

افزایش قابلیت‌های شبیه‌سازی میکروباتری‌های بتاولتائیک با استفاده از کد ترکیبی MCNPX-SILVACO

پدرام ملکی^۱, غلامرضا اطاعی^{۲*}

۱. گروه فیزیک هسته‌ای، دانشکده علوم، دانشگاه مازندران، صندوق پستی: ۱۳۵۳۴-۴۷۴۱۶، مازندران - ایران

۲. دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، صندوق پستی: ۱۵۸۷۵-۴۴۱۳، تهران - ایران

*Email: etaati.reza@gmail.com

مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۸/۴/۲۵ | تاریخ پذیرش مقاله: ۹۸/۶/۳۰

چکیده

میزان دقت هر شبیه‌سازی عامل بسیار مهمی است که افزایش آن موجب به واقعیت نزدیکتر شدن نتایج آن شبیه‌سازی می‌گردد. هدف این مطالعه، بهبود دقت محاسبه پارامترهای باتری بتاولتائیک می‌باشد. بدین منظور ابتدا با استفاده از کد MCNPX توزیع انباشت انرژی ناشی از طیف ذرات بتای چشمۀ نیکل-۶۳ داخل نیمه‌هادی سیلیکون شبیه‌سازی گردیده، سپس با بهره‌بردن از یکی از قابلیت‌های کد سیلواکو (پارامتر F.RADIATE دستور BEAM) تابع متوجه در محیط C++ تعریف می‌شود. در انتهای نیز جهت محاسبه مشخصه‌های الکتریکی باتری مبتنی بر نتایج وابسته به مکان MCNPX. از کد سیلواکو استفاده شده است. ابتدا برای اعتبارسنجی، محاسبات برای یک نمونه باتری ساخته شده با سطح مقطع ۱۶ mm² و چشمۀ با اکتیویته ۱ mCi انجام شد و نتایج آن با نتایج تجربی و دو روش تحلیلی مقایسه شده‌اند. سپس این محاسبات برای باتری با اکتیویته ۱۰۰ mCi، سطح مقطع ۱ cm² و مقایسه نتایج آن با نتایج یک روش تحلیلی انجام گرفته است. نتایج نشان دادند که شبیه‌سازی مشخصه‌های میکروباتری توسط کد تلفیقی MCNPX-SILVACO با استفاده از توزیع سه بعدی الکترون-حفره در نیمه‌هادی و استفاده از طیف کامل ذرات بتا، افزایش قابل ملاحظه‌ای را در صحت محاسبات ایجاد می‌کند و قابلیت مناسبی را برای بهینه‌سازی طراحی باتری در اختیار می‌گذارد.

کلیدواژه‌ها: میکروباتری بتاولتائیک، کد ترکیبی MCNPX-SILVACO، نیکل-۶۳، سیلیکون، افزایش دقت محاسبات

Enhance simulation capability of beta-voltaic micro battery using MCNPX-SILVACO hybrid code

P. Maleki¹, Gh.R. Etaati^{2*}

1. Nuclear Physics Group, Basic Science Department, Mazandaran University, P.O.Box: 47416-13534, Mazandaran - Iran

2. Energy Engineering and Physics Department, Amirkabir University of Technology, P.O.Box: 15875-4413, Tehran - Iran

Research Article

Received 16.7.2019, Accepted 21.9.2019

Abstract

The accuracy of each simulating beta-voltaic battery parameter is very important, especially in micro-batteries. The aim of this study is to improve the calculation of beta-battery parameters' accuracy. For this purpose, at first, using the Monte Carlo N-Particle code (MCNPX), the energy accumulation distribution of the ⁶³Ni beta particle spectrum inside a silicon semiconductor has been simulated. Then, the ATLAS C-Interpreter function in C ++ was defined, using one of the SILVACO code abilities (the parameter F.RADIATE BEAM statement). Finally, the device electric parameters have been obtained using ATLAS-SILVACO based on the location-dependent of MCNPX results. For validation, the calculations were performed for a battery sample made of 16 mm² cross-section and 1 mCi activity of radioisotope ⁶³Ni as a source, and finally, the results were compared with one experimental result and two analytical methods. The calculations repeated for the other sample with 100 mCi activity and 1 cm² of geometry, and compared its results with an analytical method results. The results showed that the simulation of micro-battery characteristics by the MCNPX-SILVACO hybrid code using three-dimensional electron-hole pairs' distribution in semiconductor and the full spectrum of beta particles creates a significant increase in the accuracy of the computation, and provides a good capability to optimize the design of the battery.

Keywords: Beta-voltaic micro battery, MCNPX, ATLAS-SILVACO, ⁶³Ni beta particles source, Silicon semiconductor



می‌کند، بتوان با بهینه‌سازی طراحی، بازدهی این نوع میکروباتری‌ها را افزایش داد. لذا در ابتدا با مرور اجمالی روش‌های تحلیلی محاسبه مشخصه‌های باتری، عوامل مؤثر بر بازدهی باتری بررسی شده سپس با معرفی کد ترکیبی MCNPX-SILVACO که برای شبیه‌سازی فرایندهای دو بخش اصلی سلول بتاولتائیک (محاسبه زوج-الکترون حفره ناشی از تراپرد ذرات بتا درون نیمه‌هادی و مشخصه‌های الکتریکی باتری) استفاده شده است، نتایج حاصل با نتایج به دست آمده از روش‌های تحلیلی قبلی و همچنین یک نمونه تجربی مقایسه می‌گردد.

