتفاع پیمایش مشارکت  $WT/V$  در شار (شارش) سلول ایجاد می‌کند. میانگین به عنوان تالی F4 در خروجی MCNPX گزارش می‌شود.

از نظر فنی، اگر  $\Phi(r, E, \Omega)$  انرژی و توزیع زاویه‌ای جریان به عنوان تابعی از مکان باشد، در واقع، مقدار F4 از رابطه زیر تعیین می‌گردد [۱۴]:

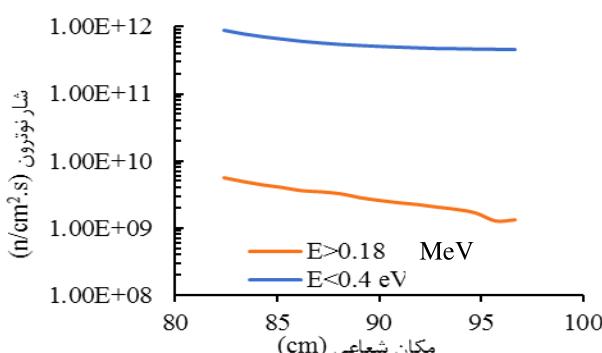
$$F4 = \frac{1}{V} \int_V dV \int_E dE \int_{4\pi} d\Omega \Phi(r, E, \Omega) \quad (\frac{\frac{\#}{cm^2}}{source particle}) \quad (2)$$

برای محاسبات گرمای به جای مانده، کد MCNPX از تالی F6 استفاده می‌کند که تمام انرژی به جای مانده ناشی از ذرات اولیه مختلف در زمان واکنش هسته‌ای محاسبه می‌شود و انرژی ذرات ثانویه، اگر قرار نباشد ردیابی شوند (یعنی روی کارت MODE موجود نباشند) در نقطه برهم‌کش ذخیره می‌شود. انرژی پس‌زنی هسته‌ای نیز در نقطه برهم‌کش ذخیره می‌شود، مگر این‌که تراپرد یون سنگین مشخص شود. برای به‌دست آوردن دقیق‌ترین میزان انرژی به جای مانده، کاربر باید تمام ذرات ثانویه ممکن (آن‌هایی که احتمال تولید آن‌ها در برهم‌کنش وجود دارد) را در کارت MODE درنظر بگیرد. در کد MCNPX از روابط زیر برای محاسبه گرمای به جای مانده استفاده می‌شود.

$$F_6 = \frac{\rho_a}{\rho_g} \int_v \int_t \int_E H(E) \Phi(r, E, t) dEdt \frac{dV}{V} \quad (\frac{MeV}{g*(Source particle)}) \quad (3)$$

که  $\rho_a$  چگالی اتمی است (سانتی‌مترمکعب/اتم)،  $\rho_g$  چگالی جرمی است (سانتی‌مترمکعب/گرم) و  $H(E)$  پاسخ گرما است (که به نوکلیدها در یک ماده اضافه می‌شود). پاسخ گرما در تالی F6 برای نوترون‌ها از طریق رابطه ۴ محاسبه می‌شود:

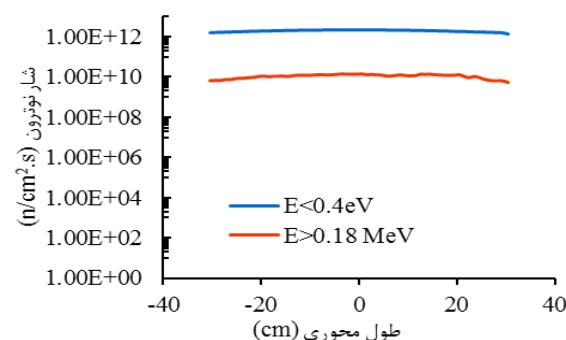
نیز قابل رفع است. همچنین محاسبات فوق الذکر برای مکان دارای فاصله مرکز به مرکز کریستال تا قلب راکتور ۹۰ cm تکرار شد. در شکل ۸ نمودار تغییرات شعاعی شار نوترون درون کریستال واقع در این مکان نشان داده شده است.



