



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

پدرام ملکی^۱، غلامرضا اطاعتی^{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: ۴۴۱۳-۱۵۸۷۵، تهران - ایران

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 چشمه نیکل-۶۳ داخل نیمه‌هادی سیلیکون شبیه‌سازی گردیده، سپس با بهره‌بردن از یکی از قابلیت‌های کد سیلواکو (پارامتر F.RADIATE دستور BEAM) تابع مترجم در محیط C++ تعریف می‌شود. در انتها 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 16 mm^2 و چشمه با اکتیویته 1 mCi انجام شد و نتایج آن با نتایج تجربی و دو روش تحلیلی مقایسه شده‌اند. سپس این محاسبات برای باتری با اکتیویته 100 mCi ، سطح مقطع 1 cm^2 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 نیمه هادی 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: میکرو باتری 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 ^{63}Ni 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 mm^2 cross-section and 1 mCi activity of radioisotope ^{63}Ni 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 cm^2 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, ^{63}Ni beta particles source, Silicon semiconductor

*Email: etaati.reza@gmail.com

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 فن‌آوری 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 فن‌آوری در این زمینه، گزینه‌های مختلفی مانند سلول‌های خورشیدی، باتری‌های شیمیایی جدید، تأمین‌کننده مایکروویو [۱] و مولدهای ارتعاش^۲ [۲-۴] 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 رادیویوژنوتوپ‌ها، عدم نیاز به ذخیره‌سازی سوخت، امکان ساخت در مقیاس کوچک (فشرده‌سازی)، 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 فن‌آوری‌های جدید از قبیل سیستم‌های میکروالکترومکانیکی^۳ (MEMS) و اینترنت اشیا^۴ (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 چشمه ذرات بتا، بر توزیع انباشت آن در جاذب و بنابراین بر طراحی و عملکرد باتری تأثیر می‌گذارد [۶-۱۴]، 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 متمرکز بوده است.

هدف از این مقاله ارایه رویکردی است که با افزایش دقت محاسبات و به دست آوردن چگونگی توزیع مکانی واقعی انباشت انرژی که میزان تولید وابسته به مکان زوج الکترون-حفره^۵ را درون نیمه‌هادی میکروباتری بتاولتائیک مشخص

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 تراورد 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.

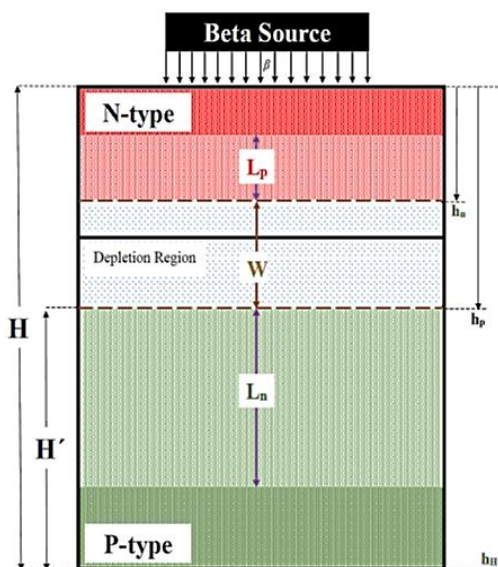
۲. مواد و روش‌ها

۲.۱ 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 چشمه بتا^۶ (η_β)، بازدهی اتصال^۷ (η_c) و بازدهی نیمه‌هادی^۸ (η_s).

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

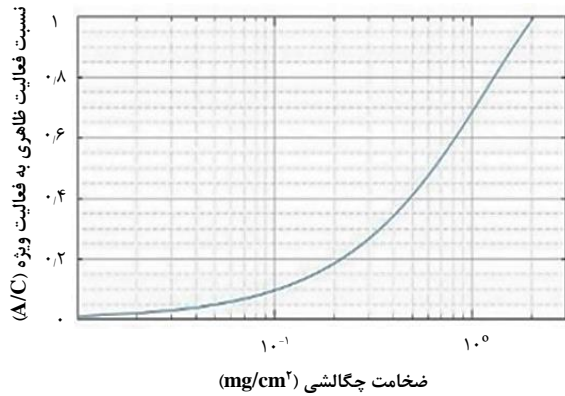
واضح است که برای دستیابی به بیشینه بازدهی ممکن، هر یک از آن‌ها باید بیشینه باشد.



