



ارزیابی تغییرات جریان نشتی دیود سیلیکونی در معرض تابش نوترون‌های راکتور با

استفاده از محاسبات دینامیک مولکولی

سارا شوریان^۱، حمید جعفری*^۱، سید امیر حسین فقهی^۱

^۱ دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی هسته ای

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۴/۱۶

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۱۱/۱۶

مکیده

در این کار تغییرات جریات نشتی در یک دیود سیلیکونی، به عنوان آرایه اصلی بسیاری از قطعات الکترونیکی، در معرض تابش نوترون‌های یک راکتور نوعی مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور تعیین طیف PKA از کد مونت کارلوی MCNPX برای محاسبه اتلاف انرژی غیریونیزان در قطعه استفاده شده است. در این کار از رویکرد محاسبات دینامیک مولکولی برای بدست آوردن تعداد نقص‌های ایجاد شده ناشی از برخورد طیف نوترون‌های راکتور در یک قطعه دیود سیلیکونی استفاده شده است. شبیه‌سازی پارامترهای الکتریکی این قطعه و بررسی تغییرات آن‌ها در معرض نوترون‌های راکتور نیز توسط نرم‌افزار سیلوکو انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که جریان نشتی با برخورد نوترون‌ها با محتملترین انرژی PKA در حدود $6/82$ برابر مقدار آن قبل از تابش افزایش پیدا کرده و به حدود $3/54 \text{ nA}/\mu\text{m}$ می‌رسد.

واژه‌های کلیدی: جریان نشتی، دیود سیلیکونی، سیلوکو، دینامیک مولکولی، MCNPX، طیف نوترون راکتور

۱- مقدمه

باعث بروز نقص‌هایی در آنها می‌شود. اتلاف انرژی غیریونیزان^۱ (NIEL) پرتو فرودی ممکن است باعث جابجایی اتم‌های سیلیکون از جای خود در شبکه و تولید یک اتم بین‌نشین و یک تهی‌جا (جفت فرنکل) شود. به اتمی که به دلیل تابش از جای خود در شبکه جابجا شده است، PKA^۲ گفته می‌شود. اگر انرژی PKA به اندازه کافی بزرگ باشد، باعث جابجایی اتم‌های سیلیکون دیگری از جایگاه خود در شبکه می‌شود و آبخاری از نقص‌ها تولید می‌کند. این نقص‌ها سبب تولید سطوح جدید انرژی در باند ممنوعه می‌شوند (Honniger, 2008) (Shoorian et al., 2019). از مهم‌ترین اثرات مراکز نقص ناشی از تابش بر خواص

دیودها ساده‌ترین ساختار نیمه‌هادی‌ها هستند که بدلیل عملکردشان در هدایت جریان الکتریکی، کاربردهای فراوانی دارند. از این جمله، کاربردهای معمول آن‌ها در آشکارسازهای سیلیکونی می‌باشد. آشکارسازهای سیلیکونی به عنوان آشکارساز نوترون برای راکتورهای آب سنگین تحت فشار طراحی شده‌اند. هرچند این آشکارسازها به خوبی توسعه یافته‌اند، افت عملکرد آن‌ها تحت تابش نوترونی غیرقابل اجتناب بوده و در شار بالای 10^{14} n/cm^2 بسیار جدی می‌باشد. وجود سطوح بالای پرتوهای برخورد کننده به کریستال سیلیکونی این ساختارها در محیط تابشی،

لارک هورویث^۶ اولین مطالعات اثرات آسیب جابجایی بر روی مواد و قطعات سیلیکونی را انجام دادند (Johnson, Lark—Horovitz, 1951). همچنین جی آر اسرور^۷ و همکارانش مطالعات عملی و آنالیزی تاثیرات آسیب دائمی ناشی از تک ذرات بر روی قطعات سیلیکونی را در سال ۱۹۸۳ انجام دادند. محاسبات افزایش جریان تاریک تولید شده توسط یک نوترون یا ذره آلفا که وارد ناحیه تخلیه قطعه می‌شود، نشان از وابستگی این آسیب به توزیع زاویه‌ای و انرژی PKA دارد. با ارائه نتایج مطالعات عملی، مدلی برای توصیف نتایج ارائه شده است که به بیان ارتباط جریان تاریک اضافی تولید شده توسط نوترون برخوردی به ازای هر اندرکنش می‌پردازد. آن‌ها در این کار برای پی بردن به اندرکنش نوترون با قطعات سیلیکونی از 100 مقاومت پینچ^۸ با ابعاد $2/3 \times 1/1 \times 2/5$ استفاده نموده‌اند. غلظت ناخالصی‌های این مقاومت‌ها حدود $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ بوده است. 90 قطعه از مقاومت‌ها توسط نوترون 14 MeV با شار $3 \times 10^{12} \text{ n/cm}^2 - 5 \times 10^{10}$ پرتودهی شدند. ده قطعه دیگر بدون پرتودهی باقی ماندند. اندازه‌گیری‌های بسیار دقیق پیش و پس از پرتودهی انجام پذیرفت. انحراف استاندارد بیان شده بصورت درصد از مقدار میانگین $0/1\%$ بوده است. جهت آنالیز نتایج بدست آمده از بررسی مقاومت‌ها، مدلی ارائه شد که نتایج ناشی از مدل ارائه شده با نتایج ناشی از مطالعات عملی کاملاً همخوانی نداشت. اما این آنالیز نشان داد مدل خوشه توزیع شده پیش‌بینی بهتری از نتایج عملی نسبت به مدل مبتنی بر محاسبات کد مارلو^۹ خواهد داشت (Srou et al., 1983).