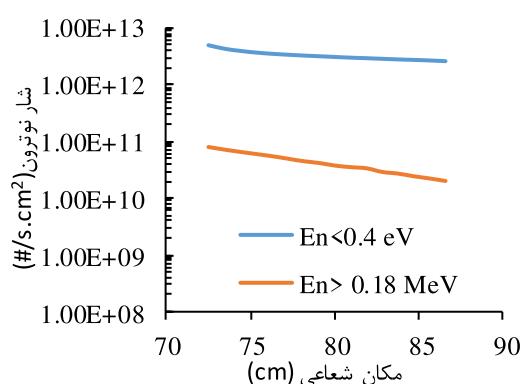
شکل (۸): توزیع شار شعاعی در داخل کریستال سیلیکون ۶ اینچ در فاصله ۹۰ cm از مرکز قلب.

در این مکان نسبت شار حرارتی به شار سریع ۱۸۵ است. همچنین میانگین انرژی نوترون درون کریستال  $19.3 \text{ eV}$  است. گرمای ناشی از پرتوهای گاما درون کریستال  $85.3 \text{ W}$  است و گرمای شار نوترون حرارتی در این محل  $2 \times 10^{12} \text{ n/s.cm}^2$  است. فاکتور پیک شار شعاعی یعنی نسبت شار حرارتی بیشینه به میانگین حدود ۱/۵۴ است.

در شکل ۹، توزیع محوری شار نوترون در این مکان نشان داده شده است. براساس محاسبات، پیک شار محوری نوترون حرارتی در این مکان  $1/15$  است.



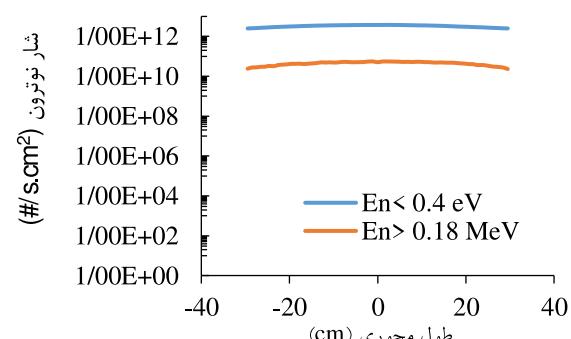
شکل (۹): توزیع شار محوری در داخل کریستال سیلیکون ۶ اینچ در فاصله ۹۰ cm از مرکز قلب.



شکل (۶): توزیع شار شعاعی در داخل کریستال سیلیکون ۶ اینچ در فاصله ۸۰ cm از مرکز قلب.

در این مکان نسبت شار حرارتی به شار سریع ۷۶ است. همچنین انرژی نوترون درون کریستال  $43 \text{ eV}$  است. گرمای ناشی از پرتوهای گاما درون کریستال  $137 \text{ W}$  است و گرمای ناشی از نوترون بسیار کمتر است. شار نوترون حرارتی در این محل  $3 \times 10^{12} \text{ n/s.cm}^2$  است. فاکتور پیک شار شعاعی یعنی نسبت شار حرارتی بیشینه به میانگین حدود  $1/46$  است. لازم به ذکر است عدم یکنواختی شار شعاعی با چرخاندن کریستال قابل رفع شدن است.

در شکل ۷ توزیع شار نوترون محوری این مکان نشان داده شده است.