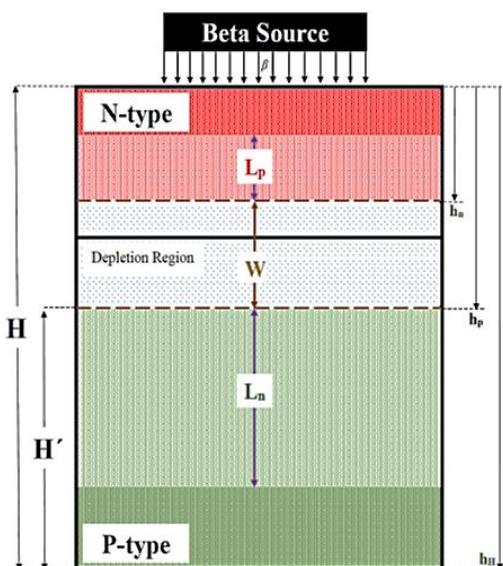
۲. مواد و روش‌ها

۱۰۲ روش تحلیلی

شکل ۱، نمایی ساده از سطح مقطع یک باتری بتاولتائیک را نشان می‌دهد. براساس مفهوم اثر بتاولتائیک و ساختار این نوع میکروباتری، بازدهی کل برابر است با حاصل ضرب سه عبارت: بازدهی چشمۀ بتاب^۶ (η_β)، بازدهی اتصال^۷ (η_c) و بازدهی نیمه‌هادی^۸ (η_s).

$$\eta_{overall} = \eta_\beta \times \eta_c \times \eta_s \quad (1)$$

واضح است که برای دست‌یابی به بیشینه بازدهی ممکن، هر یک از آن‌ها باید بیشینه باشد.



شکل ۱. یک نمایی ساده از سطح مقطع میکروباتری بتاولتائیک.

6. Beta Source Efficiency (η_β)

7. Coupling Efficiency (η_c)

8. Semiconductor Efficiency (η_s)

۱. مقدمه

از زمان پیدایش اثر بتاولتائیک در دهه ۱۹۵۰، زمانی که ارنبرگ^۱ اثر الکترون-ولتائیک را برای اولین بار گزارش کرد، تاکنون روند تکامل و توسعه فناوری نانو/میکروباتری‌های مبتنی بر این ایده، دارای فراز و نشیب‌هایی بوده است. ویژگی‌های خاص باتری بتاولتائیک آن را در میان بهترین گزینه‌ها برای تأمین منابع انرژی کم‌توان قرار داده است. در سال‌های اخیر همراه با پیشرفت فناوری در این زمینه، گزینه‌های مختلفی مانند سلول‌های خورشیدی، باتری‌های شیمیایی جدید، تأمین‌کننده مایکروویو [۱] و مولدهای ارتعاش^۲ [۴-۲] ارایه شده است، اما میکروباتری‌های بتاولتائیک به دلیل داشتن ویژگی‌های منحصر به فردشان شامل چگالی انرژی بالا، طول عمر بالا ناشی از نیمه‌عمر طولانی برخی از رادیوایزوتوپ‌ها، عدم نیاز به ذخیره‌سازی سوخت، امکان ساخت در مقیاس کوچک (فسرده‌سازی)، عدم تأثیرپذیری قابل توجه از عوامل محیطی و غیره مورد توجه بسیاری از محققین و پژوهش‌گران در چند دهه گذشته بوده است [۵]. امکان فشرده‌سازی آن را به عنوان یکی از بهترین گزینه‌های منابع تأمین‌کننده توان در سطح نانو و میکرو برای کاربردهای خاص مانند زیست‌پزشکی، صنعتی، نظامی و حتی تجاری مطرح ساخته است. علاوه بر این، برخی از فناوری‌های جدید از قبیل سیستم‌های میکروالکترومکانیکی^۳ (MEMS) و اینترنت اشیاء (IOT) مهم‌ترین دلیل یا انگیزه برای تحقیق و بررسی در مورد این نوع تأمین‌کننده انرژی می‌باشند.

در طول دهه‌های گذشته، اگرچه برخی مطالعات نشان دادند که طیف انرژی چشمۀ ذرات بتاب، بر توزیع انباست آن در جاذب و بنابراین بر طراحی و عملکرد باتری تأثیر می‌گذارد [۱۴-۶]، لیکن بیشتر مطالعات نظری صرفاً بر روی میانگین و بیشینه انرژی این ذرات جهت محاسبه عملکرد باتری بتاولتائیک بدون در نظر گرفتن توزیع مکانی و سه بعدی تولید زوج الکترون-حفره مرکز بوده است.

هدف از این مقاله ارایه رویکردی است که با افزایش دقت محاسبات و به دست آوردن چگونگی توزیع مکانی واقعی انباست انرژی که میزان تولید وابسته به مکان زوج الکترون-حفره^۴ را درون نیمه‌هادی میکروباتری بتاولتائیک مشخص

1. Ehrenberg

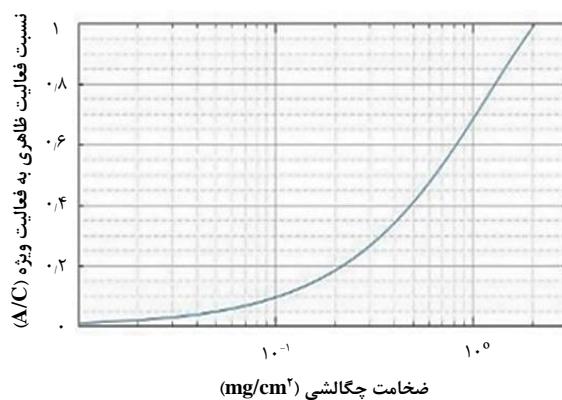
2. Vibration Generator

3. Micro-Electromechanical Systems (MEMS)

4. Internet of Things (IOT)

5. Electron-Hole Pairs (EHPs)

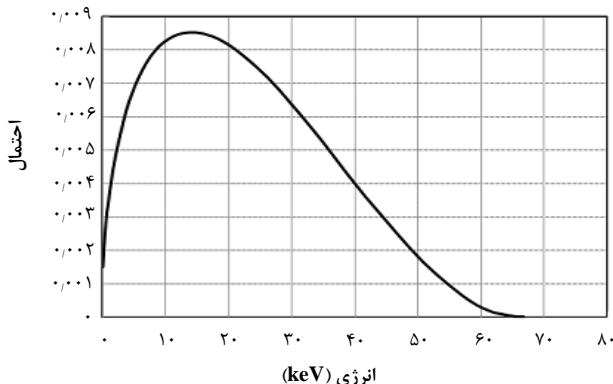




شکل ۲. نمودار فعالیت ظاهری به عنوان تابعی از ضخامت چگالشی.

