



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

طراحی و شبیه‌سازی باتری رادیوایزوتوپی بر پایه دیود شاتکی PtSi/Si

مینا امیرمزلقانی^۱، حسین ذکی دیزجی^۲

^۱دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، دانشکده برق، گروه الکترونیک

^۲دانشگاه جامع امام حسین (ع)، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

۱- چکیده: در این مقاله، دیود شاتکی PtSi/Si بعنوان ساختاری جدید برای استفاده در باتری‌های رادیوایزوتوپی معرفی می‌شود. میدان الکتریکی ذاتی بین فلز و نیمه‌هادی سیلیکون در این قطعه، موجب جداسازی جفت الکترون-حفره تولید شده به سبب تابش‌های هسته‌ای، می‌شود. برای انجام شبیه‌سازی‌ها از نرم‌افزار TCAD-SILVACO استفاده شده است. برای ایجاد درک بهتر از کیفیت عملکرد دیود شاتکی PtSi/Si، ساختاری با ابعاد مشابه از دیود p-n نیز شبیه‌سازی شده و نتایج حاصل، با یکدیگر مقایسه شده‌اند. این نتایج نشان می‌دهند که دیود شاتکی PtSi/Si می‌تواند بازدهی بیشتری به میزان ۱/۵ تا ۸/۵ برابر دیود p-n داشته باشد. ساده بودن فرآیند ساخت دیود شاتکی، یکی دیگر از مزایای آن نسبت به دیود p-n است.

۲- کلیدواژه: باتری رادیوایزوتوپی، دیود شاتکی، دیود p-n

۳- مقدمه: تحقیقات بر روی تبدیل مستقیم انرژی ذرات بتا، آلفا و گاما به انرژی الکتریکی به روش‌های مختلفی در حال انجام است. از جمله آن‌ها می‌توان به باتری‌های "الکترودهای ولتاژ تماسی"^۱ و "باتری‌های بر پایه ساختارهای نیمه‌هادی" اشاره کرد. این ساختارهای بر پایه مواد نیمه‌هادی، بر اساس جدایی الکترون و حفره بوجود آمده، بوسیله میدان الکتریکی یک پیوند نیمه‌هادی، کار می‌کنند. ناحیه n باید بصورت منفی و ناحیه p بصورت مثبت شارژ شوند. برخورد هر ذره بتا به نیمه‌هادی می‌تواند ده‌ها هزار جفت الکترون-حفره تولید کند. بهمین دلیل، پیوندهای (p-n) می‌توانند تعداد کمی از ذرات پرنرژی بتا را به جریانی بسیار بیشتر از الکترون‌های کم انرژی تبدیل کنند. به بیانی دیگر، ذرات رادیواکتیو با انرژی زیاد، یک انتقال اندازه حرکت^۲ شدیدی با ماده انجام می‌دهند که منجر به تولید الکترون-حفره می‌شود [۱].

آنچه که این مقاله درصدد انجام آن است، ارائه یک ساختار جدید از مواد نیمه‌هادی به منظور جداسازی جفت الکترون-حفره ایجاد شده در ماده نیمه‌هادی است که بتواند بازدهی بالاتری را برای آن، فراهم آورد. ساختار نیمه-هادی رایج مورد استفاده در باتری‌های رادیوایزوتوپی، دیود p-n است که از میدان الکتریکی موجود در پیوند دو

¹ Contact Voltage Electrodes

² Momentum



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۷ و ۶ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