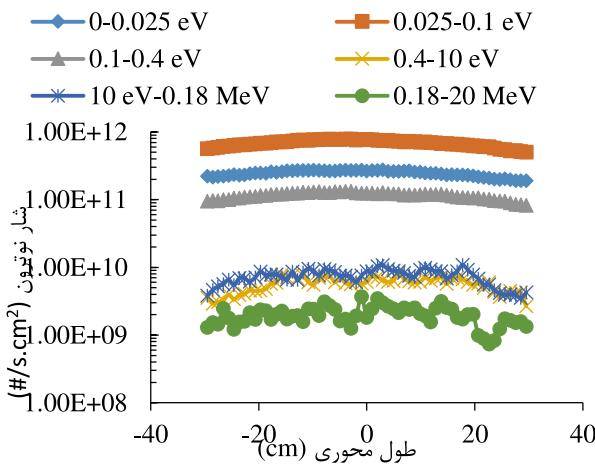


شکل (۷): توزیع شار محوری در داخل کریستال سیلیکون ۶ اینچ در فاصله ۸۰ cm از مرکز قلب.

در این مکان فاکتور پیک محوری  $1/14$  است و مجدداً لازم به ذکر است با حرکت عمودی کریستال عدم یکنواختی محوری

مناسب، نسبت شار حرارتی به سریع حداقل ۷ برابر (طبق توصیه آژانس انرژی اتمی بین‌الملل) و نیز گرمای بهجای مانده در کریستال بود را به خوبی برآورده می‌کند. مکان  $100\text{ cm}$  به لحاظ نسبت حرارتی به سریع بسیار بالاتر و نیز انرژی نوترون حرارتی بسیار کمتر مطلوب‌تر است ولی زمان مورد نیاز  $cm$  پرتودهی هر کریستال را حداقل  $3$  برابر می‌کند. در مکان  $100\text{ cm}$  گرمای بهجای مانده ناشی از پرتوهای گاما درون کریستال  $0.002\text{ W/g}$  است. لذا در صورت انتخاب محل‌های دور از قلب در راکتور تحقیقاتی تهران، این زمان به  $2$  الی  $3$  برابر افزایش می‌یابد.

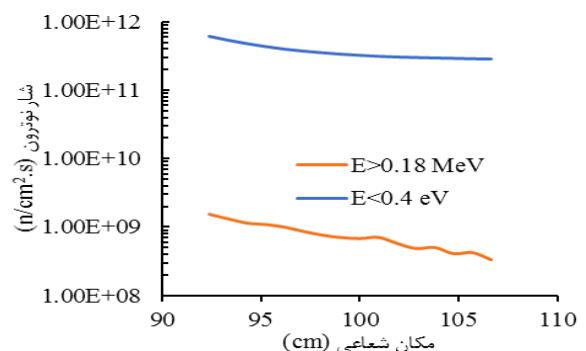
در شکل ۱۲، توزیع محوری شار نوترون در گروه‌های بیشتر انرژی در راستای محوری کریستال سیلیکون دارای قطر  $6$  اینچ که در فاصله  $100\text{ cm}$  از قلب واقع شده است، نشان داده شده است. هم‌چنان که شکل ۱۲ نشان می‌دهد، عمدۀ نوترون‌های داخل کریستال دارای انرژی کمتر از  $0.4\text{ eV}$  هستند و شار نوترون‌های انرژی بیشتر از  $0.4\text{ eV}$  بسیار کمتر است.



شکل (۱۲): توزیع شار محوری در گروه‌های مختلف انرژی در داخل کریستال سیلیکون  $6$  اینچ در فاصله  $100\text{ cm}$  از مرکز قلب.

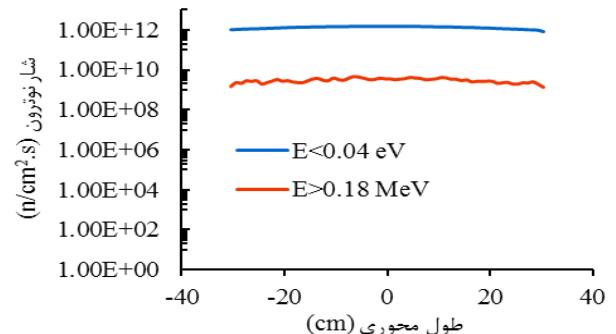
در جدول ۲ ویژگی‌های کانال‌های مختلف پرتودهی سیلیکون در دهانه ستون حرارتی با یکدیگر مقایسه شده است.

