



Optimization design of a GaAs-based betavoltaic battery using Ni-63 source

吉林大学物理学院

郑人洲

2019.10.10



主要内容

1. 研究背景
2. 放射源自吸收规律及其 β 粒子在材料中运输过程的研究
3. β 辐射伏特效应核电池结构参数的优化设计
4. 半导体器件模拟仿真
5. 总结与展望



1. 研究背景

1.1. 微型动力源的需求背景

随着科技进步和社会发展，以微机电系统（Micro Electro-Mechanical Systems，简称MEMS）为代表的低功率电子器件的研究和应用日益受到重视。MEMS是以微细加工技术为基础，将具有毫米级尺寸和微米级分辨力的微型机构、微型传感器、微型执行器以及电子线路、通信和微型动力源等组合在一起的微机电器件、装置或系统。

深空探测、军事国防、生物医疗、环境监控、物联网等领域...

随着MEMS的快速发展与广泛应用，微型动力源的研究日渐显得尤为迫切，并已成为限制MEMS发展的瓶颈之一。对所用微型动力源的要求一般体现在：微型化、集成化；特殊领域要求：长寿命、高能量密度、长寿命内可持续自供电。

1. 研究背景

1.1. 微型动力源的需求背景

MEMS常规微型动力源

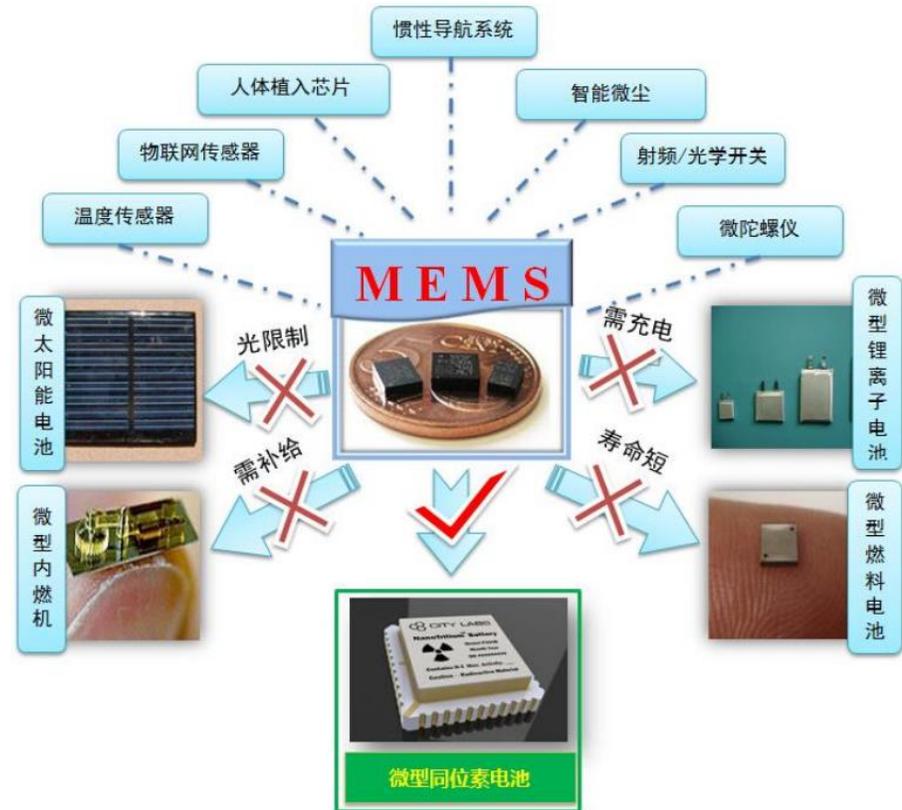
微型燃料电池：化学能→电极反应→电能，需要不断补充燃料

微型锂电池：依靠锂离子在正极和负极之间移动来工作，需要频繁充电

微型太阳能电池：依赖太阳光

微型内燃机：消耗燃料，噪声和振动比较大

微型同位素电池以其独特的优势，能够弥补常规微型动力源的不足，是特殊应用领域MEMS系统需求的有效解决方案之一。

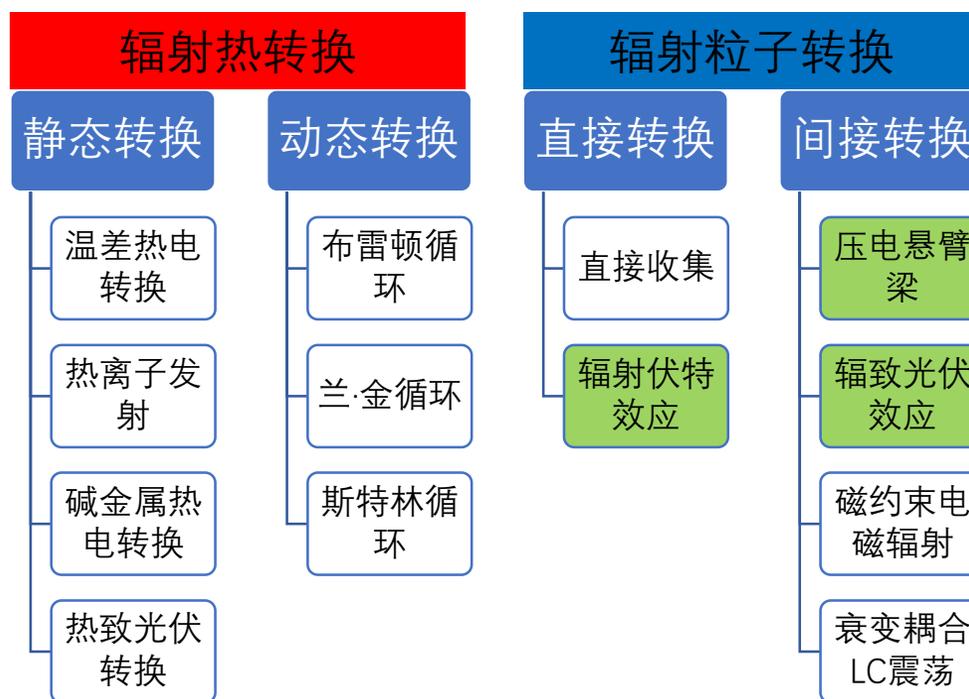


1. 研究背景

1.1. 微型动力源的需求背景

微型同位素电池是同位素电池的一种，都是利用放射性同位素衰变释放的载能粒子（如 α 粒子、 β 粒子和 γ 射线等）或衰变过程中产生的热能，并将这些能量转换为电能的装置。