جدول ۱. رادیوایزوتوپ‌های منتخب به عنوان چشمۀ میکروباتری بتاولتائیک

| E_{ave} (keV) | نیمه‌عمر (سال) | E_{max} (keV) | رادیوایزوتوپ |
|--------------------|-------------------|--------------------|-------------------|
| ۵/۷ | ۱۲,۳۳ | ۱۸,۵ | ^7H |
| ۶۲۹,۹ | ۰,۰۴ | ۱۷۱۰ | ^{32}P |
| ۷۶,۶ | ۰,۰۷ | ۲۴۹ | ^{33}P |
| ۱۶۷ | ۰,۲۸ | ۵۰۱ | ^{35}S |
| ۱۷,۱ | ۱۰۰,۱ | ۶۷ | ^{63}Ni |
| ۲۵۱ | ۱۰,۷۶ | ۶۸۷ | ^{85}Kr |
| ۱۹۶ | ۲۸,۸ | ۵۴۶ | ^{90}Sr |
| ۶۵ | ۲,۶ | ۲۲۰ | ^{147}Pm |
| ۲۴۵ | ۳,۸ | ۷۶۴ | ^{204}Tl |



شکل ۳. طیف انرژی رادیوایزوتوپ نیکل-۶۳ [۱۸].

۳.۲ بازدهی جفت‌شدگی (η_c)

بازده جفت‌شدگی شامل هر دو بخش چشمۀ و نیمه‌هادی می‌شود. بیشینه بازده احتمالی که می‌توان از کنار هم قرار گرفتن یک نیمه‌هادی مشخص و یک چشمۀ β خاص به دست آورده، عبارت است از [۱۹]:

$$\eta_c = (1 - r) Q \quad (5)$$

۲.۲ بازدهی چشمۀ بتا (η_β)

کسری از تمام بتای تولید شده در چشمۀ است که به سمت نیمه‌هادی هدایت می‌شود.

$$\eta_\beta = \frac{N_\beta}{N_0} \quad (2)$$

فعالیت ویژه، خود جذبی و ضخامت چشمۀ، عواملی هستند که بر بازدهی چشمۀ اثر می‌گذارند. با توجه به فرایند خودجذبی توسط رادیوایزوتوپ مربوطه، مقدار فعالیت ظاهری کمتر از فعالیت ویژه است.

همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده، فعالیت ظاهری وابسته به ضخامت چگالشی، (t_m) mg/cm^2 عبارت است از [۱۵]:

$$A = \frac{c}{\mu_m} [1 - \exp(-\mu_m t_m)] \quad (3)$$

که در آن A فعالیت ویژه و C (Ci/g) ضریب تضعیف جرمی می‌باشد.

$$\mu_m = \frac{0.17}{(E_{max})^{1.42}} \quad (4)$$

از سوی دیگر انتخاب رادیوایزوتوپ مناسب به عنوان چشمۀ (که یکی از بخش‌های مهم طراحی باتری می‌باشد) تحت تأثیر عواملی مانند ایمنی، نیمه‌عمر، اثرات آسیب‌تابشی^۱ و موارد دیگر محدود می‌گردد. به این معنی که نمی‌توان هر چشمۀ بتایی را به منظور افزایش بازدهی میکروباتری انتخاب نمود. با توجه به جدول ۱، نیکل-۶۳ به دلیل ویژگی‌هایش و ملاحظات فنی و زیستی، مشکل آسیب‌تابشی در نیمه‌هادی (حدود ۲۰۰ و ۲۲۵ و ۳۵۰ کیلو الکترون-ولت به ترتیب برای Si و GaAs) و عدم نفوذ در لایه بیرونی پوست انسان [۱۷] [۱۶] و عدم نفوذ در لایه بیرونی گزینه‌ها برای چشمۀ بتا مطرح همواره به عنوان یکی از بهترین گزینه‌ها برای چشمۀ بتا مطرح بوده است.

همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده، ^{63}Ni مانند دیگر تابش‌کننده‌های بتا و برخلاف چشمۀ‌های آلفا (که در گروه انرژی‌های گسسته تابش می‌نمایند)، دارای یک توزیع انرژی پیوسته از صفر تا بیشینه مقدار 66.7 keV می‌باشد [۶].

1. The Radiation Damage Problem



همان‌طور که معادلات (۹) و (۱۰) نشان می‌دهند، بازدهی نیمه‌هادی (η_s) تابعی از ولتاژ مدار باز (V_{oc})، فاکتور پرکنندگی (FF) و انرژی باند شکاف نیمه‌هادی می‌باشد. ولتاژ مدار باز برابر است با [۲۳، ۲۴، ۶]:

$$V_{oc} = n \left(\frac{kT}{q} \right) \ln \left(\frac{J_R}{J_0} + 1 \right) \quad (11)$$

که در آن n فاکتور ایده‌آل، K ثابت بولتزمن، T دمای مطلق، J_R جریان تولید شده توسط تابش هسته‌ای و J_0 جریان نشت پیوند $p-n$ می‌باشد. عامل پرکنندگی (FF) در رابطه بازدهی نیمه‌هادی (رابطه ۱۰) برابر است با [۲۴]:

$$FF = \frac{[V_{oc} - \ln(V_{oc} + 0.72)]}{[V_{oc} + 1]} \quad (12)$$

که در آن V_{oc} ولتاژ مدار باز نبهنجارشده می‌باشد.