ماده p و n برای جداسازی الکترون-حفره استفاده می‌شود. در این مقاله استفاده از میدان الکتریکی ذاتی بین یک فلز و ماده نیمه‌هادی برای جداسازی حامل‌های نوری، پیشنهاد می‌شود. این ساختار، یک پیوند شاتکی بین ماده سیلیکون و فلز سیلیساید پتاسیم است که در اصطلاح با نام $PtSi/Si$ Schottky Diode شناخته می‌شود. دیود شاتکی $PtSi/Si$ ساختار ساده‌تری نسبت به دیودهای $p-n$ دارد و امکان ساخت آن در کشور براحتی فراهم است. از سویی دیگر، این دیود، می‌تواند بازده بالاتری برای باتری رادیوایزوتوپی فراهم کند زیرا، میدان الکتریکی ذاتی در آن، نسبت به دیود $p-n$ بیشتر است. احتمال جمع‌آوری الکترون-حفره در دیود شاتکی $PtSi/Si$ نیز نسبت به دیودهای $p-n$ ، بدلیل نزدیک بودن ناحیه تهی به سطح پیوند، بیشتر خواهد بود. در این مقاله، دیود شاتکی $PtSi/Si$ و نیز $p-n$ بر پایه نیمه‌هادی Si ، با استفاده از نرم‌افزار TCAD SILVACO شبیه‌سازی شده است، نمودارهای جریان-ولتاژ، نوار انرژی و جریان اتصال کوتاه تولید شده در باتری برای هر کدام از ساختارهای دیود $p-n$ و دیود $PtSi/Si$ اندازه‌گیری شده و در پایان، با هم مقایسه شده‌اند. استفاده از نرم‌افزار SILVACO در انجام شبیه‌سازی-های هسته‌ای، برای اولین در ایران در این مقاله ارائه می‌شود، ایده استفاده از این نرم‌افزار برای شبیه‌سازی ادوات هسته‌ای بر پایه مطالعه مقالات مختلف خارجی بوده است که در این زمینه به چاپ رسیده‌اند [۲]-[۷]. این نرم‌افزار امکانات متفاوت و زیادی را بطور همزمان برای کاربر فراهم می‌کند، بطوریکه ابتدا می‌توان ساختار نیمه‌هادی مورد نظر را شبیه‌سازی نمود و کلیه نمودارهای DC قطعه از جمله نمودارهای جریان-ولتاژ را در بایاسینگ‌های مختلف از قطعه، مشاهده نمود. در ادامه می‌توان در ساختار سه بعدی شبیه‌سازی شده، کلیه پارامترهای مختلف از جمله، پتانسیل الکتریکی در نقاط مختلف، شدت جریان الکتریکی، نرخ بازترکیب حامل‌های الکترون-حفره ایجاد شده و نوار انرژی و ناحیه تهی (تخلیه) در طول پیوند را مشاهده نمود. بنابراین پارامترهای بسیار زیادی در اختیار طراح قرار می‌گیرد که بتواند ساختار باتری طراحی شده را، بهینه نماید. پس از مشاهده کلیه پارامترهای موثر بر عملکرد باتری و بهینه‌سازی ساختار، می‌توان تابش‌های هسته‌ای را با شدت‌های مختلف و از جهت‌های هندسی متفاوت به قطعه تابانید و جریان اتصال کوتاه تولید شده در باتری را مشاهده نمود. همزمان امکان بررسی میزان نرخ بازترکیب جفت الکترون-حفره‌های ایجاد شده در طول پیوند نیز، قابل مشاهده و بررسی است.

در ادامه، در بخش "روش کار"، به توضیح مکانیزم عملکرد باتری رادیوایزوتوپی بر پایه دیود شاتکی $PtSi/Si$ و نیز علل برتری این ساختار، نسبت به سایر ساختارها پرداخته می‌شود. سپس در قسمت "نتایج"، نمودارها و نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی دو ساختار دیود شاتکی $PtSi/Si$ و دیود $p-n$ ارائه می‌شود و در پایان، در بخش "بحث و نتیجه‌گیری" نتایج بدست آمده از دو ساختار با یکدیگر مقایسه شده و پیشنهاداتی برای ادامه کار مطرح می‌شود.

۳- روش کار

برای بهبود و افزایش بازدهی تبدیل یک باتری رادیوایزوتوپی، عوامل مختلفی تاثیرگذار هستند که از این میان، سه عامل اساسی در تعیین بازدهی تبدیل یک باتری هسته‌ای نقش بیشتری دارند که عبارتند از: توان منبع ساطع کننده‌ی



