

## Моделирование параметров бетавольтаического элемента на основе тритида титана

© А.А. Свинцов<sup>1</sup>, Е.Б. Якимов<sup>1,2</sup>, М.В. Дорохин<sup>3,¶</sup>, П.Б. Демина<sup>3</sup>, Ю.М. Кузнецов<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук, 142432 Черногловка, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский технологический университет „МИСиС“, 119049 Москва, Россия

<sup>3</sup> Научно-исследовательский физико-технический институт Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

¶ E-mail: dorokhin@nifti.unn.ru

(Получена 10 апреля 2018 г. Принята к печати 17 апреля 2018 г.)

Проведено моделирование  $\beta$ -вольтаических элементов питания, представляющих собой объединенные источник и преобразователь  $\beta$ -частиц. В качестве источника использовано соединение  $TiTi_2$ , содержащее радиоактивный изотоп трития. В качестве преобразователя рассмотрены структуры на основе полупроводниковых материалов, наиболее часто используемых при разработке элементов питания на  $\beta$ -вольтаическом эффекте: Si, SiC, GaAs. С применением метода Монте-Карло рассчитаны основные параметры источников, в частности, выполнены оценки предельно достижимого значения тока короткого замыкания.

DOI: 10.21883/FTP.2019.01.46995.8884

### 1. Введение

Бета-вольтаические элементы рассматриваются в качестве перспективных долгоживущих источников питания для маломощных микро- и наноэлектронных, а также микроэлектромеханических систем [1–5]. Они могут эффективно использоваться в системах, потребляющих мощности в диапазоне 10–10<sup>5</sup> нВт, ограниченных по размерам (менее 1 см<sup>3</sup>) и(или) работающих длительные периоды времени (25 лет и более). Бета-вольтаические батареи состоят из источника  $\beta$ -излучения и полупроводниковой структуры, преобразующей энергию  $\beta$ -излучения в электрический ток.

Среди радиоизотопов, используемых в качестве источника в таких элементах, одним из наиболее распространенных является тритий вследствие его относительной дешевизны, коммерческой доступности и низкой энергии  $\beta$ -частиц, понижающей как вероятность радиационных повреждений структуры, так и радиационную опасность для потребителя. Тритий может использоваться в виде газа, однако для компактных  $\beta$ -вольтаических батарей более удобно его использование в составе твердых соединений, например тритида титана.

Для оптимизации  $\beta$ -вольтаических источников энергии и реалистичной оценки их предельных параметров необходимо разработать методы моделирования взаимодействия электронов, эмитированных из источника, с материалом преобразователя. Несмотря на важность этой проблемы, число работ, посвященных моделированию  $\beta$ -вольтаических источников на основе трития, сравнительно мало [6,7] и существенно меньше, чем для источников на основе Ni-63 ([8] и ссылки в этой работе). При этом даже в цитированных работах [6,7]

надежность полученных результатов вызывает сомнения вследствие целого ряда используемых предположений, в частности, в [7] спектр электронов заменялся их средней энергией и не учитывалось, что эмиссия электронов происходит изотропно по углам вылета, а в [6] энергетический спектр был разделен всего на 5 диапазонов и не учитывалось, что электроны эмитируются равномерно по глубине радиоактивной пленки тритида титана. Тем не менее расчеты, проведенные в [6], продемонстрировали важность учета реального спектра  $\beta$ -частиц и их изотропного распределения по углам вылета.

В [8] была предложена методика, позволяющая оценить параметры  $\beta$ -вольтаического элемента на основе радиоактивного источника с изотопом Ni-63 и реального полупроводникового преобразователя. В основе этой методики лежит моделирование методом Монте-Карло распределения скорости генерации неравновесных носителей заряда по глубине и измерение в растровом электронном микроскопе (РЭМ) параметров преобразователя, необходимых для расчетов вероятности собирания. Программа для моделирования методом Монте-Карло, разработанная в [9,10], учитывала распределения  $\beta$ -частиц по углам вылета, толщине радиоактивной пленки и по энергиям, а также поглощение в пленке радиоизотопа [10], что позволяет проводить более точные вычисления по сравнению с приближенными методами, использованными в [7,11–15].

