

УДК 548.4:548.74

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ БЕТА-ВОЛЬТАИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЯ И ОБОГАЩЕННОЙ ПЛЕНКИ $^{63}\text{Ni}$

© 2019 г. М. А. Поликарпов<sup>1</sup>, Е. Б. Якимов<sup>2,3,\*</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, 142432 Черноголовка, Московская область, Россия

<sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет “МИСиС”, 119049 Москва, Россия

\*E-mail: yakimov@iptm.ru

Поступила в редакцию 20.06.2018 г.

После доработки 02.08.2018 г.

Принята к публикации 20.08.2018 г.

С помощью разработанной ранее методики предсказания параметров бета-вольтаических элементов проведены расчеты для элементов на основе радиоактивной пленки с обогащением по  $^{63}\text{Ni}$  (до 50%) и реальных кремниевых структур: барьера Шоттки Ni/n-Si и  $p^+ - n$ -диода. Методика включает расчет методом Монте-Карло зависимости скорости генерации бета-излучением неравновесных носителей заряда от глубины и экспериментальное определение в РЭМ вероятности их собирания для конкретных структур. Необходимость таких расчетов связана с разработкой новых возможностей обогащения никеля радиоактивным изотопом. Получены реально достижимые значения тока короткого замыкания, напряжения холостого хода, коэффициента заполнения и мощности элемента, что позволит не только прогнозировать параметры таких элементов, но и оптимизировать их структуру. Показано, что наиболее целесообразно использовать в таких элементах оптимизированные  $p - n$ -переходы.

**Ключевые слова:** бета-вольтаический элемент, полупроводниковый преобразователь, ток короткого замыкания, напряжение холостого хода моделирование, вероятность собирания, РЭМ, изотоп Ni-63.

DOI: 10.1134/S0207352819040152

### ВВЕДЕНИЕ

Бета-вольтаические элементы на основе изотопа  $^{63}\text{Ni}$  с периодом полураспада 100.1 лет весьма перспективны в качестве долгоживущих источников тока для целого ряда применений [1–4]. В качестве одного из перспективных направлений их использования можно рассматривать их применение в распределенных источниках питания в микроэлектронных и микроэлектромеханических устройствах, при этом слой радиоактивного Ni может одновременно служить для электрического соединения элементов. В качестве достоинств  $^{63}\text{Ni}$  следует также отметить, что распадаясь, он превращается в стабильный изотоп  $^{63}\text{Cu}$ , а вследствие малых энергий бета-частиц  $^{63}\text{Ni}$  не требует разработки специальных экранирующих корпусов. Использование радиоактивных элементов с большим периодом полураспада увеличивает срок эксплуатации элементов, однако при этом уменьшается выделяемая мощность. Так, например, для радиоизотопа  $^{63}\text{Ni}$  удельная активность равна всего 59 Ки/г. Используемая технология получения  $^{63}\text{Ni}$  [5] достаточно слож-

ная и дорогостоящая, поэтому в большинстве случаев содержание  $^{63}\text{Ni}$  в источнике не превышает 20%. Применение лазерной технологии разделения изотопов в атомном паре (атомный вариант лазерной изотопной сепарации – АВЛИС) [6] может существенно удешевить данный процесс и получить источники с обогащением 50% и выше. Кроме того, такая технология позволяет напылять слой радиоизотопа на полупроводниковый преобразователь непосредственно в процессе разделения, что (в отличие от обычно используемого электрохимического осаждения) позволяет сохранить параметры преобразователя, либо создавать барьеры Шоттки в камере разделения изотопов. В этой связи возникла необходимость оценки параметров бета-вольтаических источников, созданных с использованием АВЛИС-технологии.

Для таких оценок в работе [7] была предложена методика, позволяющая оценить параметры бета-вольтаического элемента на основе реального полупроводникового преобразователя. В основе этой методики лежит моделирование методом

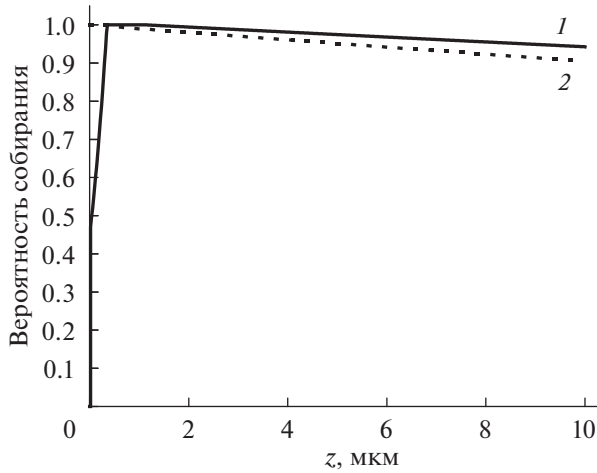


Рис. 1. Зависимости вероятности собирания от глубины, рассчитанные для  $n^+ - p$  (1) и барьера Шоттки (2).