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ و دانشگاه اصفهان

ذرات، نوع ماده نیمه‌هادی انتخاب شده و ساختار مورد استفاده برای جداسازی جفت الکترون-حفره. توان منبع ساطع کننده‌ی ذرات بتا، فاکتوری است که توسط متخصصین در زمینه فناوری‌های تولید و لایه‌نشانی مواد حاوی چشمه پرتوزای مشخص می‌شود و تعیین کننده‌ی پارامتر η_{β} (بازدهی) خواهد بود. اما از سویی دیگر انتخاب ماده نیمه‌هادی مناسب و همچنین ساختاری کارآمد برای به دام انداختن الکترون-حفره‌های بوجود آمده، عواملی هستند که باید از دیدگاه الکترونیک نیمه‌هادی‌ها بهینه شوند و موجب افزایش پارامتر $\eta_{\beta-e}$ در یک باتری هسته‌ای شوند. در واقع $\eta_{\beta-e}$ در یک باتری هسته‌ای مشخص می‌کند که ساختار بکار رفته در باتری، تا چه اندازه می‌تواند جفت الکترون-حفره‌های بوجود آمده در نیمه‌هادی را، در مدار خارجی جمع کند.

از آنجاییکه تولید نیمه‌هادی‌های با شکاف باند زیاد مانند GaN، SiC و GaP و . . . که در مقابل تابش‌های رادیواکتیو طول عمر بیشتری دارند و بازده آن‌ها نیز بیشتر است، نیاز به فرآیندهای پیچیده‌ای نظیر MOCVD دارند، بنظر می‌رسد تنها گزینه در دسترس برای تولید در داخل کشور، سیلیکون است. پس برای افزایش بازده دریافتی از باتری رادیوایزوتوپی، می‌بایست که ساختار باتری را به جای ماده تشکیل دهنده تغییر دهیم که در این مورد، در قسمت بعد صحبت خواهیم کرد.

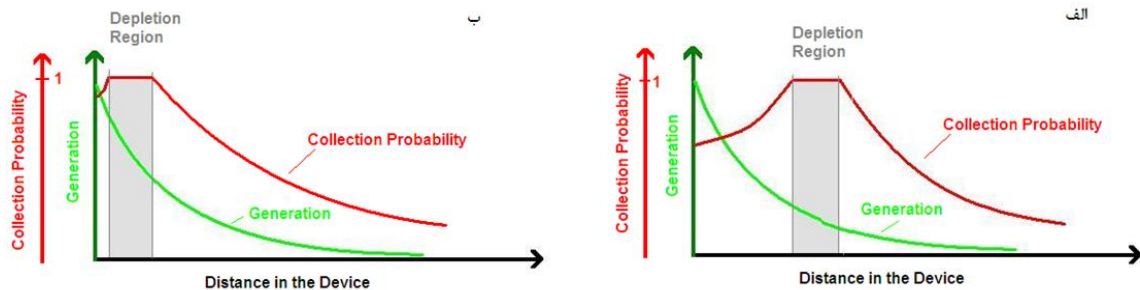
برای جداسازی الکترون-حفره‌ی ایجاد شده در داخل نیمه‌هادی، از میدان الکتریکی استفاده می‌شود و میدان الکتریکی پیوند p-n یکی از این میدان‌هاست. ساختارهای دو بعدی از دیودها، پاره‌ای نقص‌های ذاتی دارند که همین امر، بازده تبدیل انرژی در آن‌ها را به مقادیر کم محدود کرده است [۸ و ۱]. یک ساختار دیگری از نیمه‌هادی‌ها که بطور گسترده به عنوان آشکارساز استفاده می‌شود، پیوندهای شاتکی هستند. اتصال یک فلز و نیمه‌هادی می‌تواند ایجاد پیوند شاتکی کند که ساختار بسیار ساده‌تری نسبت به دیود p-n دارد و مکانیزم ساخت آن نیز بسیار ساده‌تر است و از دید امکانات ساخت داخل کشور نیز، در دسترس است. دیود شاتکی نیز دارای میدان الکتریکی ذاتی است که از آن به منظور جداسازی جفت الکترون-حفره ایجاد شده استفاده می‌شود [۹ و ۱۰]. دیودهای شاتکی در باتری‌های بتا و لثائیک نیز استفاده می‌شوند و همان‌طور که در مراجع مختلف مطرح می‌شود، بنظر می‌رسد که استفاده از سدهای شاتکی بین فلز و نیمه‌هادی برای جداسازی حامل‌های ایجاد شده، کارآمدترین راه برای تولید باتری‌های هسته‌ای بر پایه نیمه‌هادی‌ها است [۱].