اسرور به‌همراه پالکو^{۱۰} در سال ۲۰۰۶، به توصیف اثرات آسیب جابجایی با تاکید بر مهم‌ترین مکانیزم‌های آن، افزایش بازترکیب حامل و تولید حامل بدلیل سطوح ایجاد شده در شکاف انرژی سیلیکون بواسطه تابش، پرداخته‌اند. در این کار، رفتار رژیم انتقال NIEL از نقص‌های نقطه‌ای (برای مقادیر NIEL کمتر از $5 \times 10^{-5} \text{ MeV-cm}^2/\text{g}$) به نقص‌های زیرخوشه‌ای (برای مقادیر NIEL بزرگتر از $2 \times 10^{-4} \text{ MeV-cm}^2/\text{g}$)

الکتريکی دیود سیلیکونی تولید حرارتی جفت‌های الکترون-حفره در سطح نزدیک باند میانی، افزایش جریان ناشی، تغییر ولتاژ تخلیه و کاهش عمر حامل-های بار می‌باشد (Srou et al., 2003).

انگیزه اصلی برای مطالعه جدی در زمینه آسیب پرتویی ناشب از تابش‌های پرنرژی بر روی مواد جامد، از شروع ناگهانی فن‌آوری هسته‌ای در طول جنگ جهانی دوم آغاز شد. بنابراین نقطه آغازین در زمینه آسیب‌های پرتویی در سال ۱۹۴۳ می‌باشد. پیش از آن، مطالعات بسیاری در زمینه برهمکنش‌های پرتو با ماده صورت گرفته بود. در حقیقت، از زمان کشف پرتوهای ایکس و رادیواکتیویته طبیعی، کارهای زیادی در زمینه فیزیک مرتبط با تابش و مواد انجام شده بود که نهایتاً منجر به نظریه‌های جدیدی در زمینه ساختارهای اتمی و بلوری گردید. اکثر بررسی‌های اولیه در این زمینه، به علت وجود چشمه‌های کم انرژی و کم شدت، آسیبی در پی نداشته ولی در عین حال اثبات گردید که تابش می‌تواند بر شیمی برخی از مواد تاثیر گذار باشد. مطالعات آسیب جابجایی بر روی مواد تابش‌دهی شده، توسط ویگنر^۳ و همکارانش بطور تئوری و عملی در اوایل دهه ۱۹۴۰ میلادی آغاز شد (کار آسیب جابجایی در سده ۱۸۰۰ و اوایل ۱۹۰۰ نیز صورت پذیرفته است). از اوایل سال ۱۹۴۲، ویگنر متوجه شد که تابش‌دهی نوترون‌های سریع بر روی مواد بلوری می‌تواند موجب جابجایی اتم‌های شبکه آن‌ها شود. بنابراین این احتمال وجود داشت که این آسیب بر خواص فیزیکی میله‌های سوخت اورانیوم و کند کننده گرافیت در راکتور تاثیرگذار باشد (Billington, Crawford, 1961).

مولر^۴ در سال ۱۹۸۲ میلادی پیشنهاد داد که ساختار انتهایی مسیر برای تمامی آبشارهای آسیب در Si پرتودهی شده مشابه است و صرف نظر از انرژی ابتدایی PKA، معمولاً شامل ۲ تا ۳ زیرخوشه است. انرژی مازاد آسیب جابجایی در این مدل تنها صرف تولید نقص‌های نقطه‌ای در قسمت‌های ابتدایی تر مسیر حرکت می‌شود (Mueller et al., 1982). جانسون^۵ و

بر حسب افزایش اثر زیرخوشه‌ها با افزایش NIEL، مدل شده است. اشباع در مقادیر به نسبت بالای NIEL جایی که تعداد زیرخوشه‌های تولید شده بطور خطی با NIEL افزایش می‌یابد، اتفاق می‌افتد. شرایط عملی با NIEL‌های به نسبت ثابت با عمق نفوذ، ذرات تک انرژی با انرژی زیاد که برد آن‌ها در سیلیکون بسیار بزرگتر از ابعاد قطعه پرتودهی شده است، محقق شد. در چنین شرایطی می‌توان NIEL را معادل دز آسیب جابجایی در واحد شار ذره دانست (Srouf, Palko, 2006).

علی‌رغم دقت بیشتر روش تجربی، از آنجا که آزمایش‌های عملی هزینه زیادی داشته و زمانی طولانی برای اجرا نیاز دارند، با استفاده از شبیه‌سازی می‌توان در زمان و هزینه صرفه‌جویی نمود. همچنین از آنجا که مشاهدات تجربی شکل‌گیری نقص‌های نقطه‌ای ناشی از برخورد با بخاطر زمان بسیار کوتاه و مقیاس فضایی بسیار کوچک (ps, nm) تقریباً غیرممکن است، مدل-سازی شکل‌گیری نقص و شبیه‌سازی قطعه برای درک مکانیزم‌های پیچیده شکل‌گیری نقص و عملکرد ساختارهای تابش دیده ضروری است (Jafari, 2016) (Shoorian et al., 2019) (Hong Li et al., 2018).

در این کار از رویکرد محاسبات دینامیک مولکولی برای بدست آوردن تعداد نقص‌های ایجاد شده ناشی از برخورد طیف نوترون‌های راکتور در یک قطعه دیود سیلیکونی استفاده شده است. به منظور تعیین طیف PKA این برخوردها نیز کد مونت کارلوی MCNPX بکارگرفته شده است. در نهایت تغییرات جریان ناشی در قطعه دیود سیلیکونی ناشی از نقص‌های ایجاد شده در ساختار کریستالی قطعه نیز توسط نرم افزار سیلوکو^{۱۱} بدست آمده است.

۲- روش کار

با استفاده از دینامیک مولکولی (MD) که یک روش شبیه‌سازی کامپیوتری در مکان است، سیر تکامل زمانی یک مجموعه از واکنش‌های اتم‌ها توسط انتگرال‌گیری از معادله حرکتشان دنبال می‌شود.

شبیه‌سازی کامپیوتری با استفاده از MD می‌تواند اطلاعاتی از ساختمان و حالت نهایی ناهنجاری تولید شده در جانشین‌سازی آبخاری در فلزات و نیمه‌هادی‌ها که از روش‌های دیگر قابل دستیابی نیست را در اختیار قرار دهد. روش MD می‌تواند برای همه مراحل گاز، مایع و جامد و بین این سه فاز کاربردی باشد. روش MD کاربرد زیادی در مطالعه برهمکنش بین پرتو اتمی و سطح مواد دارد. این مطالعات روی نقص شبکه درون مواد متمرکز شده‌اند. در دینامیک مولکولی، قوانین مکانیک کلاسیک بخصوص قوانین حرکت نیوتون دنبال می‌شود. شبیه‌ساز MD در سیستم‌های شامل صدها یا شاید هزاران اتم و در محدوده زمانی از چندین پیکوثانیه تا صدها نانوثانیه عمل می‌کند.