$$\eta_{overall} = \left(\frac{P_{max}}{P_{in}} \right) * 100\% \quad (13)$$

با توجه به معادلات $P_{in} = qN_0E_\beta$ و $P_{max} = J_{sc}V_{oc}FF$ خواهیم داشت:

$$\eta_{overall} = \left(\frac{P_{max}}{P_{in}} \right) * 100\% \quad (14)$$

طبق معادله (۱۱) همان‌طور که در شکل ۴ نیز مشاهده می‌شود ولتاژ مدار باز (V_{oc}) به عنوان تابعی از نسبت جریان تابشی تولیدی به جریان نشتی ($\frac{J_R}{J_0}$) است. با افزایش این نسبت، V_{oc} و در نتیجه $P_{max} = J_{sc}V_{oc}FF$ افزایش یافته و با توجه به رابطه (۱۴) موجب ارتقاء بازدهی کل خواهد شد. بنابراین جهت افزایش J_{sc} و در نتیجه P_{max} باید به فرایندهای "تولید" و "جمع‌آوری" زوج الکترون- حفره به عنوان دو عامل مهم برای افزایش بهره‌وری سلول β توجه شود. نرخ تولید زوج الکترون- حفره در واحد ضخامت چگالشی نیمه‌هادی عبارت است از:

$$G(x) = \frac{AE(x)}{\varepsilon} \quad (15)$$

ضریب بازتاب ذرات β از سطح نیمه‌هادی (r ، به طور عمده به عدد اتمی (Z) نیمه‌هادی بستگی دارد. (Q ، نسبت زوج الکترون- حفره جمع‌آوری شده به عنوان جریان مربوطه به کل تعداد تولید شده توسط شار ذرات β است که درون نیمه‌هادی نفوذ کرده‌اند. اگر نفوذ ذرات β صرفاً به طول نفوذ حامل‌های اقلیتی بستگی داشته باشد می‌تواند نزدیک به ۱ باشد.

$$\eta_c = J_{sc}/J_{max} \quad (6)$$

که در آن J_{sc} و J_{max} به ترتیب جریان اتصال کوتاه و بیشینه جریان ممکن می‌باشند. در بهترین حالت، زمانی که $r \rightarrow 0$ و $1 \rightarrow Q$ می‌توان فرض کرد جریان مدار کوتاه (J_{sc}) تقریباً برابر با:

$$J_{sc} \approx J_{max} \quad (7)$$

بیشینه جریان ممکن عبارت است از:

$$J_{max} = qN_\beta(E_\beta/\varepsilon) \quad (8)$$

که در آن q شار الکترون، N_β و E_β به ترتیب شار و متوسط انرژی ذرات β است. متوسط مقدار انرژی لازم برای تولید یک زوج الکترون- حفره (ε) که تابعی از باند شکاف^۱ نیمه‌هادی می‌باشد از رابطه تجربی زیر به دست می‌آید [۲۰]:

$$\varepsilon = 2.8E_g + 0.5 \quad (9)$$

که در آن $E_g = 3.64$ eV برای Si [۲۱]، مقدار انرژی مورد نیاز برای انتقال الکترون‌ها از باند ظرفیت به باند رسانش می‌باشد.

۴.۲ بازدهی نیمه‌هادی (η_s)
بازدهی نیمه‌هادی عبارت است از [۱۹]:

$$\eta_s = \left[\frac{V_{oc}FF}{\varepsilon} \right] * 100\% \quad (10)$$

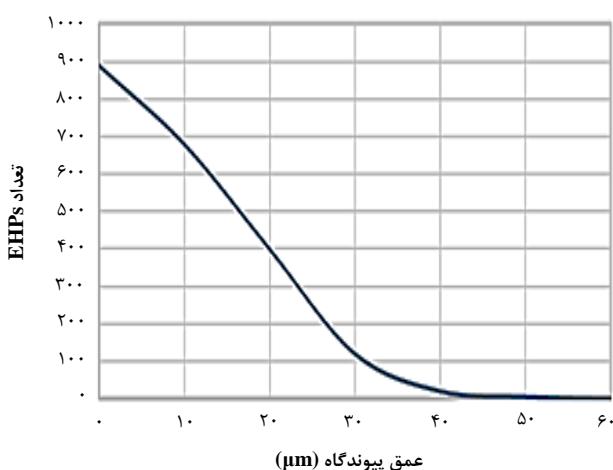
1. Bandgap



حفره تولید شده در این ۵۰۰۰ قسمت محاسبه گردید. نیمه‌هادی به ترتیب به 10_0 و 10 و 5_0 و 1 قسمت در مختصات X , Y و Z تقسیم‌بندی و مختصات Y به عنوان عمق باتری در نظر گرفته شده است. در این مقاله شبیه‌سازی برای 10^8 ذره و چشمی با اکتیویتی‌های 1 و 100 میلی‌کوری به ترتیب با سطح مقطع‌های 0.16 و 1 سانتی‌متر مربعی انجام شده است. بیشینه خطای محاسبات 1.41% به دست آمد.