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

6. Beta Source Efficiency (η_β)
7. Coupling Efficiency (η_c)
8. Semiconductor Efficiency (η_s)

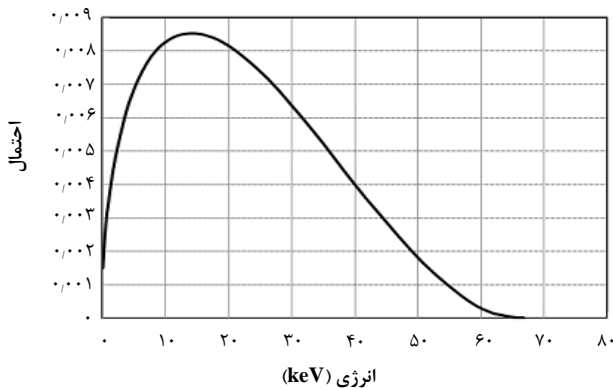
1. Ehrenberg
2. Vibration Generator
3. Micro-Electromechanical Systems (MEMS)
4. Internet of Things (IOT)
5. Electron-Hole Pairs (EHPs)



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

جدول ۱. رادیوایزوتوپ‌های منتخب به عنوان چشمه میکروباتری بتاولتائیک

رادیوایزوتوپ	E_{max} (keV)	نیمه‌عمر (سال)	E_{ave} (keV)
${}^3\text{H}$	۱۸٫۵	۱۲٫۳۳	۵٫۷
${}^{32}\text{P}$	۱۷۱۰	۰٫۰۴	۶۲۹٫۹
${}^{33}\text{P}$	۲۴۹	۰٫۰۷	۷۶٫۶
${}^{35}\text{S}$	۵۰۱	۰٫۲۸	۱۶۷
${}^{63}\text{Ni}$	۶۷	۱۰۰٫۱	۱۷٫۱
${}^{85}\text{Kr}$	۶۸۷	۱۰٫۷۶	۲۵۱
${}^{90}\text{Sr}$	۵۴۶	۲۸٫۸	۱۹۶
${}^{147}\text{Pm}$	۲۲۰	۲٫۶	۶۵
${}^{204}\text{Tl}$	۷۶۴	۳٫۸	۲۴۵



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

۳.۲ بازدهی جفت‌شدگی (η_c)

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

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

۲.۲ بازدهی چشمه بتا (η_β)

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

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

فعالیت ویژه، خود جذب و ضخامت چشمه، عواملی هستند که بر بازدهی چشمه 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/cm²) عبارت است از [۱۵]:

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

که در آن C (Ci/g) فعالیت ویژه و μ_m (cm²/mg) ضریب تضعیف جرمی می‌باشد.

$$\mu_m = \frac{0.17}{(E_{max})^{1.43}} \quad (4)$$

از سوی دیگر انتخاب رادیوایزوتوپ مناسب به عنوان چشمه (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 چشمه 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، ۲۲۵ و ۳۵۰ کیلو الکترون-ولت به ترتیب برای Si، GaAs و Ge [۱۶]) و عدم نفوذ در لایه بیرونی پوست انسان [۱۷] همواره به عنوان یکی از بهترین گزینه‌ها برای چشمه بتا مطرح بوده است.

همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده، ${}^{63}\text{Ni}$ مانند دیگر تابش‌کننده‌های بتا و برخلاف چشمه‌های آلفا (که در گروه انرژی‌های گسسته تابش می‌نمایند)، دارای یک توزیع انرژی پیوسته از صفر تا بیشینه مقدار ۶۶٫۷ keV می‌باشد [۶].

همان‌طور که معادلات (۹) و (۱۰) نشان می‌دهند، بازدهی نیمه‌هادی (I_s) تابعی از ولتاژ مدار باز (V_{oc})، فاکتور پرکنندگی (FF) و انرژی باند شکاف نیمه‌هادی می‌باشد. ولتاژ مدار باز برابر است با [۲۳، ۲۲، 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 ایده‌ال، 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 نهنجار شده می‌باشد.

$$V_{oc} = \frac{qV_{oc}}{kT} \quad (13)$$

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.