روش دینامیک مولکولی معادلات حرکت نیوتونی را برای اتم‌ها با در نظر گرفتن گام‌های زمانی کوچک حل کرده و با استفاده از روش‌های عددی تقریبی مکان‌ها و سرعت‌های جدید اتم‌ها در هر مرحله را پیش‌بینی می‌کند. در مکان‌های جدید نیروهای اتمی مجدداً محاسبه شده و گام زمانی بعدی ایجاد می‌شود. در یک شبیه‌سازی نوعی، این فرآیند هزاران بار تکرار می‌گردد.

لمپس^{۱۱} یک کد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کلاسیک است که گروهی از ذرات، تا بیلیون‌ها ذره، را در حالت مایع، جامد یا گاز مدل می‌کند. این کد می‌تواند سیستم‌های اتمی، پلیمری، بیولوژیکی، فلزی، دانه‌ای و دانه درشت را با استفاده از میدان‌های نیرو و شرایط مرزی مختلف مدل کند. این کد در آزمایشگاه‌های ملی سندیا^{۱۲} با سرمایه‌گذاری DOE توسعه یافته است و یک کد منبع-باز^{۱۳} رایگان است. لمپس بر روی کامپیوترهای تک پردازنده به‌خوبی کار می‌کند ولی برای کامپیوترهای موازی طراحی شده است. این کد بر روی هر ماشین موازی که ++C را تالیف کرده و توانایی پشتیبانی از کتابخانه MPI را داشته باشد اجرا خواهد شد. در بیان عمومی، لمپس معادلات حرکت نیوتون را برای مجموعه‌ای از اتم‌ها، مولکول‌ها یا ذرات میکروسکوپی که توسط نیروهای کوتاه برد یا بلند برد

کارلوی MCNPX انتخاب شده است. بیشینه برد PKA درون ساختار کریستالی سیلیکون حدود ۵۴ آنگستروم، معادل حدود ۱۰ ثابت شبکه، بدست می‌آید. MCNPX یک کد ترابرد ذرات به روش مونت کارلو است که تمامی ذرات در انرژی‌ها مختلف را دنبال می‌کند (Waters, 2002). برای استخراج طیف PKA از این کد، طیف نوترون‌های یک راکتور تحقیقاتی که مشابه طیف نوترون‌های شکافت هستند (Zamani *et al.*, 2013)، به‌عنوان ورودی به MCNPX داده شده است.

شرایط مرزی متناوب به سیستم اعمال شده است. سیستم در ابتدا آرام^{۲۰} شده است که برای این آرام-سازی حدود ۲۱ ساعت با کامپیوتر ۶۴ هسته‌ای، تقریباً معادل ۱۳۴۴ ساعت اجرا با کامپیوتر تک هسته‌ای، زمان صرف شده است. برای آرام‌سازی سیستم از هنگرد nvt استفاده شده است تا با ثابت در نظر گرفتن دمای اتم‌ها که نماینده انرژی جنبشی آن‌ها می‌باشد، سیستم از نظر انرژی آرام شد. در این کار در اطراف جعبه شبیه‌سازی و به فاصله ۲ ثابت شبکه از هرطرف جعبه هنگرد nvt استفاده شده و سیستم در دمای ۳۰۰ درجه کلوین نگه داشته شده است. داخل جعبه شبیه‌سازی هنگرد nve اعمال شده است و تعداد نقص-ها بلافاصله پس از برخورد PKA تا ۸۷ ps پس از برخورد مورد بررسی قرار گرفتند. حدود ۰/۲ ps پس از برخورد نقص‌ها به بیشترین مقدار خود رسیده و پس از آن بدلیل بازترکیب تعداد نقص‌ها کاهش می‌یابد. بعد از گذشت حدود ۰/۵ ps تعداد نقص‌ها تقریباً ثابت شده و میانگین آن‌ها از این زمان تا ۸۷ ps بعنوان تعداد نقص نهایی مورد بررسی قرار می‌گیرد. سیستم دارای ۱۱۰۵۹۲ اتم و ساختار شبکه‌ای الماس‌گون است.

به منظور بدست آوردن جریان ناشی قطعه دیود سیلیکونی از نرم‌افزار شبیه‌سازی قطعات الکترونیکی سیلوآکو استفاده شده است. نرم‌افزار سیلوآکو یک برنامه کامپیوتری است که توانایی شبیه‌سازی قطعات الکترونیکی در دو و سه بعد را دارا می‌باشد. با این شبیه‌سازی می‌توان خواص الکتریکی مرتبط با ساختار فیزیکی

با شرایط ابتدایی و یا شرایط مرزی متفاوت اندرکنش انجام می‌دهند بکار می‌گیرد. برای بهبود بهره محاسبات لمپس از لیست‌های همسایگی^{۱۴} برای دنبال کردن ذرات نزدیک استفاده می‌کند (LAMMPS, 2018).

یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌شدت به انتخاب پتانسیل وابسته است چراکه پتانسیل اندرکنش هر ذره را تعیین و اداره می‌کند. برای سیستم‌های کوالانسی مانند سیلیکون، جهت‌گیری پیوند حائز اهمیت است. پتانسیل‌های زیادی با هدف توصیف سیلیکون توسعه یافته‌اند که در ادامه مرور مختصری بر مهم‌ترین پتانسیل‌های توصیف‌کننده سیلیکون انجام می‌شود. کاسیو^{۱۵} و لیویو^{۱۶} به مقایسه دو پتانسیل پرکاربرد Tersoff و sw برای سیلیکون پرداختند (Moura, Amaral, 2005). در نتیجه کار انجام شده، پتانسیل Tersoff در بازتولید پیکربندی آبشارهای بین‌نشین پیش‌بینی شده توسط محاسبات دارای عملکرد بهتری است. در مقایسه پتانسیل Tersoff با ReaxFF که توسط مارکوس^{۱۷}، آدری^{۱۸} و ویلیام^{۱۹} انجام شد، نشان داده شد که در تنش‌های کم هر دو پتانسیل دارای رفتار مشابهی می‌باشند اما پتانسیل ReaxFF دارای هزینه محاسباتی دو برابر Tersoff است (Buehler, 2006). پتانسیل Tersoff یک پتانسیل جفت‌گونه ساده است که در آن چگونگی پیوندها به محیط پیرامون آن‌ها بستگی دارد. این پتانسیل قادر به پیش‌بینی فازهای پایدار سیلیکون مکعبی با ساختار الماس‌گون است. اما برای فواصل کوتاه اتمی دقت لازم را ندارد، لذا برای فواصل کوتاه اتمی از پتانسیل کوتاه برد ZBL استفاده می‌شود. در این کار از پتانسیل tersoff/zbl استفاده شده است. این پتانسیل اتصالی آسان از پتانسیل دافعه ZBL برای فواصل کوتاه بین اتمی با پتانسیل Tersoff برای فواصل اتمی بزرگتر است. ابعاد سیستم $24a \times 24a \times 24a$ است که a در آن ثابت شبکه بوده و مقدار آن برای سیلیکون برابر $5/431$ آنگستروم می‌باشد. این ابعاد با توجه به انرژی‌های انتخاب شده برای PKA و محاسبات برد آن‌ها در سیلیکون با استفاده از کد مونت

بررسی اثر PKA بر ساختار کریستال توسط برنامه لمپس محاسبه شده و تعداد و مکان نقص‌های ایجاد شده با نرم‌افزار اویتو^{۲۲} قابل بررسی است.

مدل بصورت یک دیود سیلیکونی نوع p با ابعاد سطح مقطعی $285 \times 160 \mu\text{m}^2$ و دوپینگ بور 1×10^{12} تعریف می‌شود که شرایط بایاس $V = 600 - 0$ به آن اعمال شده است. ساختار هندسی دیود سیلیکونی نوع p شبیه‌سازی شده در شکل ۱ آورده شده است.

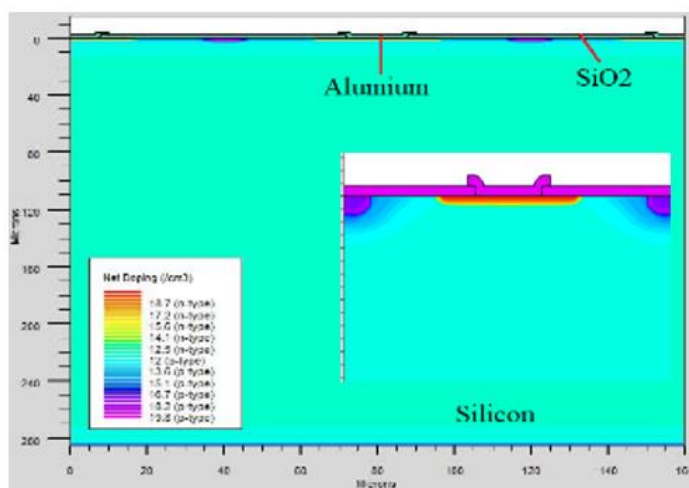
آسیب‌های پرتویی در سیلیکون ناشی از ذراتی که انرژی آن‌ها از انرژی آستانه جابجایی بیشتر است (حدود 20 eV) می‌باشد چراکه این ذرات باعث خروج اتم سیلیکون از جایگاه خود در شبکه و تولید یک PKA می‌شوند. نقص‌های ایجاد شده در شبکه سیلیکونی سبب تغییر برخی خواص الکتریکی قطعه می‌شوند.

یکی از مهمترین پارامترهای الکتریکی تاثیرگذار در خروجی یک دیود سیلیکونی، جریان نشتی آن می‌باشد که با بوجود آمدن مراکز بازترکیب با سطوح جدید انرژی در باند ممنوعه ناشی از ذرات فرودی، افزایش پیدا می‌کند. بنابراین باعث افزایش در تولید گرمایی حامل‌های بار می‌شود. این فرآیند در شبیه‌سازی برحسب تصحیح طول عمر حامل‌های اقلیت تعریف می‌شود که ترم تولید-بازترکیب گرمایی SRH در معادلات پیوستگی حامل‌های بار را کنترل می‌نماید (Shockley, 1952).

و شرایط بایاس معین را با معادلات برگرفته از قوانین ماکسول پیش‌بینی نمود (Silvaco, 2004).

این برنامه توزیع ابتدایی پارامترهای فیزیکی را محاسبه نموده و رفتار الکتریکی قطعات را در حالت پایدار، گذرا یا شرایط سیگنال کوچک پیش‌بینی می‌کند. این پیش‌بینی با حل معادله پواسون و معادلات پیوستگی حامل در دو بعد انجام می‌شود. S-Pisces معادلات پایه نیمه‌هادی را بر شبکه‌های مثلثی غیر یکنواخت حل می‌کند. مشخصه‌های آرایش و ساختار قطعه ممکن است از توابع، داده‌های اندازه‌گیری شده بصورت عملی یا برنامه‌های مدل‌سازی فرآیند بدست آیند. ATLAS رفتار الکتریکی ساختار نیمه‌هادی را پیش‌بینی نموده و دیدگاهی راجع به مکانیزم‌های فیزیکی مربوط به عملکرد قطعه می‌دهد. این پیش‌بینی رفتار با اعمال شبکه‌بندی بدست می‌آید. با اعمال معادلات دیفرانسیلی بدست آمده از قوانین ماکسول به این شبکه رفتار الکتریکی قطعه را می‌توان شبیه‌سازی نمود.

برای بررسی اثر نقص‌ها بر خواص ماکروسکوپی قطعه از قبیل جریان نشتی و ظرفیت خازنی آن، باید از دستور trap استفاده نمود. استفاده از این دستور نیازمند بکارگیری مدل SRH^{21} است. طول عمر حامل‌ها به چگالی نقص‌ها وابسته است که این چگالی پس از برخورد PKA، از تقسیم تعداد نقص‌های ایجاد شده در کریستال بر حجم کریستال بدست می‌آید.