یکی دیگر از مزایایی که پیوندهای شاتکی را برای کاربرد در باتری‌های رادیوایزوتوپی ایده‌آل می‌سازد، احتمال جمع‌آوری الکترون-حفره‌ی ایجاد شده بواسطه تابش در آن‌هاست. همان‌طور که از شکل ۱ مشخص است، میزان تولید حامل‌ها با فاصله گرفتن از سطح قطعه کم می‌شود، بنابراین هرچه ناحیه تخلیه به سطح نزدیک‌تر باشد، تعداد بیشتری از الکترون-حفره‌های ایجاد شده توسط میدان الکتریکی در ناحیه تخلیه جمع‌آوری می‌شوند و در نتیجه بازده تبدیل در باتری رادیوایزوتوپی بالا خواهد رفت.



بیست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان



شکل ۱: نحوه تولید حامل‌ها و هم‌چنین احتمال جمع‌آوری آن‌ها توسط میدان خارجی بر حسب تابعی از فاصله از سطح قطعه در (الف) دیود p-n و (ب) دیود شاتکی

همان‌طور که از شکل ۱ مشخص است، هرچه ضخامت ناحیه تخلیه بیشتر باشد، بازده و توان بدست آمده از باتری افزایش می‌یابد. از سویی دیگر هرچه ضخامت رادیواکتیو بکار رفته بیشتر باشد (که معادل افزایش انرژی و پیشروی بیشتر در نیمه‌هادی است)، می‌توان توان بدست آمده را افزایش داد. این بهبود کارایی با افزایش دادن عرض ناحیه تهی و یا ضخامت رادیواکتیو، تا جایی موثر خواهد بود که نرخ تولید الکترون-حفره خیلی کم نشده باشد، بدین معنی که افزایش ضخامت ناحیه تهی تا فواصلی بسیار دورتر از سطح قطعه فایده چندانی نخواهد داشت، زیرا نرخ تولید حامل‌ها در این نواحی به شدت کاهش پیدا کرده است. با توجه به مقدمه‌ای که در بخش‌های بالا در مورد دیود شاتکی و دیود p-n مطرح شد، در قسمت بعد به شبیه‌سازی و مقایسه این دو ساختار می‌پردازیم.