В настоящей работе использованная в [9,10] программа была адаптирована для источника на основе тритида титана. В результате была выполнена оценка предельных параметров  $\beta$ -вольтаических элементов на основе данного материала.

## 2. Моделирование потерь энергии $\beta$ -частиц

Для расчета зависимости скорости генерации неравновесных носителей заряда от глубины методом Монте-Карло вычислялись потери энергии электронов по глубине, а затем запасенная энергия делилась на среднюю энергию генерации электронно-дырочной пары (энергия ионизации). Расчеты были выполнены для полупроводниковых материалов, наиболее часто используемых в качестве преобразователя  $\beta$ -вольтаической энергии: Si, SiC, GaAs. Потери энергии  $\beta$ -частиц по глубине рассчитывались методом Монте-Карло с использованием программы, описанной в [9,10]. Для описания электрон-электронных столкновений использовалось приближение непрерывных потерь энергии, а для упругих столкновений электронов с ядрами применялось экранированное сечение рассеяния Резерфорда [16]. Алгоритм расчета был специально приспособлен для быстрого моделирования многослойных структур. Для моделирования  $\beta$ -распада в слое тритида титана траектории электронов начинались равномерно по толщине слоя и изотропно по направлению вылета электронов. При расчете использовался полный спектр  $\beta$ -частиц [17]. Предполагалось, что состав тритида титана  $TiT_2$ , его плотность  $3.8 \text{ Г/см}^2$ , а удельная активность  $4090 \text{ Ки/см}^3$ . Предполагалось также, что пленка наносится непосредственно на полупроводниковый преобразователь, например, в качестве барьера Шоттки.

Рассчитанная зависимость поглощенной в Si энергии от толщины радиоактивной пленки приведена на рис. 1. Видно, что при толщине пленки  $\sim 0.3\text{--}0.8 \text{ мкм}$  поглощенная энергия практически насыщается за счет эффекта самопоглощения в источнике, что хорошо коррелирует со значениями, полученными в [6]. Из данных, показанных на рис. 1, можно оценить значение поглощенной мощности в Si, а также долю эмитированной источником полной энергии, которая поглощается в Si.

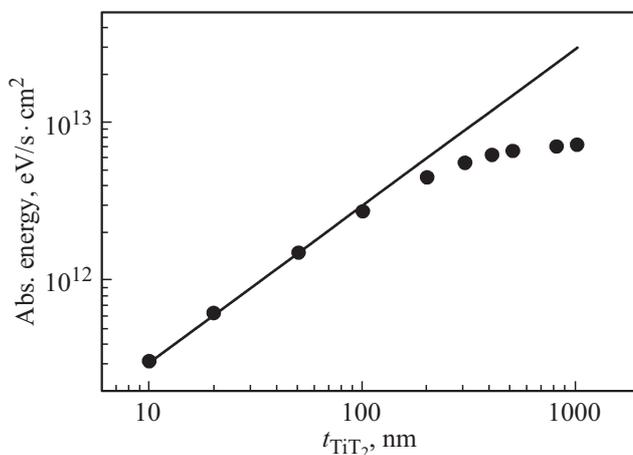


Рис. 1. Зависимость поглощенной в Si энергии  $\beta$ -излучения из пленки тритида титана от толщины пленки.

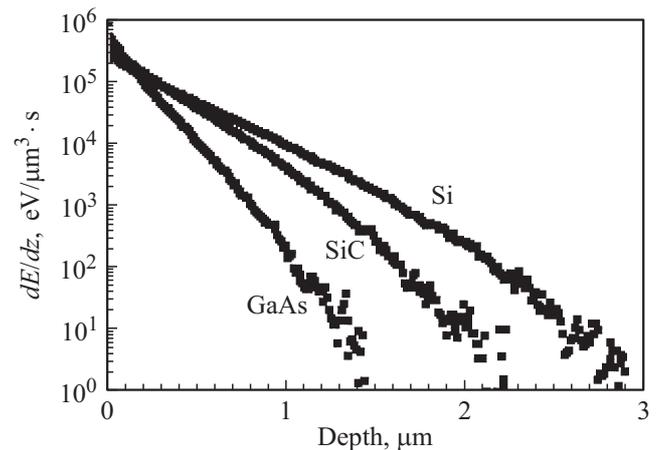


Рис. 2. Зависимости поглощенной энергии  $\beta$ -излучения от глубины, рассчитанные для Si, GaAs и SiC.