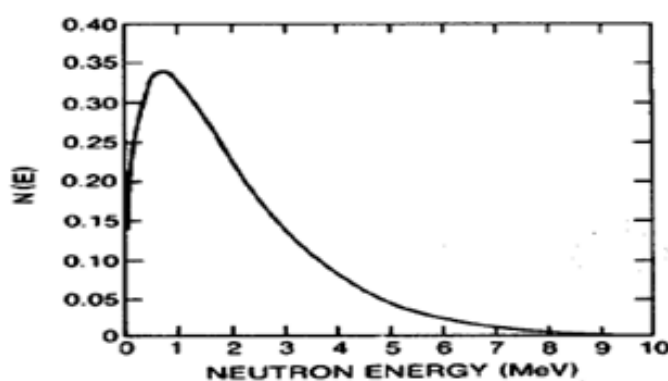


شکل ۱- ساختار دیود سیلیکونی نوع p شبیه‌سازی شده توسط نرم‌افزار سیلواکو

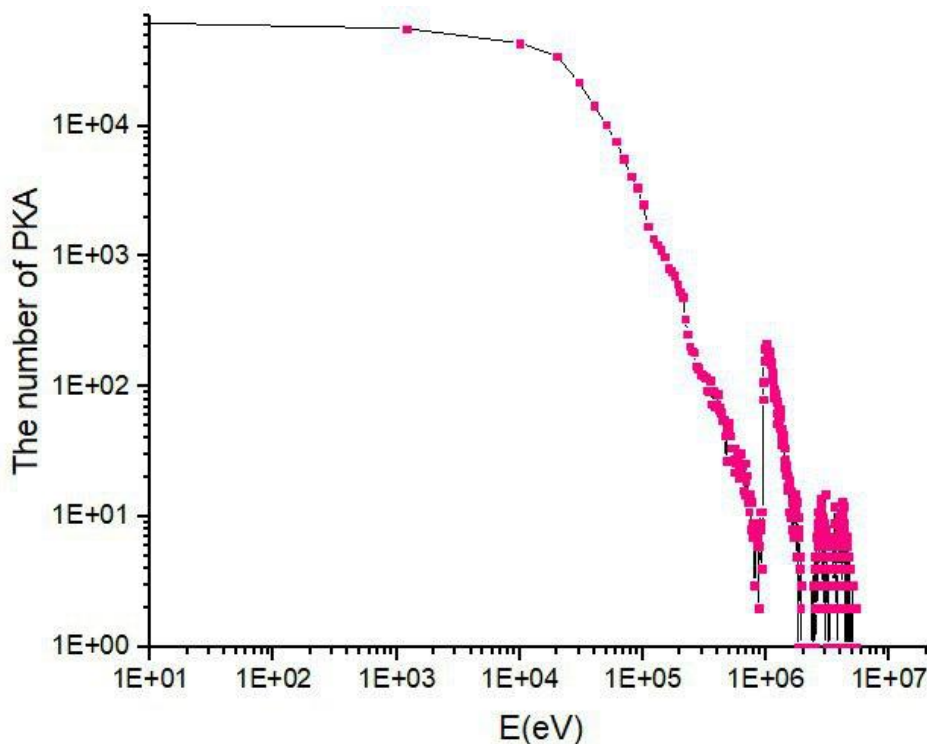
۳- نتایج و بحث

همان‌گونه که طیف PKA ناشی از برخورد طیف نوترون‌های راکتور (شکل ۲) با شبکه سیلیکونی که توسط نرم‌افزار MCNPX بدست آمده است، در شکل ۳ نشان می‌دهد، ایجاد PKAهایی با انرژی ۱ keV بسیار محتمل است. لذا در این کار به بررسی اثر این PKAها بر جریان ناشی قطعه پرداخته شده است. تعداد متوسط نقص‌های پایدار شکل‌گرفته توسط PKAی با این انرژی توسط نرم‌افزار لمپس حدود ۲۵

جفت محاسبه می‌شود که در جدول ۱ آمده است. تغییرات تعداد نقص‌ها بر اساس زمان در شکل ۴ نمایش داده شده است. نقص‌های ایجاد شده درون کریستال به سبب برخورد PKA با انرژی ۱ keV توسط نرم‌افزار اویتو^{۲۳} در شکل ۵ نشان داده شده است که نقص‌های آبی رنگ نشان‌دهنده تهی‌جاها و نقص-های قرمز رنگ نشان‌دهنده اتم‌های بین نشین می‌باشند.



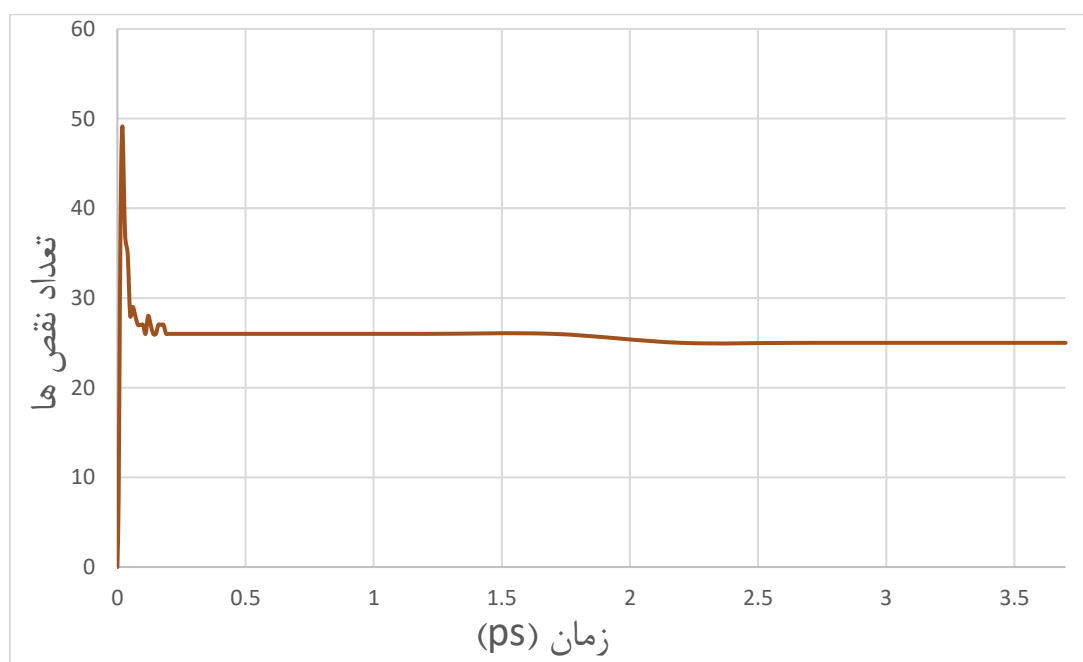
شکل ۲- تقریبی از طیف نوترون‌های آبی راکتور (Bell, Glasstone, 1970)