محاسبات توزیع شار در مکان  $100\text{ cm}$  از مرکز قلب انجام شد. توزیع شعاعی شار نوترون در شکل ۱۰ نشان داده شده است. در این مکان نسبت شار حرارتی به شار سریع  $8/3\text{ eV}$  است. هم‌چنین انرژی میانگین نوترون درون کریستال  $54/1$  وات است. گرمای ناشی از پرتوهای گاما درون کریستال  $1\times 10^{12}\text{ n/s.cm}^2$  است. گرمای ناشی از نوترون بسیار ناچیز است. هم‌چنین شار نوترون حرارتی در این محل  $1/63$  است. فاکتور پیک شار شعاعی یعنی نسبت شار حرارتی بیشینه به میانگین حدود  $1/63$  است.



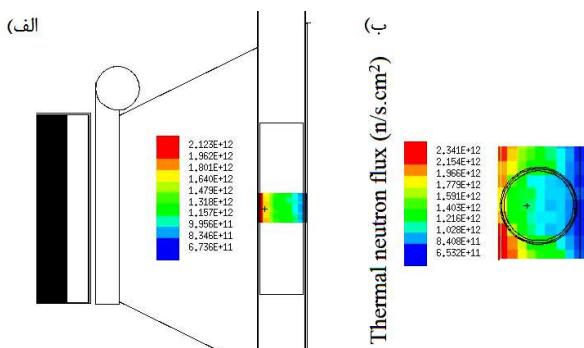
شکل (۱۰): توزیع شار شعاعی در داخل کریستال سیلیکون  $6$  اینچ در فاصله  $100\text{ cm}$  از مرکز قلب.

در شکل ۱۱، توزیع شار نوترون حرارتی در راستای محوری کریستال نشان داده شده است. در این مکان فاکتور پیک محوری  $1/13$  است.



شکل (۱۱): توزیع شار محوری در داخل کریستال سیلیکون  $6$  اینچ در فاصله  $100\text{ cm}$  از مرکز قلب.

در کل، سه مکان بررسی شده دهانه ستون حرارتی به لحاظ حداقل ملاحظات بر Sherman شده که شامل شار نوترون حرارتی



شکل (۱۳): توزیع شار نوترون حرارتی در قسمت میانی کریستال سیلیکون ۶ اینچ در فاصله ۱۰۰ cm از مرکز قلب (الف) نمای محوری، (ب) نمای شعاعی.

در سال‌های اخیر تحقیقات و تلاش‌هایی برای انجام ناخالص‌سازی سیلیکون در راکتور تحقیقاتی تهران انجام شده است که در این کار این موضوع به صورت تخصصی و با توجه به ملاحظات فنی مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. در راکتور تهران، در محل بررسی شده در دهانه ستون حرارتی در ارتفاع ۱۰ cm وسط کریستال ۶ اینچی با ارتفاع ۶۰ cm در مکان ۱۰۰ cm از مرکز قلب، پارامتر ARV٪ ۳۳ است. این یکنواختی محوری در وسط کریستال در شکل ۱۳ نیز دیده می‌شود. محاسبات نشان می‌دهد در ارتفاع ۲۰ cm وسط این کریستال پارامتر ARV ۷/۶٪ و در ارتفاع ۳۰ cm وسط کریستال این پارامتر ۱۲/۴٪ است.

لازم به ذکر است که در قسمت وسط کریستال ARV کمتر از ۱۰٪ بدون حرکت عمودی کریستال قابل حصول است. از آنجایی که ثابت‌بودن کریستال در مکان تعییه شده در زمان پرتودهی مطلوب‌تر است روش دیگری که می‌توان به کار برد که منجر به تختشدن شار نوترون در ارتفاع کریستال گردد این است که از شکل دهنده شار در مسیر کانال پرتودهی استفاده گردد. این شکل دهنده شار می‌تواند شامل ماده جاذب نوترون حرارتی با ضخامت متغیر در ارتفاع کانال (به عبارتی در ارتفاع کریستال) باشد. طراحی یک شکل دهنده شار نوترون

جدول (۱): مقایسه ویژگی‌های مکان‌های مختلف پرتودهی کریستال سیلیکون درون دهانه ستون حرارتی راکتور تحقیقاتی تهران.