۲.۳ برنامه C++ (بخش مترجم)

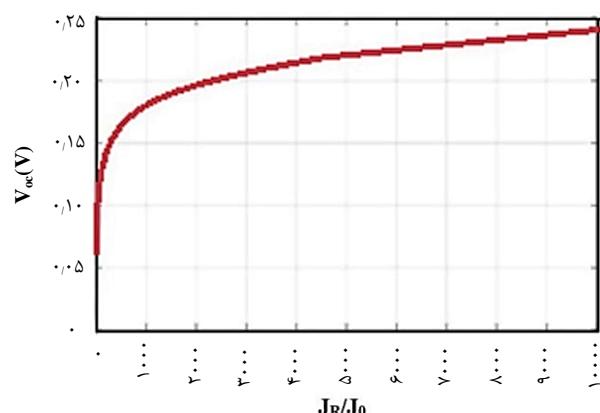
پس از محاسبه توزیع سه بعدی زوج الکترون- حفره‌های تولید شده در نیمه هادی مطابق آن‌چه در بخش قبل توضیح داده شد، این داده‌ها طبق هدف این تحقیق به عنوان یک فایل کتابخانه برای استفاده کد ATLAS-SILVACO ذخیره می‌شود. اما این فایل با توجه به این‌که نتایج وابسته به مکان کد MCNPX مبتنی بر تابش الکترونی بوده و محاسبات شبیه‌ساز SILVACO بر اساس تابش فوتونی می‌باشد، مستقیماً برای این کد قابل استفاده نمی‌باشد. لذا جهت حل مشکل و رفع این مغایرت از یکی از قابلیت‌های کد سیلواکو^۳ (پارامتر F.RADIATE در دستور BEAM)، استفاده شده است. بدین ترتیب که یک تابع مترجم^۴ در محیط C++ نوشته شده است. این تابع مترجم توزیع مکانی زوج الکترون- حفره تولید شده را به عنوان داده ورودی در اختیار شبیه‌ساز SILVACO برای محاسبه مشخصه‌های میکروباتری قرار می‌دهد.



شکل ۵. نمودار میانگین تعداد EHP های تولید شده توسط یک ذره بتا از چشمی سطحی ^{63}Ni در پیوند سیلیکونی $p-n$ بر حسب عمق [۱۹].

3. ATLAS-SILVACO

4. ATLAS C-Interpreter Function



شکل ۴. نمودار ولتاژ مدار باز به عنوان تابعی از نسبت جریان تابشی تولیدی به جریان نشتشی.

همان‌طور که در شکل ۵ قابل مشاهده است با افزایش عمق نیمه‌هادی، تعداد زوج الکترون- حفره تا عمق حدود 40 میکرومتر روندی نزولی داشته (از 900 به چند ده می‌رسد) و برای عمق‌های بیش از آن تقریباً به سمت صفر میل می‌کند. این عمق در این مقاله حدود $39 \mu m$ محاسبه شده است.

۳. کد ترکیبی MCNPX-SILVACO

در این مقاله بر اساس مفهوم، ساختار و عوامل مؤثر بر بهره‌وری میکروباتری‌های مبتنی بر اثر بتاولتائیک (که در بخش قبل به طور اجمالی به آن اشاره شد)، به منظور افزایش دقت و هرچه به واقعیت نزدیک‌تر شدن نتایج محاسبات پارامترهای الکتریکی و به تبع آن بهینه‌سازی طراحی این نوع میکروباتری‌ها، یک رویکرد شبیه‌سازی ترکیبی به عنوان یک روش کاربردی معرفی شده است.

۱.۳ کد MCNPX (بخش چشمی)

برای نیل به هدف مذکور، به جای استفاده از مقدار متوسط انرژی یا حتی چندین مقدار متوسط برای بخش‌های مختلف طیف انرژی [۱۹]، از تمام طیف انرژی مطابق شکل ۳ برای محاسبه زوج الکترون- حفره تولید شده در پیوند $p-n$ مسئله F6 استفاده شده است. بدین ترتیب که ابتدا با استفاده از تالی F6 کد MCNPX (نسخه ۲/۶ با فایل کتابخانه‌ای پیش‌فرض الکترون $eV^{10.3}$) انبساط انرژی ناشی از نیکل-۶۳ را درون 5000 پیوند $p-n$ سیلیکون (نیمه‌هادی) به دست آورده سپس قسمت 2 پیوند $p-n$ سیلیکون (نیمه‌هادی) به دست آورده سپس با عنایت به مقدار انرژی لازم جهت تولید هر زوج الکترون- حفره در سیلیکون $eV^{3.64}$ [۲۱]، مقدار زوج الکترون-

1. Monte Carlo N-Particle Code

2. Segment



۳. استفاده از شبیه‌ساز سیلواکو جهت محاسبه پارامترهای الکتریکی باتری مبتنی بر نتایج وابسته به مکان کد MCNPX

به منظور اعتبارسنجی این روش ابتدا مشخصات باتری بتاولتائیک ساخته شده در مرجع [۲۶]، شبیه‌سازی شد و نتیجه‌های به دست آمده با اندازه‌گیری‌ها مقایسه گردید. از طرف دیگر جهت بررسی دقیق شبیه‌سازی با این روش نسبت به سایر روش‌های تحلیلی، مقایسه‌ای با نتیجه‌های تحلیلی مراجعهای [۵، ۲۶] انجام شد. برای شبیه‌سازی با کد تلفیقی MCNPX-SILVACO از چشممه‌ی بتای نیکل-۶۳ با طیف انرژی شکل ۳ و با اکتیویته mCi ، نیمه‌هادی با سطح مقطع $N_d = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ و $N_a = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ استفاده شد.

جريان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، بیشینه توان خروجی و فاکتور پراکنندگی به ترتیب مقدار ۲/۴۲ نانوآمپر، ۱۲۸ میلی‌ولت، ۰/۲۷ نانووات و ۴۹/۸ درصد به دست آمد که در جدول ۲ با نمونه تجربی [۶] و دو نمونه تحلیلی دیگر [۵، ۲۶] مقایسه شده است.

جهت مقایسه دقیق روش‌ها، مقدار درصد خطاهای نسبی دو نمونه تحلیلی و درصد خطای این مقاله در جدول ۳ مقایسه گردیده است.