شکل ۳- طیف PKAهای تولید شده در سیلیکون در اثر برخورد نوترون‌های راکتور

جدول ۱- تعداد و چگالی نقص‌های ایجاد شده در کریستال سیلیکون بر اثر برخورد PKA با انرژی ۱ keV

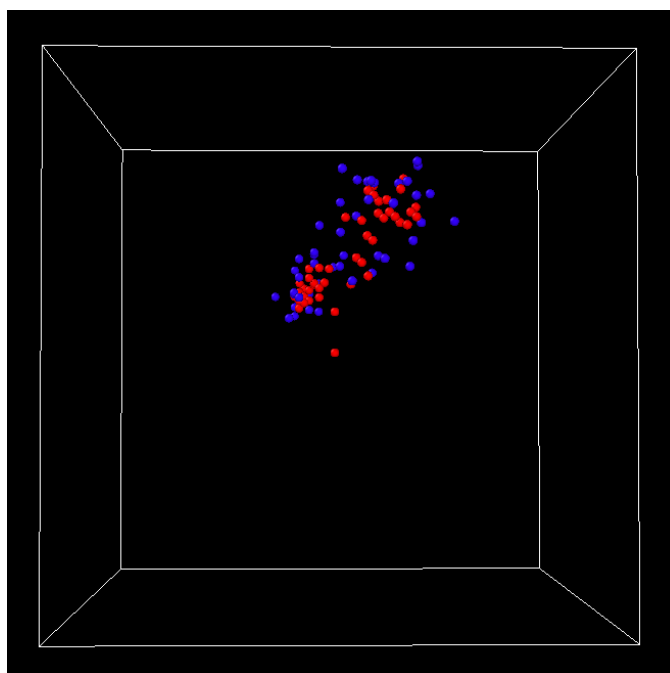
چگالی (#/cm ³)	تعداد متوسط نقص‌ها	انرژی (eV)PKA
4.51×10^{17}	1	50
9.03×10^{17}	2	100
1.35×10^{18}	3	200
6.32×10^{18}	14	500
1.12×10^{19}	25	1000
1.76×10^{19}	39	2000



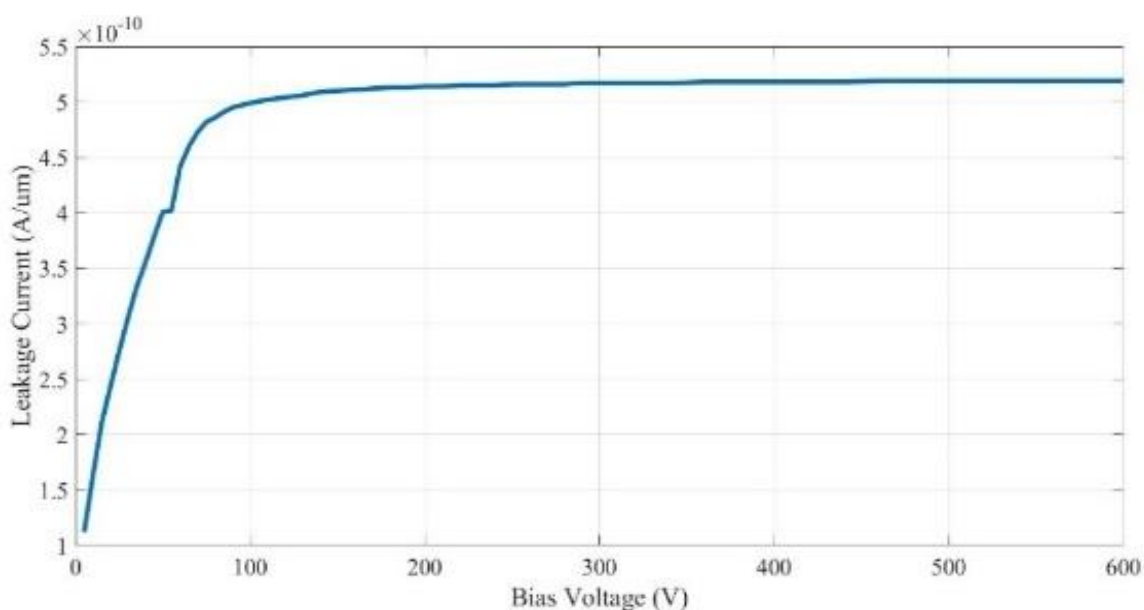
شکل ۴- تغییرات تعداد نقص‌ها با زمان برای PKA با انرژی ۱ keV

سازی شده بر حسب بایاس معکوس اعمال شده قبل از پرتودهی در شکل ۶ نشان داده شده است. ملاحظه می‌شود که جریان نشتی با افزایش بایاس، افزایش یافته و در مقادیر بالاتر از ۹۰ ولت با دقت ۴/۶٪ تقریباً ثابت باقی مانده است. این مقدار جریان نشتی در حدود ۰/۵۲ nA در هر میکرومتر از قطعه می‌باشد. رفتار کیفی تغییرات جریان نشتی قطعه شبیه‌سازی شده، مشابه با نتایج بدست آمده از کارهای پژوهشی دیگر بر روی یک دیود سیلیکونی می‌باشد (Topper *et al.*, 2017).