Монте-Карло распределения скорости генерации неравновесных носителей заряда по глубине и измерение параметров преобразователя, необходимых для расчетов вероятности собирания, в растровом электронном микроскопе (РЭМ). Программа для моделирования методом Монте-Карло, разработанная в [8, 9], учитывала распределения бета-частиц по углам вылета, толщине радиоактивной пленки и по энергиям, а также поглощение в пленке радиоизотопа [10], что позволяло проводить более точные вычисления по сравнению с приближенными методами, использованными в работах [11–15]. В [16] эта методика была применена для расчета параметров бета-вольтаического элемента на основе кремниевого преобразователя и радиоактивного источника  $^{63}\text{Ni}$  с активностью 10 мКи/см<sup>2</sup>. Представляет интерес рассчитать, насколько повысится мощность бетавольтаического элемента при использовании источника, содержащего 50%  $^{63}\text{Ni}$ , и реального преобразователя на основе кремния, а также оценить параметры элемента с барьером Шоттки  $^{63}\text{Ni}/\text{Si}$ .

### РАСЧЕТ ТОКА КОРОТКОГО ЗАМЫКАНИЯ

Ток короткого замыкания  $I_{\text{сз}}$  в настоящей работе рассчитывался как интеграл по глубине  $z$  произведения скорости генерации неравновесных носителей заряда  $g(z)$  на вероятность собирания  $\psi(z)$ . Такая процедура была разработана для расчета тока, индуцированного электронным пучком, и используется для расчета сигнала в методе наведенного тока [17–20]:

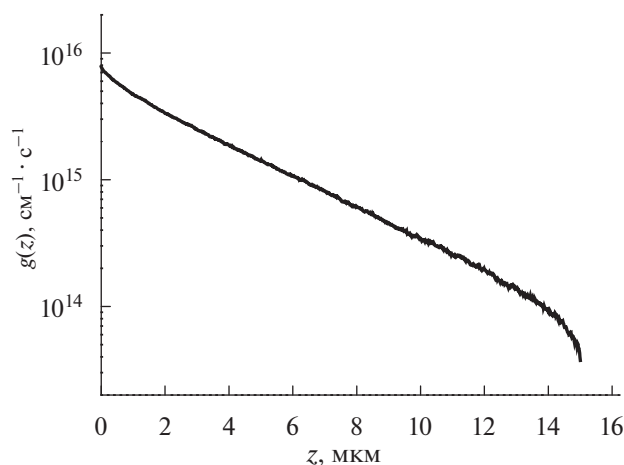
$$I_c = e \int_0^{\infty} \psi(z)g(z)dz. \quad (1)$$

Как показано в работе [17], вероятность собирания  $\psi(z)$ , которая представляет собой ток, индуцированный единичным зарядом на глубине  $z$ , может быть получена из решения однородного диффузионного уравнения:

$$\partial^2 \psi(z) / \partial z^2 - \psi(z) / L^2 = 0, \quad (2)$$

где  $L = (D\tau)^{0.5}$ ,  $D$ , и  $\tau$  – соответственно, диффузионная длина, коэффициент диффузии и время жизни неравновесных носителей заряда. В случае барьера Шоттки граничные условия:  $\psi(W) = 1$  и  $\psi(z) \rightarrow 0$  при  $z \rightarrow \infty$ , где  $W$  – ширина области пространственного заряда (ОПЗ) и  $\psi(z) = 1$  при  $z < W$ . Для  $p-n$ -перехода (помимо условий  $\psi(z) = 1$  при  $W_n \leq z \leq W_p$ , где  $W_n$  и  $W_p$  – границы ОПЗ в  $n$ - и  $p$ -областях соответственно, и  $\psi(z) \rightarrow 0$  при  $z \rightarrow \infty$ ) необходимо добавить граничное условие на поверхности  $D \partial \psi / \partial z = S \psi(z)$ , где  $S$  – скорость поверхностной рекомбинации, и учесть, что в общем случае значения  $L$  в  $n$ - и  $p$ -областях различаются. Все параметры, необходимые для расчета  $\psi(z)$  для любой полупроводниковой структуры, можно определить в растровом электронном микроскопе из подгонки зависимости индуцированного электронным пучком тока от энергии пучка [21, 22]. Расчеты проводились для барьера Шоттки на  $n\text{-Si}$  с  $L = 100$  мкм и  $W = 0.5$  мкм и  $n^+ - p$ -перехода, исследованного в работе [23], т.е. реального диода. Барьер Шоттки на  $n\text{-Si}$  был выбран в связи с тем, что при напылении Ni на  $n\text{-Si}$  формируется барьер Шоттки, и его параметры были описаны в литературе [24, 25].  $N^+ - p$ -переход представлял собой  $p-i-n$ -диод площадью 1 см<sup>2</sup> и в настоящей работе использовался в качестве примера реального преобразователя. Его параметры, определенные из подгонки зависимости наведенного тока от энергии пучка, имели следующие значения: диффузионные длины 100 и 0.5 мкм в  $p$ - и  $n^+$ -областях соответственно, глубина перехода и ширина ОПЗ 0.33 и 0.8 мкм соответственно, скорость поверхностной рекомбинации 30 см/с и толщина пассивирующего слоя SiO<sub>2</sub> 20 нм. На рис. 1 представлены вероятности собирания, рассчитанные для этих структур.