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

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 $Q \rightarrow 1$ می‌توان فرض کرد جریان مدار کوتاه (J_{sc}) تقریباً برابر با:

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

J_{max} 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]:

$$\varepsilon = 2.18E_g + 0.5 \quad (9)$$

که در آن E_g (۳.۶۴ eV) برای Si [۲۱]، مقدار انرژی مورد نیاز برای انتقال الکترون‌ها از باند ظرفیت به باند رسانش می‌باشد.

۴.۲ بازدهی نیمه‌هادی (η_s)

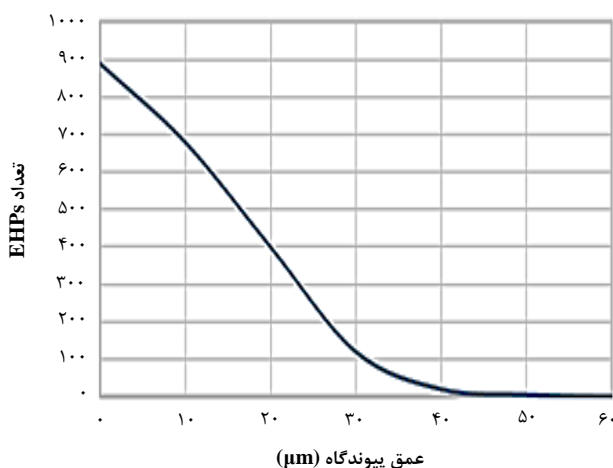
بازدهی نیمه‌هادی عبارت است از [۱۹]:

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

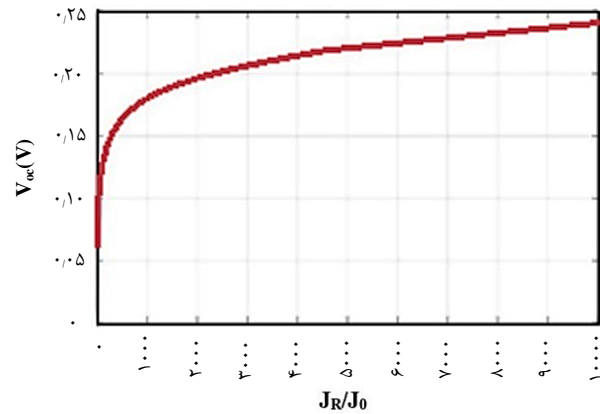
حفره تولید شده در این ۵۰۰۰ قسمت محاسبه گردید. نیمه‌هادی به ترتیب به ۱۰، ۵۰ و ۱۰ قسمت در مختصات X ، Y و Z تقسیم‌بندی و مختصات Y به عنوان عمق باتری در نظر گرفته شده است. در این مقاله شبیه‌سازی برای 10^8 ذره و چشمه با اکتیویته‌های ۱ و ۱۰۰ میلی‌کوری به ترتیب با سطح مقطع‌های ۰/۱۶ و ۱ سانتی‌مترمربعی انجام شده است. بیشینه خطای محاسبات ۱/۴۱٪ به دست آمد.

۲.۳ برنامه C++ (بخش مترجم)

پس از محاسبه توزیع سه بعدی زوج الکترون - حفره‌های تولید شده در نیمه‌هادی 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 سیلوکوا^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 چشمه سطحی ^{63}Ni در پیوند سیلیکونی $p-n$ بر حسب عمق [۶].



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

همان‌طور که در شکل ۵ قابل مشاهده است با افزایش عمق نیمه‌هادی، تعداد زوج الکترون - حفره تا عمق حدود ۴۰ میکرومتر روندی نزولی داشته (از ۹۰۰ به چند ده می‌رسد) و برای عمق‌های بیش از آن تقریباً به سمت صفر میل می‌کند. این عمق در این مقاله حدود $39 \mu\text{m}$ محاسبه شده است.