تغییرات جریان نشتی دیود سیلیکونی شبیه‌سازی شده بر حسب بایاس معکوس اعمال شده قبل از پرتودهی در شکل ۶ نشان داده شده است. ملاحظه می‌شود که جریان نشتی با افزایش بایاس، افزایش یافته و در مقادیر بالاتر از ۹۰ ولت با دقت ۴/۶٪ تقریباً ثابت باقی مانده است. این مقدار جریان نشتی در حدود ۰/۵۲ nA در هر میکرومتر از قطعه می‌باشد. رفتار کیفی تغییرات جریان نشتی قطعه شبیه‌سازی شده، مشابه با نتایج بدست آمده از کارهای پژوهشی دیگر بر روی یک دیود سیلیکونی می‌باشد (Topper *et al.*, 2017). تغییرات جریان نشتی دیود سیلیکونی شبیه-



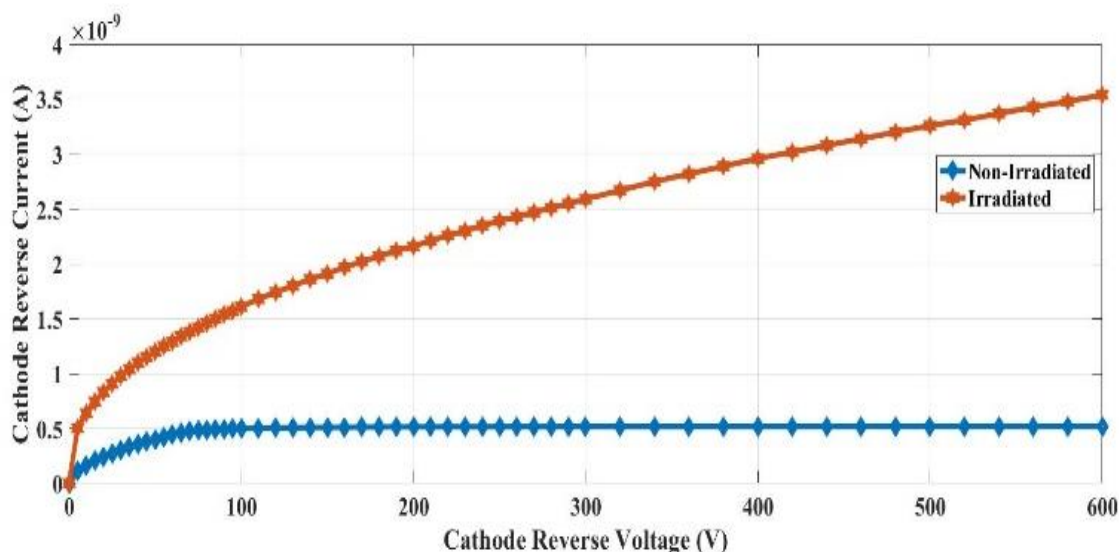
شکل ۵- نقص‌های ایجاد شده توسط PKA با انرژی 1 keV



شکل ۶- منحنی جریان-ولتاژ دیود نمونه قبل از تابش

ایجاد نقص در شبکه، از آن‌جا که ساختار کریستالی تغییر کرده و ترازهای جدیدی در ناحیه ممنوعه ایجاد می‌شوند، طول عمر حامل‌های اقلیت دست‌خوش تغییر شده که این امر سبب افزایش جریان نشتی در قطعه پرتودیده می‌شود.

تغییرات جریان نشتی بر حسب ولتاژ کاتد در شکل ۷ رسم شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود جریان نشتی پس از پرتودهی تقریباً به مقدار $3/5\text{ nA}$ رسیده که حدود $6/8$ برابر مقدار قبل از تابش - $0/5\text{ nA}$ - است. با برخورد PKA به ساختار کریستالی سیلیکون و



شکل ۷- تغییرات جریان آند بر حسب ولتاژ کاتد قبل و پس از برخورد PKA

۴- بحث و نتیجه‌گیری

برخورد پرتو به اتم‌های سیلیکون و اتلاف انرژی غیر یونیزان سبب خروج اتم سیلیکون از جایگاه خود در شبکه و تولید یک PKA می‌شود. نقص‌های ایجاد شده در شبکه سیلیکونی سبب تغییر برخی خواص الکتریکی قطعه سیلیکونی می‌شوند. نقص‌ها بسته به تراز انرژی آن‌ها در گاف انرژی، پارامترهای ماکروسکوپی قطعه را دچار تغییر می‌کند. الکترون‌ها می‌توانند از لایه ظرفیت به تراز نقص برانگیخته شده و از آن‌جا با محرک حرارتی بسیار راحت‌تر از گذار مستقیم به باند هدایت بروند. به همین دلیل، ترازهای انرژی نزدیک به مرکز گاف انرژی تولید جفت‌های حامل بار آزاد کرده و سبب افزایش جریان ناشی پس از تابش می‌شوند.

محاسبات آسیب پرتویی برای PKA های ناشی از نوترون‌های طیف راکتور که توسط کد مونت کارلوی MCNPX محاسبه شده بودند، برای تعیین پارامترهای میکروسکوپی و ماکروسکوپی با استفاده از روش دینامیک مولکولی انجام پذیرفت. سپس با استفاده از محاسبات مولکولی (نرم افزار لمپس) اثرات

میکروسکوپی ناشی از تابش‌ها از قبیل تولید الکترون - حفره در درون شبکه‌ی کریستال شبیه سازی شد؛ پس از آن با استفاده از داده‌های بدست آمده و وارد کردن این اثرات در شبکه کریستال و شبیه سازی ماکروسکوپی قطعه بوسیله نرم افزار سیلواکو به بررسی تغییرات مشخصه‌های قطعه تابش دیده شده، پرداخته شد. نتایج بدست آمده از محاسبه جریان ناشی یک دیود سیلیکونی نوع p در معرض طیف نوترون‌های راکتور نشان می‌دهد که جریان ناشی برای PKA با انرژی ۱ keV که محتمل‌ترین انرژی برای طیف نوترون‌های راکتور است ۶/۸۲ برابر مقدار آن قبل از تابش افزایش پیدا می‌کند و به حدود ۳/۵۴ nA/μm می‌رسد. بنابراین استفاده از آشکارسازهای سیلیکونی در معرض تابش‌های نوترونی نیازمند اصلاحاتی در خروجی قابل مشاهده آن‌ها می‌باشد. در همین راستا می‌توان محاسبات بیشتری نیز به منظور بررسی دیگر آسیب‌های پرتویی تاثیرگذار در عملکرد صحیح این قطعات مانند دز یونیزان کل و اثر تک رخدادی و همچنین تاثیر دیگر پرتوها با استفاده از این روش، انجام داد