Скорость генерации определялась из потерь энергии электронов по глубине: делением на среднюю энергию генерации электронно-дырочной пары (3.6 эВ для Si). Потери энергии бета-частиц по глубине рассчитывались методом Монте-Карло с использованием программы, описанной в [8, 9]. Как было показано ранее в работе [8], для бета-вольтаического элемента на основе  $^{63}\text{Ni}$  ток короткого замыкания и выходная мощность практически насыщаются при толщине радиоактивной пленки порядка 3 мкм, поэтому для оценки максимальной мощности расчеты в настоящей работе проводились для такой толщины. Зависимости скорости генерации от глубины для барье-



**Рис. 2.** Зависимость скорости генерации неравновесных носителей заряда от глубины в Si, рассчитанная для радиоактивной пленки толщиной 3 мкм и содержащей 50%  $^{63}\text{Ni}$ .

ра Шоттки представлены на рис. 2. Для  $p-n$ -перехода зависимость была практически такой же, поскольку поглощение энергии бета-частиц в пассивирующем слое  $\text{SiO}_2$  толщиной 20 нм не превышало 0.1%, и им можно было пренебречь.

В предположении 50% обогащения удельная активность равна 29.5 Ки/г или 262.5 Ки/см<sup>3</sup>. При такой активности для барьера Шоттки на кремнии с диффузионной длиной  $L = 100$  мкм и  $W = 0.5$  мкм наши расчеты дали значение  $I_{sc} = 3.33 \times 10^{-7}$  А/см<sup>2</sup>, что составляет 98% от максимального значения для такой радиоактивной пленки. Для диода  $n^+-p$  было получено чуть меньшее значение ( $I_{sc} = 3.3 \times 10^{-7}$  А/см<sup>2</sup>). Это небольшое уменьшение  $I_{sc}$  обусловлено рекомбинацией неравновесных носителей заряда на поверхности и в  $n^+$ -слое.

### НАПРЯЖЕНИЕ ХОЛОСТОГО ХОДА И ВЫХОДНАЯ МОЩНОСТЬ

Для  $n^+-p$ -диода при  $I_{sc} = 1.26 \times 10^{-7}$  А/см<sup>2</sup>, соответствующего удельной активности источника 10 Ки/г, в работе [23] были получены значения напряжения холостого хода  $U_{oc} = 150$  мВ и коэффициента заполнения  $FF = 0.51$ . Повышение  $I_{sc}$  до  $3.3 \times 10^{-7}$  А/см<sup>2</sup> на такой структуре должно приводить к значениям  $U_{oc} = 175$  мВ и  $FF = 0.545$ . Тогда выходная мощность для бета-вольтаического элемента на базе такого преобразователя при условии, что преобразователь расположен только с одной стороны радиоактивной пленки, должна достигать 31.5 нВт/см<sup>2</sup>, что в 3.3 раза выше значения, рассчитанного в [23].

Для барьера Шоттки Ni/Si в работе [24] сообщалось о значении тока насыщения порядка 1 мкА/см<sup>2</sup>. В других работах этот ток был даже больше (например, [25]). Поэтому для барьера Шоттки Ni/Si  $U_{oc}$  вряд ли будет превышать 10 мВ, а, скорее всего, будет еще меньше. Поэтому можно ожидать, что мощность бета-вольтаического элемента на основе барьера Шоттки Ni/Si будет порядка 1 нВт/см<sup>2</sup>. В принципе, можно использовать барьер Шоттки с другим металлом, на который будет напыляться  $^{63}\text{Ni}$ , однако значения  $U_{oc}$  для барьера Шоттки практически всегда будут ниже значений для  $p-n$ -переходов. Поэтому более целесообразно напылять радиоактивный Ni в камере для разделения изотопов на оптимизированные  $p-n$ -переходы, что позволит в полной мере использовать повышенную активность радиоактивного источника, полученного АВЛИС-технологией.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе проведены расчеты параметров бета-вольтаических элементов на основе радиоактивной пленки с обогащением по  $^{63}\text{Ni}$  до 50% и реальных кремниевых структур, параметры которых приведены в литературе. Получены реально достижимые значения тока короткого замыкания, напряжения холостого хода, коэффициента заполнения и мощности элемента. Показано, что наиболее целесообразно использовать в таких элементах оптимизированные  $p-n$ -переходы.