۳. کد ترکیبی MCNPX-SILVACO

در این مقاله بر اساس مفهوم، ساختار و عوامل مؤثر بر بهره‌وری میکروباتری‌های مبتنی بر اثر بتا-ولتائیک (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^۱ (بخش چشمه)

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 استفاده شده است. بدین ترتیب که ابتدا با استفاده از تالی F۶ کد MCNPX (نسخه ۲/۶ با فایل کتابخانه‌ای پیش‌فرض الکترون $e10^3$) انباشت انرژی ناشی از نیکل-۶۳ را درون ۵۰۰۰ قسمت^۲ پیوند $p-n$ سیلیکون (نیمه‌هادی) به دست آورده سپس با عنایت به مقدار انرژی لازم جهت تولید هر زوج الکترون - حفره در سیلیکون ($3/64 \text{ eV}$) [۲۱]، مقدار زوج الکترون -

3. ATLAS-SILVACO
4. ATLAS C-Interpreter Function

1. Monte Carlo N-Particle Code
2. Segment

۳.۲ 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. شبیه‌سازی سیلوکو 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 شبیه‌سازی جهت محاسبه پارامترهای الکتریکی باتری بر اساس نتایج حاصله وابسته به مکان MCNPX، استفاده شده است.

۴.۲ مزیت شبیه‌سازی ترکیبی

به علت استفاده از طیف β به جای انرژی متوسط، توزیع دلخواه اکتیویته چشمه 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} , V_{oc} , η) 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 چشمه 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 دستور BEAM در کد ATLAS-SILVACO

۳. استفاده از شبیه‌سازی سیلوکو 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 [۶]، شبیه‌سازی شد و نتیجه‌های به‌دست آمده با اندازه‌گیری‌ها مقایسه گردید. از طرف دیگر جهت بررسی دقت شبیه‌سازی با این روش نسبت به سایر روش‌های تحلیلی، مقایسه‌ای با نتیجه‌های تحلیلی مرجع‌های [۵، ۲۶] انجام شد. برای شبیه‌سازی با کد تلفیقی MCNPX-SILVACO از چشمه‌ی بتای نیکل-۶۳ با طیف انرژی شکل ۳ و با اکتیویته ۱ mCi، نیمه‌هادی با سطح مقطع 16 mm^2 ، غلظت ناخالصی‌های $N_d = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ و $N_a = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ استفاده شد.

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

جهت مقایسه دقت روش‌ها، مقادیر 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 16 mm^2 ، محاسبه شده با استفاده از کد تلفیقی MCNPX-SILVACO و دو روش تحلیلی مراجع [۵] و [۲۶] با نتایج تجربی

مشخصه‌های میکروباتری	نمونه تحلیلی (۲) [۲۶]	نمونه تحلیلی (۱) [۵]	نمونه تجربی [۶]	کد تلفیقی
جریان اتصال کوتاه (نانوامپر)	۲،۸۶	۲،۴۴	۲،۴۱	۲،۴۲
ولتاژ مدار باز (میلی‌ولت)	۱۵۷	۱۶۱	۱۱۵	۱۲۸
حداکثر توان خروجی (نانوات)	-	-	۰،۲۴	۰،۲۷

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

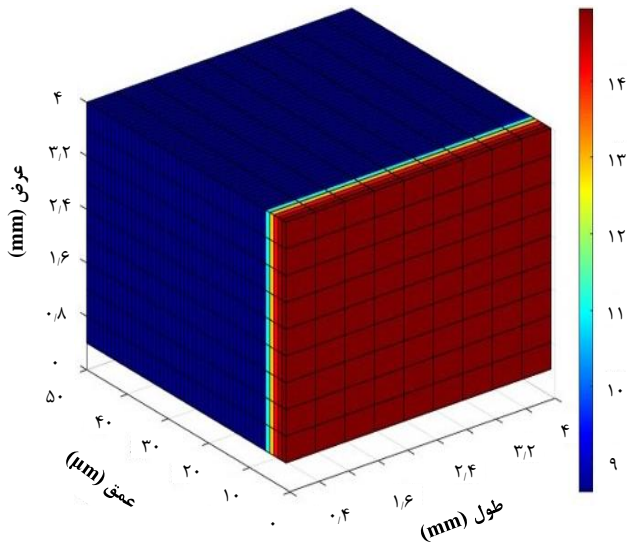
مرجع	درصد خطای نسبی V_{oc}	درصد خطای نسبی J_{sc}	بیشینه توان خروجی
نمونه تحلیلی [۵]	۴۰	۱،۲۴	--
نمونه تحلیلی [۲۶]	۳۶،۵۲	۱۸،۶۷	--
این مقاله	۱۱،۳۰	۰،۴۱	۱۲،۵۰