Для пленки толщиной 500 нм значение поглощенной энергии составило  $6.7 \cdot 10^{12} \text{ эВ/с/см}^2 = 419 \text{ нВт/см}^2$ , что также хорошо коррелирует со значением, полученным в [6]. Доля эмитированной энергии, поглощенная в Si, при такой толщине источника составила 2.7%. Следует отметить, что эта доля, т.е. эффективность элемента при толщинах радиоактивной пленки меньше 100 нм, может достигать значений порядка 6%, однако уменьшение толщины источника будет приводить к понижению мощности элемента.

На следующем этапе моделирования были рассчитаны зависимости поглощенной в преобразователе энергии от глубины поглощения  $\beta$ -частицы для Si, SiC и GaAs. В качестве примера на рис. 2 приведены зависимости, рассчитанные для радиоактивной пленки толщиной 1 мкм. Видно, что рассчитанные зависимости близки к экспоненциальным. В случае Si практически вся энергия  $\beta$ -излучения поглощается в слое толщиной 3 мкм. В случае GaAs уже 1.5 мкм достаточно, чтобы поглотить практически всю энергию  $\beta$ -излучения. Далее, для определения скорости генерации неравновесных носителей заряда  $g(z)$  поглощенную энергию следует разделить на среднюю энергию, необходимую для генерации электронно-дырочной пары. Для приведенных материалов она равна 3.63 эВ для Si [18,19], 4.35 эВ для GaAs [18,19] и 8.6 эВ для SiC [20].

С учетом полученных значений поглощенной энергии были рассчитаны зависимости скорости генерации электронно-дырочных пар от глубины.

## 3. Расчет тока короткого замыкания

Ток короткого замыкания  $I_{sc}$  рассчитывался как интеграл по глубине  $z$  произведения скорости генерации неравновесных носителей заряда  $g(z)$  на вероятность собирания  $\psi(z)$ . Такая процедура обычно используется

для расчета тока, индуцированного электронным пучком [21–24].

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

Как показано в [21], 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  $L = (D\tau)^{1/2}$ ,  $D$  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 любой полупроводниковой структуры  $\psi(z)$  можно рассчитать на основе измерений зависимости индуцированного электронным пучком тока от энергии пучка [23,25]. В предположении, что вероятность собирания близка к 1, можно рассчитать предельные значения  $I_{sc}$  для  $\beta$ -вольтаического элемента на основе тритида титана. Подобный расчет был выполнен для Si, GaAs и SiC, в результате были получены значения 322, 219 и 140 нА/см<sup>2</sup> соответственно. Указанные значения заметно ниже значений, рассчитанных для газообразного трития [26], особенно при повышенных давлениях, однако толщина тритида титана меньше 1 мкм, тогда как линейный размер камеры с тритием  $\sim 1$  см.

Если сравнивать эти значения с рассчитанными для  $\beta$ -источника, содержащего 20% изотопа Ni-63 [10], то для Si и SiC они в  $\sim 2.5$  раза больше. Но при этом следует учитывать, что период полураспада Ni-63 около 100 лет, а увеличение его содержания в радиоактивной пленке может позволить достичь таких же значений  $I_{sc}$ .

Работа финансировалась в рамках государственного задания № 007-00220-18-00 в ИПТМ РАН, № 16.7443.2017/БЧ — в НИФТИ ННГУ.

## Список литературы

- [1] L.C. Olsen, P. Cabauy, B.J. Elkind. *Physics Today*, **65** (12), 35 (2012).
- [2] Ю.С. Нагорнов. *Современные аспекты применения бетавольтаического эффекта* (Ульяновск, УлГПУ, 2012).
- [3] M.A. Prelas, C.L. Weaver, M.L. Watermann, E.D. Lukosi, R.J. Schott, D.A. Wisniewski. *Prog. Nucl. Energy*, **23**, 117 (2014).
- [4] S.T. Revankar, T.E. Adams. *J. Energy Power Sources*, **1**, 321 (2014).
- [5] T.R. Alam, M.A. Pierson. *J. Energy Power Sources*, **3**, 11 (2016).
- [6] H. Li, Y. Liu, R. Hu, Y. Yang, G. Wang, Z. Zhong, S. Luo. *Appl. Radiat. Isotopes*, **70**, 2559 (2012).