۴- نتایج

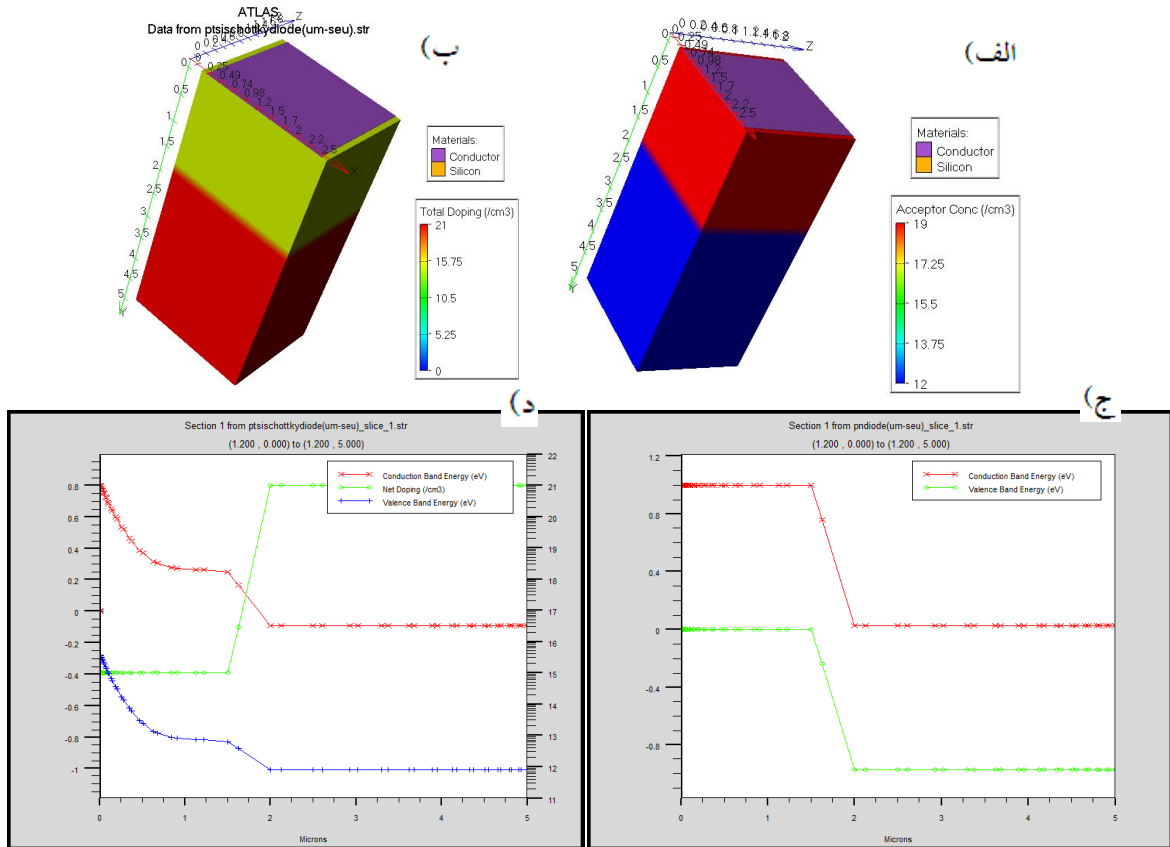
در این بخش می‌خواهیم دو ساختار p-n و دیود شاتکی که بعنوان باتری هسته‌ای استفاده می‌شوند را شبیه‌سازی کرده و نتایج بدست آمده را با هم مقایسه کنیم. برای مقایسه ساختارهای متفاوت ذکر شده، لازم است که ابعاد و مشخصات کلی این قطعات با هم برابر باشند، بنابراین لازم است که ابتدا یک قالب کلی برای مشخصات ظاهری قطعات توصیف کنیم و تا جایی که ممکن است این پارامترها را یکسان در نظر بگیریم. پارامترهای طراحی، همان‌طور که در زیر فصل پیش نیز توضیح داده شد، عبارتند از: ابعاد، میزان آلاینده‌گی، تابع کار فلز و بهینه کردن ساختار. در مورد ابعاد، شبیه‌سازی را از ابعاد نانومتری شروع کرده و طی سه مرحله، ابعاد را تا محدوده میکرومتر بالا بردیم، میزان آلاینده‌گی در دو حالت 10^{19} و 10^{21} اتم بر واحد حجم، در نظر گرفته شد که بهترین پاسخدهی برای دیود p-n در آلاینده‌گی 10^{19} و برای دیود شاتکی PtSi/Si در آلاینده‌گی 10^{21} اتم بر واحد حجم اتفاق افتاد. تابع کار فلز نیز برابر با $4/97$ الکترون-ولت که برابر است با تابع کار فلز PtSi در نظر گرفته شد. به منظور بهینه کردن ساختار نیز، از یک ناحیه با میزان آلاینده‌گی زیاد در پایین قطعه استفاده شد تا جریان‌دهی را افزایش دهد. شکل‌های ۲-الف تا



بست و یکمین کنفرانس هشتای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان

۲- به ترتیب ساختار سه بعدی دیود p-n، ساختار سه بعدی دیود شاتکی PtSi/Si، نمودار نوار انرژی برای دیود p-n و نوار انرژی برای دیود شاتکی PtSi/Si را نشان می‌دهند.



شکل ۲: الف) ساختار سه بعدی دیود p-n، ب) ساختار سه بعدی دیود شاتکی PtSi/Si، ج) نمودار نوار انرژی برای دیود p-n و د) نوار انرژی برای دیود شاتکی PtSi/Si

۵- بحث و نتیجه گیری

چنانچه تابش‌های رادیواکتیو با شدت‌های مختلف به این دو دیود تابانیده شود، در آن‌ها جریان اتصال کوتاه تولید می‌شود. این جریان که نشان دهنده تولید انرژی الکتریکی توسط باتری است، برای دو ساختار دیود p-n و دیود شاتکی PtSi/Si در شکل ۳ نشان داده شده است. برای مقایسه عددی، جریان اتصال کوتاه تولیدی در دو حالت با آلاینده‌های متفاوت ۱۰^{۱۹} و ۱۰^{۲۱} اتم بر واحد حجم، در جدول ۱ نشان داده شده است، در این حالت در نظر گرفته شده است که تابش‌های رادیواکتیو از سه جهت بالا، چپ با زاویه ۴۵ و راست با زاویه ۴۵ درجه به قطعات تابانیده شده باشد.