1. Power Devices

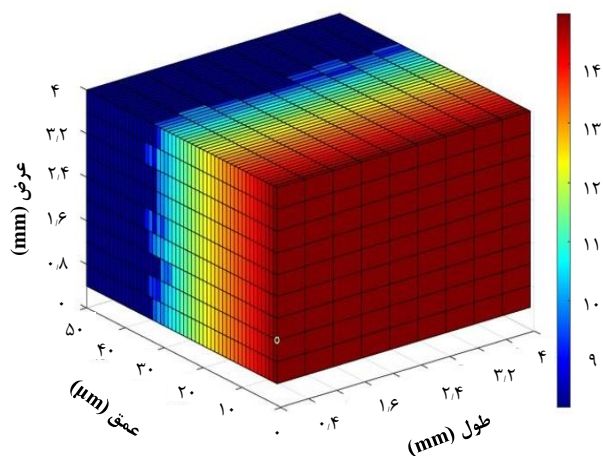
2. Roadmap for International Semiconductors

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 مرجع [۲۷]	مشخصه‌های میکروباتری
۵۹۶٫۸	۵۷۳٫۳	جریان اتصال کوتاه (نانوآمپر)
۲۶۸	۲۵۳	ولتاژ مدار باز (میلی‌ولت)
۱۱۰٫۴۷	۹۹٫۸۵	بیشینه توان خروجی (نانووات)
۵٫۴۶	۴٫۹۴	بازدهی



شکل ۶. توزیع وابسته به مکان تعداد زوج الکترون-حفره تولید شده در نیمه‌هادی توسط انرژی متوسط 17.1 keV ذرات بتای نیکل-۶۳ محاسبه شده توسط کد تلفیقی MCNP (بیشینه خطای محاسبات 0.0141). اعداد رنگ‌ها نشان تعداد زوج تولید شده برحسب 10^x هستند که x عدد رنگ است.



شکل ۷. توزیع وابسته به مکان زوج الکترون-حفره تولید شده در نیمه‌هادی توسط طیف انرژی ذرات بتای نیکل-۶۳ محاسبه شده توسط کد MCNP. (حداکثر خطای محاسبات 0.0141). اعداد رنگ‌ها نشان تعداد زوج تولید شده برحسب 10^x هستند که x عدد رنگ است.

همان‌طور که مشاهده می‌شود مقدار خطای 0.1130% و 0.41 برای شبیه‌سازی کمیت‌های V_{oc} و برای J_{sc} با کد تلفیقی بسیار کم‌تر از مقادیر به‌دست آمده به روش تحلیلی در مراجع [۵] و [۲۶] است که این خود مؤید به واقعیت نزدیک‌تر بودن نتایج و صحت بیش‌تر روش به‌کار رفته در کد تلفیقی است. به‌عبارت 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 صحت‌سنجی 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 (چشمه نیکل-۶۳)، سطح مقطع 1 cm^2 ، غلظت ناخالصی‌های $N_a = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ و $N_d = 3.16 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ نتیجه شبیه‌سازی با کد تلفیقی به ترتیب برای جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، قدرت خروجی و بازدهی برابر است با: 596.8 نانوآمپر، 268 میلی‌ولت، 110.47 نانووات و 5.46 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 به‌دست آمده از کد تلفیقی نسبت به روش تحلیلی باتری بتاولتائیک مرجع [۲۷] مندرج در جدول ۴ به واقعیت نزدیک‌تر باشد.

۵. بحث و نتیجه‌گیری

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

8. M. Mohamadian, S.A.H. Feghi, 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).
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 ^{90}Sr 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- ^{63}Ni beta voltaic battery*, [Science China](#), **55**, 990 (2012).

همان‌طور که مشاهده می‌شود در این شبیه‌سازی، بیشینه عمق نفوذ ذرات بتای منتشر شده از چشمه 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 چشمه 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.

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).

1. Theory of Continuous Slowing-Down Approximation Range