- [7] C. Thomas, S. Portnoff, M.G. Spencer. *Appl. Phys. Lett.*, **108**, 013505 (2016).
- [8] E.B. Yakimov. *Appl. Radiat. Isotopes*, **112**, 98 (2016).
- [9] В.Н. Павлов, В.Я. Панченко, М.А. Поликарпов, А.А. Свинцов, Е.Б. Якимов. *Поверхность*, **9**, 46 (2013).
- [10] С.И. Зайцев, В.Н. Павлов, В.Я. Панченко, М.А. Поликарпов, А.А. Свинцов, Е.Б. Якимов. *Поверхность*, **9**, 9 (2014).
- [11] H. San, S. Yao, X. Wang, Z. Cheng, X. Chen. *Appl. Radiat. Isotopes*, **80**, 17 (2013).
- [12] C.E. Munson IV, M. Arif, J. Streque, S. Belahsene, A. Martinez, A. Ramdane, Y. El Gmili, J.-P. Salvestrini, P.L. Voss, A. Ougazzaden. *J. Appl. Phys.*, **118**, 105101 (2015).
- [13] Ю.С. Нагорнов, В.Н. Мурашев. *ФТП*, **50**, 17 (2016).
- [14] А.А. Горбачевич, А.Б. Данилин, В.И. Корнеев, Э.П. Магомедбеков, А.А. Молин. *ЖТФ*, **86** (7), 94 (2016).
- [15] С.В. Булярский, А.В. Лакалин, И.Е. Абанин, В.В. Амеличев, В.В. Светухин. *ФТП*, **51** (1), 68 (2017).
- [16] L. Reimer. *Scanning Electron Microscopy*, **45**, 57 (1998).
- [17] М. Борн. *Атомная физика* (М., Наука, 1965).
- [18] T. Kobayashi. *Appl. Phys. Lett.*, **21**, 150 (1972).
- [19] R.C. Alig, S. Bloom. *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1522 (1975).
- [20] А.А. Лебедев, А.М. Иванов, Н.Б. Строкан. *ФТП*, **38**, 129 (2004).
- [21] C. Donolato. *Appl. Phys. Lett.*, **46**, 270 (1985).
- [22] Е.Б. Якимов. *Завод. лаб.*, **68**, 63 (2002).
- [23] E.B. Yakimov. *J. Alloys Comp.*, **627**, 344 (2015).
- [24] E.B. Yakimov. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **55**, 05FH04 (2016).
- [25] Е.Б. Якимов. *Поверхность*, **3**, 65 (2004).
- [26] B. Liu, K.P. Chen, N.P. Kherani, S. Zukotynski. *Appl. Phys. Lett.*, **95**, 233112 (2009).

Редактор Г.А. Оганесян

## Modeling of the titanium tritide-based beta-voltaic cell parameters

A.A. Svintsov<sup>1</sup>, E.B. Yakimov<sup>1,2</sup>, M.V. Dorokhin<sup>3</sup>, P.B. Demina<sup>3</sup>, Yu.M. Kuznetsov<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Institute of Microelectronics Technology, Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Russia

<sup>2</sup> National Research Technological University „MISiS“, 119049 Moscow, Russia

<sup>3</sup> Physical Technical Research Institute of N.I. Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** Modeling of  $\beta$ -voltaic power cells, which consist of combined beta-particles source and converter was carried out. A TiT<sub>2</sub> compound containing a radioactive isotope of tritium was used as a source. As a converter we considered the structures based on semiconductor materials, which are most commonly used for the  $\beta$ -voltaic power cells development: Si, SiC and GaAs. Using the Monte Carlo simulation method, the main parameters of the sources were calculated, in particular, the maximum achievable short-circuit current values were estimated.