پی نوشت ها

- ¹ Non-Ionizing Energy Loss
- ² Primary Knock on Atom
- ³ Wigner
- ⁴ Mueller
- ⁵ Johnson
- ⁶ Lark-Horovitz
- ⁷ J.R. Srour
- ⁸ pinch
- ⁹ MARLOW
- ¹⁰ J.W Palko
- ¹¹ SILVACO
- ¹² Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
- ¹³ Sandia National Laboratories
- ¹⁴ Open-source
- ¹⁵ Neighbor lists
- ¹⁶ Cassio Stein Moura
- ¹⁷ Livio Amaral
- ¹⁸ Markus J. Buehler
- ¹⁹ Adri C. T. van Duin
- ²⁰ William A. Goddard
- ²¹ Relax
- ²² Shockley-Read-Hall
- ²³ Ovito

مراجع

- Jafari, H., Fegghi, S.A.H., 2016. Analytical modeling for gamma radiation damage on silicon photodiodes, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, Volume 816, Pages 62-69.
- Johnson, V. A., Lark—Horovitz, K., 1951, The Combination of Resistivities in Semiconductors. Physical Review. 82, 977.
- LAMMPS Users Manual. 2017 version . Sandia National Laboratories.
- Moura, C. S., Amaral, L., 2005. Molecular dynamics simulation of silicon nanostructures. Nucl Instrum Meth B 228:37-40.
- Mueller, G. P., Wilsey, N. D., Rosen, M., 1982, The Structure of Displacement Cascades in Silicon. IEEE Transactions on Nuclear Science, vol. 29, issue 6, pp. 1493-1497
- Bell, G. I., Glasstone, S., 1970. Nuclear Reactor Theory, Van Nostrand Reinhold, New York
- Billington, D. S., Crawford, J. H., 1963, Radiation Damage in Solid. Proceedings Series - International Atomic Energy Agency.
- Buehler, M. J., van Duin, A.C. T., Goddard, W. A., 2006, Multiparadigm Modeling of Dynamical Crack Propagation in Silicon. Phys Rev Lett. 10; 96(9)
- Hong Li, A., et al., 2018, The evolution of interaction between grain boundary and irradiation-induced point defects: Symmetric tilt GB in tungsten. Journal of Nuclear Materials, Volume 500. Pages 42-49.
- Honniger, F., 2008. Radiation Damage in Silicon - Defect Analysis and Detector Properties. PhD-Thesis. University of Hamburg, DESY.

- Shockley, W., Read, W.T., 1952. Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons. *Physical Review*. 87, 835
- Shoorian, S., Jafari, H., Feghhi, S. A. H., 2019, Investigating and Calculating of Silicon Displacement defect due to irradiation on Photodiodes Using Carrier Lifetime Changes. *ICOP & ICPET*.; 25 :173-176
- Shoorian, S., Jafari, H., Feghhi, S. A. H., 2019, Investigating and calculating the leakage current of silicon diode exposed to sputtering of protons using carrier lifetime changes. 25th Iranian Nuclear Conference; 25. Islamic azad university Bushehr.
- Silvaco User's Manual, In:ATLAS, Ed., 2000.Santa Clara,United States.
- Srour, J. R., Z., Shanfield, R. A., Othmer, S., Newberry, D. M., 1983, Permanent Damage Introduced by Single Particles Incident on Silicon Devices. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, vol. 30, no. 6, pp. 4526-4532
- Srour, J. R., Marshall, J., Marshall, W., 2003, Review of Displacement Damage Effects in Silicon Devices. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, vol. 50, NO. 3.
- Srour, J. R., Palko, J. W., 2006, A Framework for Understanding Displacement Damage Mechanisms in Irradiated Silicon Devices. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, vol. 53, no. 6, pp. 3610-3620
- Topper, A. D., et al., 2017. Compendium of Current Total Ionizing Dose and Displacement Damage Results from NASA Goddard Space Flight Center and NASA Electronic Parts and Packaging Program, *IEEE Radiation Effects Data Workshop (REDW)*, New Orleans, LA, 2017, pp. 1-11.
- Waters, L. S., 2002, "MCNPX User's Manual Version 2.4.0," Los Alamos National Laboratory report, LA-CP-02-408 .
- Zamani, M., Khalafi, H., Shayesteh, M., 2013. Calculation Of Neutron Flux And Spectrum In Three North Beam Tubes Of Tehran Research Reactor For Bnct, By MCNP, *Iranian Journal Of Radiation Safety And Measurement*. Volume 1 , Number 3; Page(s) 41 – 45.



Evaluation of leakage current variations of silicon diode irradiated by reactor neutrons using molecular dynamic calculations

S. Shoorian¹, H. Jafari^{1*}, S.A.H Fegghi¹

¹Nuclear Engineering Department, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran

Received: 6 - 7 - 2020

Accepted: 4 - 2 - 2020

Abstract

In this work, the leakage current variation of a silicon diode, as the basic element of many electronic components, has been investigated in the exposure by neutron spectrum of a typical thermal reactor. To determine the PKA spectrum, the MCNPX Monte Carlo code has been used to calculate the non-ionizing energy loss in the device. Molecular Dynamic Calculations are used to determine the number of reactor neutron induced defects in a silicon diode. The simulation of electrical parameters for irradiation of reactor neutron was also done by SILVACO software. The results show that the leakage current increases by about 6.82 times the amount of it before irradiation, up to about 3.54 nA/ μ m by the exposure of neutrons.

Keywords: Leakage current, Silicon diode, SILVACO, Molecular dynamic, MCNPX, Reactor neutron spectrum