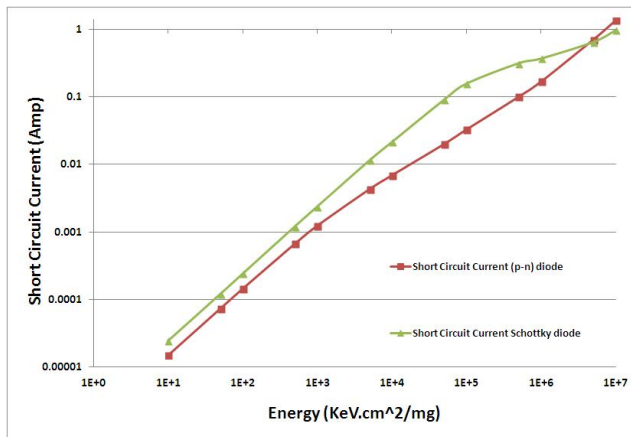
جدول ۱: نتایج شبیه‌سازی برای ساختار دیود شاتکی و دیود p-n، در دو حالت با آلاینده‌های متفاوت ۱۰^{۱۹} و ۱۰^{۲۱} اتم بر واحد حجم.

Dopping	Diode Type	I _{sc} (mA)
---------	------------	----------------------



بیست و یکمین کنفرانس هسته‌ای ایران

۶ و ۷ اسفند ماه ۱۳۹۳ دانشگاه اصفهان



10^{19}	p-n	22
	Schottky	32.6
10^{21}	p-n	12.2
	Schottky	103.5

شکل ۳: جریان اتصال کوتاه در ساختارهای دیود شاتکی و دیود p-n به منظور مقایسه.

با توجه به اعداد بدست آمده در جدول و نیز نمودارهای موجود در شکل ۳ و جدول ۱ به این نتیجه می‌رسیم که دیود شاتکی PtSi/Si می‌تواند بازدهی بیشتری به میزان ۱/۵ تا ۸/۵ برابر دیود p-n داشته باشد.

۶- مراجع

- [1] Bower Kenneth E., Barbanel Y. A., Shreter Y. G., "Polymers, Phosphors and Voltaics for Radioisotopes Micro batteries", CRC Press LLC, 2002.
- [2] Da-Yong Qiao, Xue-Jiao Chen, Yong Ren, and Wei-Zheng Yuan, "A Micro Nuclear Battery Based on SiC Schottky Barrier Diode", JOURNAL OF MICROELECTROMECHANICAL SYSTEMS, VOL. 20, NO. 3, JUNE 2011.
- [3] Ling Lv. et al, "Study of proton irradiation effects on AlGaIn/GaN high electron mobility transistors", Microelectronics Reliability 51 (2011) 2168–2172.
- [4] Howard, John N., "Thermophotovoltaic energy conversion in submarine nuclear power plants", Master Thesis, Monterey, California. Naval Postgraduate School, 2011.
- [5] Garrett Schlenvogt, "Total Dose Effects and Hardening-by-Design Methodologies", Master Thesis, ARIZONA STATE UNIVERSITY, 2010.
- [6] G. Lutz, "Semiconductor Radiation detectors", Berlin, Germany, Springer-Verlag, 1999.
- [7] P. Hazdraa, K. Brandb, J. Vobeck, "Defect distribution in MeV proton irradiated silicon measured by high-voltage current transient spectroscopy", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 192 (2002) 291–300.
- [8] Wei Sun, Nazir P.Kherani, Karl S. Hirschman, Larry L. Gadeken and Philippe M. Fauchet, "A Three-Dimensional Porous Silicon p-n Diode for Betavoltaics and Photovoltaics", Adv. Mater., 2005, 17, 1230-1233.
- [9] Farshid Raissi and Mansoor Mohtashami Far, "Highly Sensitive PtSi/Porous Si Schottky Detectors", IEEE Sensors Journal, 2002, 2(5), 476-481.
- [10] D. E. Mercer, "Platinum Silicide/Silicon Interface Studies," Stanford University, CA, United States, RL-TR-91-272, Final Technical Report, October 1991.