جدول ۲. مقایسه مشخصه‌های میکروباتری بتاولتائیک نیکل-۶۳ با سطح مقطع mm^3 ، ۱۶، محاسبه شده با استفاده از کد تلفیقی MCNPX-SILVACO و دو روش تحلیلی مراجع [۵] و [۲۶] با نتایج تجربی

| | | | مشخصه‌های میکروباتری | نمونه تحلیلی (۱) [۵] | نمونه تحلیلی (۲) [۲۶] | نمونه تحلیلی (۳) [۶] |
|------|------|------|------------------------------|----------------------|-----------------------|----------------------|
| ۲/۴۲ | ۲/۴۱ | ۲/۴۴ | جريان اتصال کوتاه (نانوآمپر) | ۲/۸۶ | ۲/۸۶ | ۲/۸۶ |
| ۱۲۸ | ۱۱۵ | ۱۶۱ | ولتاژ مدار باز (میلی‌ولت) | ۱۵۷ | ۱۵۷ | ۱۵۷ |
| ۰/۲۷ | ۰/۲۴ | - | حداکثر توان خروجی (نанووات) | - | - | - |

جدول ۳. درصد خطای نسبی کد تلفیقی و دو نمونه تحلیلی با نمونه تجربی

| درصد خطای نسبی خروجی | درصد خطای نسبی J_{sc} | درصد خطای نسبی V_{oc} | مرجع |
|----------------------|-------------------------|-------------------------|-----------|
| -- | ۱/۲۴ | ۴۰ | [۵] |
| -- | ۱۸/۶۷ | ۳۶/۵۲ | [۲۶] |
| ۱۲/۵۰ | ۰/۴۱ | ۱۱/۳۰ | این مقاله |

۳.۳ کد SILVACO (بخش نیمه‌هادی)

بدیهی است برای توسعه قطعات توان^۱، نیاز به استفاده از سیستم‌های طراحی پیشرفته، به ویژه دستگاه‌ها و سیستم‌های شبیه‌سازی قدرتمند وجود دارد. این رویکرد به طور قابل توجهی باعث کاهش هزینه‌های مربوط به فرایند تولید می‌شود. شبیه‌ساز سیلواکو در حال حاضر یکی از جدید و قدرتمندترین نرم‌افزارها برای شبیه‌سازی دستگاه‌های میکروالکترونیک می‌باشد که امکان درک عمیق‌تر فرایندهای فیزیکی در قطعه و به تبع آن پیش‌بینی قابل اطمینان‌تر رفتار نسل بعدی آن را برای کاربر فراهم می‌کند، اهمیت ابزار TCAD در صنعت تولید جهانی توسط^۲ (ITRS) که کاهش ۴۰ درصدی هزینه‌های توسعه در سال ۲۰۱۶ را به دلیل استفاده از TCAD پیش‌بینی کرد، نیز تأیید شده است [۲۵]. لذا در این مطالعه با توجه به مزایای ذکر شده فوق از این شبیه‌ساز جهت محاسبه پارامترهای الکتریکی باتری بر اساس نتایج حاصله وابسته به مکان MCNPX، استفاده شده است.

۴.۳ مزیت شبیه‌ساز ترکیبی

به علت استفاده از طیف β به جای انرژی متوسط، توزیع دلخواه اکتیویته چشممه و زوج الکترون- حفره وابسته به مکان تولید شده در اتصال p-n، نتایج دقیق‌تر و نزدیک‌تر به واقعیت است. این نتایج دقیق و نزدیک به واقعیت (J_{sc} و V_{oc}) و سایر پارامترها) می‌تواند به بهینه‌سازی طراحی میکروباتری بتاولتائیک با در نظر گرفتن حجم، اکتیویته و هزینه کمتر و در نهایت بازدهی بیش‌تر، کمک کند.

۴. شبیه‌سازی با کد تلفیقی MCNPX-SILVACO

برای شبیه‌سازی با استفاده از کد تلفیقی MCNPX-SILVACO به طور خلاصه به ترتیب مراحل زیر را انجام می‌شود:

۱. استفاده از کد MCNPX و تعریف چشممه سطحی نیکل-۶۳ با طیف انرژی مشابه شکل ۳، و محاسبه توزیع مکانی سه بعدی انرژی ذخیره شده (یا مقدار زوج الکترون- حفره) در حجم باتری.

۲. استفاده از برنامه مترجم نوشته شده در C++ (بخش ۲.۳ را ببینید) و تبدیل فرمت خروجی MCNPX به فرمت مورد نیاز پارامتر F.RADIATE در کد BEAM ATLAS-SILVACO

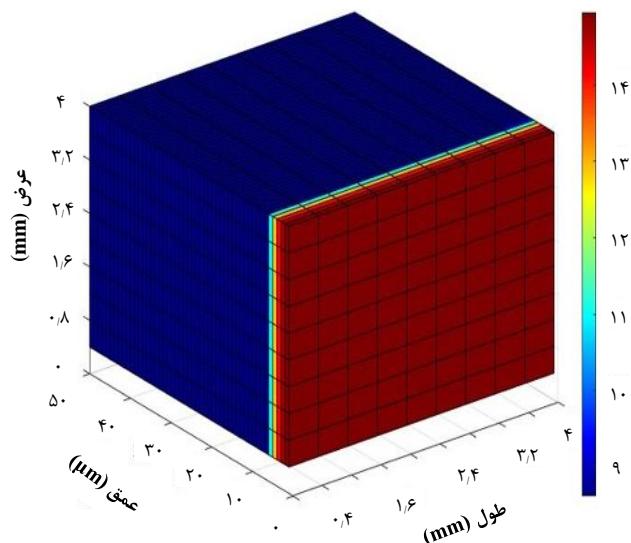
1. Power Devices

2. Roadmap for International Semiconductors

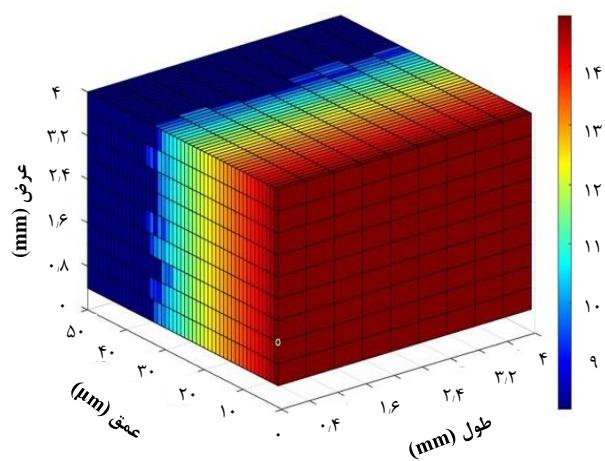


جدول ۴. مقایسه مشخصه‌های میکروباتری بتاولتائیک نیکل-۶۳ با سطح مقطع 1 cm^2 ، شبیه‌سازی شده با کد تلفیقی و روش تحلیلی مرجع [۲۷]