### БЛАГОДАРНОСТИ

Работа, выполненная в Национальном исследовательском центре “Курчатовский институт”, частично поддержана РФФИ (грант 16-29-09459). Работа, выполненная в ИПТМ РАН, финансировалась в рамках Государственного задания № 007-01609-17-01.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пустовалов А.А., Гусев В.В., Заддэ В.В. и др. // Атомная энергия. 2007. Т. 103. С. 353.
2. Нагорнов Ю.С. Современные аспекты применения бетавольтаического эффекта. Ульяновск: УлГПУ, 2012. 113 с.
3. Prelas M.A., Weaver C.L., Watermann M.L. et al // Prog. Nucl. Energy. 2014. V. 23. P. 117.
4. Revankar S.T., Adams T.E. // J. Energy Power Sources. 2014. V. 1. P. 321.
5. Sosnin L.J., Suvorov I.A., Tcheltsov A.N. et al // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 1993. V. 334. P. 43.
6. Цветков Г.О., Дьячков А.Б., Горкунов А.А. и др. // Квантовая электроника. 2017. Т. 47. С. 48.
7. Yakimov E.B. // Appl. Radiat. Isotopes. 2016. V. 112. P. 98.

8. Павлов В.Н., Панченко В.Я., Поликарпов М.А. и др. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2013. № 9. С. 46.
9. Зайцев С.И., Павлов В.Н., Панченко В.Я. и др. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2014. № 9. С. 9.
10. San H., Yao S., Wang X. et al. // Appl. Radiat. Isot. 2013. V. 80. P. 17.
11. Liu Y., Tang X., Xu Z. et al. // Appl. Radiat. Isot. 2014. V. 94. P. 152.
12. Munson C.E., IV, Arif M., Streque J. et al. // J. Appl. Phys. 2015. V. 118. P. 105101.
13. Нагорнов Ю.С., Мурашев В.Н. // ФТП. 2016. Т. 50. С. 17.
14. Горбачевич А.А., Данилин А.Б., Корнеев В.И. и др. // ЖТФ. 2016. Т. 86. С. 94.
15. Булярский С.В., Лакалин А.В., Абанин И.Е. и др. // ФТП. 2017. Т. 51. С. 68.
16. Поликарпов М.А., Якимов Е.Б. // ФТП. 2015. Т. 49. С. 763.
17. Donolato C. // Appl. Phys. Lett. 1985. V. 46. P. 270.
18. Yakimov E.B., Privezentsev V.V. // J. Mater. Sci: Mater. Electron. 2008. V. 19. P. S277.
19. Yakimov E.B. // J. Alloys Compd. 2015. V. 627. P. 344.
20. Yakimov E.B. // Jpn. J. Appl. Phys. 2016. V. 55. P. 05FH04.
21. Якимов Е.Б. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2004. № 3. С. 65.
22. Yakimov E.B., Borisov S.S., Zaitsev S.I. // ФТП. 2007. Т. 41. С. 426.
23. Krasnov A.A., Legotin S.A., Murashev V.N. et al. // IOP Conf. Series: Mater. Sci. Engineer. 2016. V. 110. P. 012029.
24. Kiziroglou M.E., Zhukov A.A., Abdelsalam M. et al. // IEEE Transact. Magnetics. 2005. V. 41. P. 2639.
25. Yeganeh M., Rahmatallahpur Sh., Mamedov R.K. // Mater. Sci. Semicond. Processing. 2011. V. 14. P. 266.

## Modulation of Properties of Beta-Voltaic Elements Based on Silicon and Enriched $^{63}\text{Ni}$ Film

M. A. Polikarpov, E. B. Yakimov

Using the previously developed methods for predicting parameters of beta-voltaic elements the calculations for the elements based on the radioactive film enriched with  $^{63}\text{Ni}$  up to 50% and the real silicon structures: Ni/*n*-Si Schottky barrier and  $p^+-n$  diode were carried out. The procedure involves the Monte-Carlo calculation of depth-dependent rate of excess carrier generation by beta-radiation and an experimental determination in SEM the probability of their collection for concrete structures. The need for such calculations is associated with the development of new opportunities for the enrichment of Ni by the radioactive isotope. The achievable values of short-circuit current, open circuit voltage, fill factor and power of element were obtained that allows not only to predict the parameters of such elements, but to optimize their structure. It is shown that it is the most appropriate to use the optimized  $p-n$  junctions in such elements.

**Keywords:** beta-voltaic element, semiconductor converter, short-circuit current, open-circuit voltage, simulation, collection probability, SEM,  $^{63}\text{Ni}$  isotope.