میانگین شار	نسبت شار	گرمای	میانگین	مکان
نوترون	نوترون	انرژی	ناشی از	
حرارتی	حرارتی	سریع	حرارتی	(cm)
(W)	(W)	(eV)	(W)	
۱۳۷/۰	۰/۷۳۰	۴۳/۰	۷۶	$۳/۳ \times 10^{12}$
۸۵/۳	۰/۲۲۰	۱۹/۳	۱۸۵	$۲/۱ \times 10^{12}$
۵۴/۱	۰/۰۶۵	۸/۳	۴۴۱	$۱/۲ \times 10^{12}$
				۸۰
				۹۰
				۱۰۰

هم‌چنان که جدول ۱ نشان می‌دهد؛ مکان‌های مختلف دهانه

ستون حرارتی شار بیش از  $10^{12}$  n/s.cm<sup>2</sup> را دارا هستند. در مکان‌های دورتر از قلب دو مزیت عمدی ایجاد می‌شود که عبارتند از انرژی نوترون کم‌تر و نیز گرمای به جای مانده کمتر در درون کریستال. انرژی میانگین کمتر نشان‌دهنده کاهش آسیب پرتویی ناشی از نوترون سریع است. با این وجود می‌توان درون دهانه ستون حرارتی بیش از یک کانال را برای پرتودهی سیلیکون اختصاص داد که کانال نزدیک به قلب را برای کریستال‌های قطر کوچک‌تر اختصاص داد زیرا گرمای به جای مانده درون آن‌ها کمتر خواهد شد و نیز زمان پرتودهی آن‌ها کوتاه‌تر خواهد بود.

در شکل ۱۳ توزیع شار نوترون حرارتی با انرژی کمتر از ۰/۴ eV در قسمت مرکزی (ارتفاع ۱۰ cm) کریستال سیلیکون ۶ اینچی نشان داده شده است. هم‌چنان که شکل نشان می‌دهد شار نوترون حرارتی در قسمت ۱۰ cm وسط کریستال با ارتفاع ۶۰ cm تقریباً یکنواخت است. لذا با حرکت عمودی کریستال ضمن پرتودهی می‌توان در تمام بخش‌های کریستال، شارش دریافتی یکنواختی را ایجاد کرد. هم‌چنین چرخش محوری کریستال می‌تواند عدم یکنواختی شارش دریافتی کریستال را برطرف سازد. لذا لازم است سیستم کنترل مکانیکی‌ای جهت ایجاد چرخش و حرکت عمودی کریستال در این کانال پرتودهی طراحی گردد.

در کل، هرچه شارش نوترون دریافتی کریستال بیشتر باشد می‌توان مقاومت بیشتری تولید کرد. لازم به ذکر است که هرچند گستره مختلف مقاومت‌ها مورد نیاز است ولی هر راکتور براساس ساعت‌های پرتودهی امکان‌پذیر خود می‌تواند فقط تا محدوده مقاومت‌های خاصی را تولید کند.

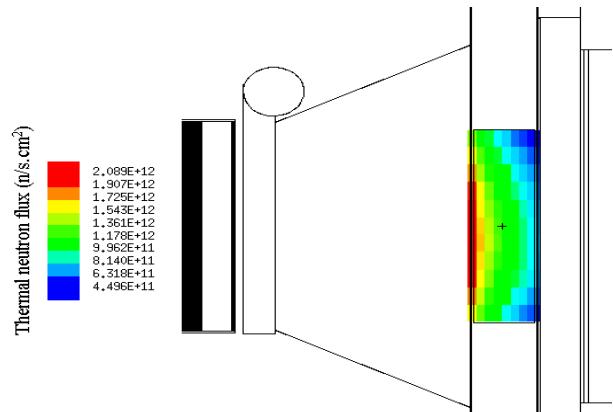
محاسبات کد MCNPX نشان می‌دهد آهنگ تولید اتم‌های فسفر ۳۱ درون کریستال  $8 \times 10^9 \text{ atom/s.cm}^2$  است که انتظار می‌رود پس از ۹ ساعت پرتودهی  $2 \times 10^{18}$  اتم فسفر-۳۱ درون کریستال تولید شود. هم‌چنین لازم به ذکر است که خطای آماری تمامی محاسبات کمتر از ۳٪ بوده است.