| کد تلفیقی | روش تحلیلی | مشخصه‌های میکروباتری | مرجع [۲۷] |
|-----------|------------|------------------------------|-----------|
| ۵۹۶۸ | ۵۷۳۳ | جريان اتصال کوتاه (نانوآمپر) | |
| ۲۶۸ | ۲۵۳ | ولتاژ مدار باز (میلی ولت) | |
| ۱۱۰۴۷ | ۹۹۸۵ | بیشینه توان خروجی (نانووات) | |
| ۵۴۶ | ۴۹۴ | بازدهی | |



شکل ۶. توزیع وابسته به مکان تعداد زوج الکترون- حفره تولیدشده در نیمه‌هادی توسط انرژی متوسط 17.1 keV ذرات بتای نیکل-۶۳ محاسبه شده توسط کد تلفیقی MCNP (بیشینه خطای محاسبات 141×10^{19}). اعداد رنگ‌ها نشان تعداد زوج تولید شده بر حسب 10^x هستند که x عدد رنگ است.



شکل ۷. توزیع وابسته به مکان زوج الکترون- حفره تولیدشده در نیمه‌هادی توسط طیف انرژی ذرات بتای نیکل-۶۳ محاسبه شده توسط کد MCNP. (حداکثر خطای محاسبات 141×10^{19}). اعداد رنگ‌ها نشان تعداد زوج تولید شده بر حسب 10^x هستند که x عدد رنگ است.

همان‌طورکه مشاهده می‌شود مقدار خطای $11/30\%$ و $0/41\%$ برای شبیه‌سازی کمیت‌های V_{oc} و برای J_{sc} با کد تلفیقی بسیار کمتر از مقادیر به دست آمده به روش تحلیلی در مراجع [۵] و [۲۶] است که این خود مؤید به واقعیت نزدیک‌تر بودن نتایج و صحت بیشتر روش به کار رفته در کد تلفیقی است. به عبارت دیگر استفاده از طیف کامل انرژی به جای انرژی متوسط یا حتی چندین مقدار برای بازه‌های مختلف طیف انرژی (که در برخی از تحقیقات قبلی استفاده شده) و محاسبه توزیع دقیق و سه بعدی الکترون- حفره باعث شبیه‌سازی واقعی‌تر و در نتیجه افزایش قابل ملاحظه صحت محاسبات در مقایسه با نتایج تجربی شده است.

پس از صحبت‌سنجی و اعتبارسنجی شبیه‌سازی با کد تلفیقی MCNPX-SILVACO، شبیه‌سازی یک میکروباتری دیگر در مرجع [۲۷] مورد نظر قرار گرفت. مشخصات میکروباتری انتخاب شده به عبارت زیر است: اکتیویته 100 mCi (چشم نیکل-۶۳)، سطح مقطع 1 cm^2 ، غلظت ناخالصی‌های $N_d = 3.16 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ و $N_a = 1 \times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ و نتیجه شبیه‌سازی با کد تلفیقی به ترتیب برای جريان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، قدرت خروجی و بازدهی برابر است: 5968 نانوآمپر، 268 میلی ولت، 11047 نانووات و 546 درصد. در جدول ۴ نتیجه شبیه‌سازی با کد تلفیقی و روش تحلیلی مرجع [۲۷] مقایسه شده است.

با توجه به اعتبارسنجی کد تلفیقی MCNPX-SILVACO (جدول ۳) در شبیه‌سازی نمونه قبلی، می‌توان پیش‌بینی کرد که نتیجه‌های شبیه‌سازی به دست آمده از کد تلفیقی نسبت به روش تحلیلی بتای نیکل-۶۳ با مرتع [۲۷] مندرج در جدول ۴ به واقعیت نزدیک‌تر باشد.

۵. بحث و نتیجه‌گیری

به‌منظور تحلیل دقیق‌تر رفتار بتای بتاولتائیک، توزیع وابسته به مکان زوج الکترون- حفره تولید شده در نیمه‌هادی با سطح مقطع 16 mm^2 برای دو حالت چشم بتابای نیکل-۶۳ با انرژی متوسط 17.1 keV و طیف کامل انرژی به ترتیب در شکل‌های ۶ و ۷ نشان داده شده است.



مراجع

1. M. Mi, et al. *RF energy harvesting with multiple antennas in the same space*, *IEEE Antennas Propag. Mag.*, **47**, 100 (2005).
2. Z.L. Wang, J. Song, *Piezoelectric nanogenerators based on zinc oxide nanowire arrays*, *Sci.* **312**, 243 (2006).
3. J.C. Goldschmidt, F. Stefan, *Up conversion for Photovoltaics a review of materials, devices and concepts for performance enhancement*, *Adv. Opt. Mater.*, **3**, 510 (2015).
4. V. Leonov, V.J.M. Ruud, *Wearable electronics self-powered by using human body heat: the state of the art and the perspective*, *J. Renewable Sustainable Energy.*, **1**, 062701 (2009).
5. G. Zou, K. Zhou, G. KE, *A Simple theoretical model for ^{63}Ni betavoltaic battery*, *Appl. Rad. Isot.*, **82**, 119 (2013).
6. WEI, S. Lawrence, *Parametric studies and optimization of the beta-voltaic cell-I. Short-circuit current*, *Solid-State Electron.*, **17**, 1091 (1974).
7. W.G. Cross, H. Ing, N. Freedman, *A short atlas of beta-ray spectra*, *Phys. Med. Biol.*, **28**, 1251 (1983).
8. M. Mohamadian, S.A.H. Feghhi, H. Afariadeh, *Conceptual design of GaN betavoltaic battery using in cardiac pacemaker*, In: *Proceedings of the 13th International Conf on Emerging of Nuclear Energy Systems (ICENES)*, Istanbul, Turkey (2007).
9. G. Wang, et al., *Design and performance of energy conversion units of betavoltaic isotopic batteries*, *At. Energy Sci. Technol.*, **44** (4), 494 (2010).
10. H. Chen, J.L. Jiang, X. Chen, *Design optimization of GaAs betavoltaic batteries*, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **44**, 215303 (2011).
11. D.Y. Qiao, et al., *A nuclear micro-battery based on silicon PIN diode*. *Acta Phys. Sin.*, **60**(2), 020701 (2011).
12. G. Hui, et al., *Investigation of a energy conversion silicon chip based on ^{63}Ni radio-voltaic effect*, *Acta Phys. Sin.*, **61**(17), 176101 (2012).
13. G.R. Ghasemi Nejad, F. Rahmani, *Design and simulation of betavoltaic angle sensor Based on $^{63}\text{Ni-Si}$* , *Appl. Radiat. an Isot.*, **107**, 346 (2016).
14. H. Guo, A. Lal, *Nanopower betavoltaic microbatteries*. Proceedings of 12th International Conference on Transducers, Solid-State Sensors, *Actuators and Microsystems*, 36 (2003).
15. Q.D. Yong, et. al., *China Phys. Lett.* **25**(10), 3798 (2008).
16. H. Flicker, J.J. Loferski, T.S. Elleman, *Construction of a promethium-147 atomic battery*, *IEEE Trans. Electron Devices*, **11**, 2 (1964).

همان طور که مشاهده می‌شود در این شبیه‌سازی، بیشینه عمق نفوذ ذرات بتای منتشر شده از چشمۀ نیکل-۶۳ در نیمه‌هادی سیلیکون، برای دو حالت متوسط انرژی و طیف کامل انرژی ذرات بتا به ترتیب ۵ و ۳۹ میکرومتر محاسبه شد که با مقدار $40 \mu\text{m}$ پیش‌بینی شده از تئوری^۱ (CSDA) [۶] توافق قابل قبولی دارد و نشان می‌دهد استفاده از کل طیف انرژی بتا به جای مقدار متوسط توزیع انرژی (یا حتی مقادیر متوسط برای محدوده‌های مختلف انرژی [۱۹]) و در نظر گرفتن مکان دقیق تولید الکترون حفره در نیمه‌هادی باعث افزایش زیاد دقت و صحت محاسبات پارامترهای باتری می‌شود. علاوه بر مزیت فوق روش شبیه‌سازی و محاسبات باتری ارایه شده در این تحقیق دارای قابلیت‌های زیر است:

- ✓ توانایی تعریف توزیع‌های سطحی مختلف چشمۀ بتا به منظور افزایش بازدهی باتری.
- ✓ امکان تجزیه و تحلیل مکان‌های مهم و مؤثر در حجم باتری برای تولید زوج الکترون-حفره.
- ✓ امکان محاسبه دقیق‌تر بازدهی و پارامترهای مختلف باتری. طراحی اقتصادی‌تر باتری.

1. Theory of Continuous Slowing-Down Approximation Range



17. P. Rappaport, J.J. Loferski, *Thresholds for Electrons Bombardment Induced Lattice Displacements in Si and Ge*, *Phys. Rev.*, **100**, 1261 (1955).
18. H.K. Jung, et al., *Betavoltaic Prediction using Ni-63 beta radioisotope and Semiconductor*, *Transactions of the Korean Nuclear Society Spring Meeting, Chuncheon, Korea*, (May 25-26 (2006)).
19. L.C. Olsen, *Review of Betavoltaic Energy Conversion*. Washington State University/Tri Cities, N94-11407, (1994).
20. C. Klein, *Bandgap dependence and related features of radiation ionization energies in semiconductors*, *J. Appl. Phys.*, **39**(4), 2029 (1968).
21. C. Honsberg, *GaN betavoltaic energy converters*, *Conference Record of the Thirty-First IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 102 (2005).
22. M. Shur, *Physics of Semiconductor Devices*, ? Ed. (Prentice Hall, 1990).
23. A. Luque, S. Hegedus, *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*, (John Wiley & Sons Ltd, England, 2003).
24. S.Y. Xu, *Monte Carlo Methods in Experimental Nuclear Physics Applications*, Beijing: Atomic Energy Press, 262-270 (2006).
25. I. Lysenko, et al., *The Use of TCAD in Technology Simulation for Increasing the Efficiency of Semiconductor Manufacturing*. AIP Conference Proceedings, 1772, 060012 (2016).
26. S. Rahastama, A. Waris, *Analytical study of ⁹⁰Sr betavoltaic nuclear battery performance based on p-n junction silicon*, *J. Phys. Conference Series*, **739**(1), (2016).
27. X.B. Tang, et al. *Optimization design and analysis of Si-⁶³Ni beta voltaic battery*, *Science China*, **55**, 990 (2012).

COPYRIGHTS

©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.



استناد به این مقاله

پدرام ملکی، غلامرضا اطاعتی (۱۳۹۹)، افزایش قابلیت‌های شبیه‌سازی میکروباتری‌های بتاولتائیک با استفاده از کد ترکیبی MCNPX-SILVACO ۹۳-۳۷

DOI: [10.24200/nst.2020.1147](https://doi.org/10.24200/nst.2020.1147)Url: https://jonsat.nstri.ir/article_1147.html