#### ۴. نتیجه گیری

در بسیاری از راکتورهای تحقیقاتی دنیا ناخالص‌سازی سیلیکون با ظرفیت چندین تن در حال انجام است. با توجه به این که این نیمه‌رساناهای در صنایع گسترده‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرند، تولید آن در راکتور تحقیقاتی تهران هم منجر به درآمد زایی می‌گردد، هم‌چنین نیاز بسیاری از صنایع داخل کشور را برآورده خواهد ساخت. محاسبات انجام شده در این کار نشان می‌دهد ستون حرارتی راکتور تحقیقاتی تهران به خوبی می‌تواند برای انجام ناخالص‌سازی سیلیکون مورد استفاده قرار گیرد. در مکان ۱۰۰ cm از مرکز قلب، نسبت شار نوترون حرارتی به سریع بسیار بالا است و انرژی نوترون‌ها در طیف موجود درون کریستال سیلیکون  $8/3 \text{ eV}$  است. ضمن این که در این مکان کل گرمای ناشی از گاما درون کریستال حدود ۵۶ W است. این موارد همگی موجب کمترین آسیب به شبکه کریستال ضمن پرتودهی خواهند شد. این مقدار گرمای برای جریان آب راکتور تحقیقاتی تهران برداشت می‌شود و دما کریستال را کمتر از ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد (دماهی بیشینه کریستال به جهت جلوگیری از نقص آن) حفظ خواهد کرد. در مورد لزوم یکنواختی شعاعی ناخالصی تولید شده در کریستال سیلیکون،

حرارتی می‌تواند در تحقیقات بعدی این پژوهش مورد بررسی قرار گیرد.

در شکل ۱۴، نمای توزیع شار نوترون حرارتی در ارتفاع کریستال درون کانال بهینه نشان داده شده است.



شکل (۱۴): توزیع شار نوترون حرارتی در ارتفاع کریستال سیلیکون ۶ اینچ در فاصله ۱۰۰ cm از مرکز قلب.

محاسبات نشان می‌دهد با صرف زمان حدود ۹ ساعت در این مکان می‌توان به شارش راکتور WWR-K دست یافت. ضمن این که این مکان به لحاظ نسبت شار نوترون حرارتی به سریع نسبت به راکتور K WWR وضعیت بسیار بهتری دارد. لذا امکان تولید مقاومت  $\Omega_{cm} = 400$  و مقاومت‌های کمتر از آن در راکتور تحقیقاتی تهران وجود دارد. هم‌چنین دست‌یابی به راکتور تحقیقاتی تهران با توجه به پرتودهی ۳ عدد کریستال در هر ماه به خوبی قابل پیش‌بینی است.

محاسبات کد MCNPX نشان می‌دهد با حضور کریستال در محل ستون حرارتی، ضریب تکثیر مؤثر ( $k_{eff}$ ) قلب در مورد نزدیکترین محل پرتودهی به قلب (۸۰ cm) حدود ۸۷ pcm افزایش می‌یابد و در محل‌های دورتر تغییرات این عدد کمتر از ۵pcm است. لذا این کانال پرتودهی که در خارج قلب قرار دارد تأثیری بر پارامترهای نوترونیک قلب ندارد زیرا ضریب تکثیر مؤثر بسیار کمتر از کسر نوترون تأخیری قلب (۸۵۰ pcm) است.

با این حال در ارتفاع کل کریستال مقدار یکنواختی بیش از ۱۰٪ خواهد بود. لذا در طراحی کanal لازم است یکی از موارد جایه‌جایی محوری کریستال و یا استفاده از مواد شکل دهنده شار برای تخت کردن آن درون کanal پرتودهی مورد توجه قرار گیرد که در طراحی نهایی کanal پرسوده‌ی این موارد لحاظ خواهد گردید.

لازم به ذکر است که با چرخش ساعتی کریستال با سرعت ۵-۲ rpm یکنواختی حاصل خواهد شد که در طراحی کanal پرتودهی راکتور تحقیقاتی تهران این فرایند اجرا خواهد شد. محاسبات نشان می‌دهد در راکتور تهران، در محل بهینه بررسی شده در دهانه ستون حرارتی در ارتفاع ۱۰ cm وسط کریستال ۶ اینچی با ارتفاع ۶۰ cm، پارامتر ARV  $\frac{3}{3}$ ٪ است.

## ۵. مراجع

- [۱] علی یادبروقی، نیمه‌رساناهای کاربردهای آنها، ۱۳۹۸، [www.prozhe.com](http://www.prozhe.com)
- [۲] M.S. Schnoller. Breakdown behavior of rectifiers and thyristors made from striation-free silicon, IEEE Transition Electron Devices, 21(1974) 313-314.
- [۳] S. Sheibani, F. Moattar, M. Ghannadi Maragheh and H. Khalafi. Investigation of a simple and efficient method for silicon neutron transmutation doping process in Tehran research reactor, Annals of Nuclear Energy, 29(2002) 1195-1208.
- [۴] Neutron Transmutation Doping of Silicon at Research Reactors, IAEA-TECDOC, (1681).
- [۵] M. Imam Mahmoud and H. Roushdy. Thermal neutron flux distribution in ET-RR2 reactor thermal column, Nuclear Technology and Radiation Protection, 17(2002) 64-67.
- [۶] M.K. Shaat and M.A. Gaheen. Utilization of Egyptian Research Reactor and Modes of Collaboration, Egyptian Research Reactor (ETRR-2), 15 August (2017).
- [۷] Silicon transmutation doping techniques and practices, (International Atomic Energy Agency, Vienna (Austria); Otwock-Swierk (Poland), 20-22 Nov (1985).
- [۸] K. Heydorn and K. Andresen. Neutron transmutation doping of silicon at Risoe National Laboratory, IAEA-TECDOC-No.456, (1988).
- [۹] A.W. Carbonari, W. Pend Jr., J.R. Sebastião, R.N. Saxena and M.S. Dias. An irradiation rig for neutron transmutation doping of silicon in the IAEA-R1 research reactor, Nuclear Instrument and Method B, 83(1993) 157-162.
- [۱۰] A. Pazirandeh, G.R. Aslani and N. Shadan-poo. Silicon doping and trace element measurement by neutron activation technique, Inorganic, organic, physical and analytical chemistry (B1110) conference, (1992).
- [۱۱] N. Takemoto, N. Romanova, N. Kimura, S. Gizatulin, T. Saito, A. Martyushov, D. Nakipov, K. Tsuchiya and P. Chkrov. Irradiation Test with Silicon Ingot for NTD-Si Irradiation Technology, (JAEA-Technology, 2015).
- [۱۲] B. Munkhbata and T. Obara. Design concept of a small nuclear reactor for large-diameter NTD-Si using a conventional PWR full-length fuel assembly, Journal of Nuclear Science and Technology, 49(2012) 535-543.
- [۱۳] D.B. Pelowitz. Users' manual versión of MCNPX2.6.0, LANL, LA-CP-07-1473, (2008).
- [۱۴] J.K. Shultz and R.E. Faw. An MCNP primer Dept. of Mechanical and Nuclear Engineering, Kansas State University, copyright (2004-2010).
- [۱۵] J.F. Briesmeister. MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport code Version4C, Los Alamos National Laboratory Report, USA, LA-13709-M (2000).