能量转换机制



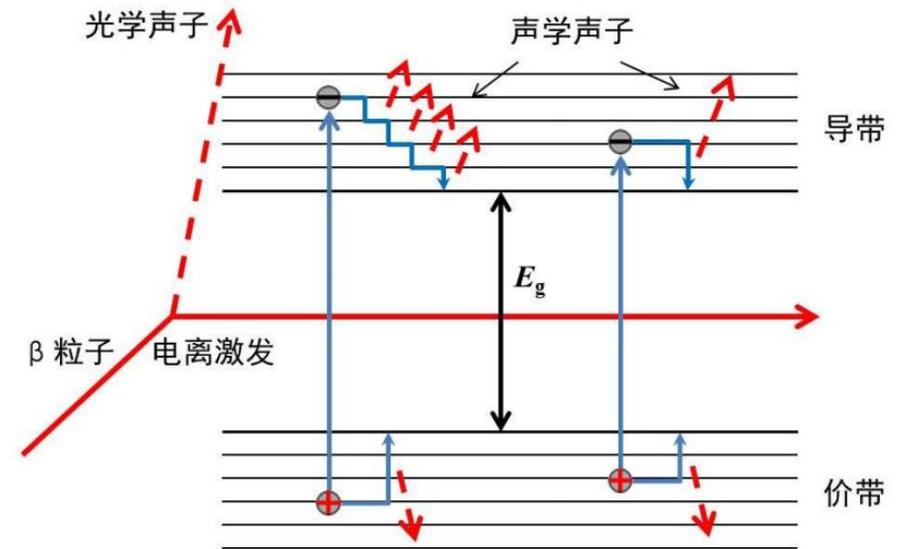
β 辐射伏特效应核电池

- 使用寿命长
- 能量密度高，同等体积常规电池的 $10^4 - 10^6$ 倍
- 结构紧凑、体积小、重量轻
- 工作稳定
- 环境适应性强
- 长寿命内可持续供电
- 易防护

1. 研究背景

1.2. β 辐射伏特效应核电池的工作原理

- 半导体材料吸收载能 β 粒子能量，通过电离作用在材料内部产生大量的电子-空穴对
- 辐生电子-空穴对被半导体换能器件内建电场分离
- 通过一定的运输机制，使带负电的自由载流子（电子）向阴极迁移，带正电的自由载流子（空穴）向阳极迁移，闭合回路中通过电流做功实现将放射源的衰变能转换为电能的过程
- 最后，核电池内到达阳极的电子与空穴复合使材料回到基态



β 辐射伏特效应核电池电子空穴对产生机理示意图

1. 研究背景

1.3. β 辐射伏特效应核电池的发展历史与研究现状

1913年，英国物理学家Mosley首次展示了一种 β 射线核电池，这种核电池是通过收集 β 粒子形成高电势将 β 射线能量直接转换成电能。

[参考文献] Moseley, H.G.J., Harling, J. The attainment of high potentials by the use of radium. Proc. R. Soc. Lond. A 88, 471 (1913).

1937年，Becker 和 Kruppke利用阴极电子射线轰击硒（Se）光电元件时观察到了电子-空穴对的产生，这种现象被称为电子伏特效应。这是首次报道电子伏特效应的研究工作。

[参考文献] Becker A., Kruppke E, et al. Zur Kenntnis des Selenphotoelements. 1937, 107(7-8):474-484.

1953年，第一块真正意义上的 β 辐射伏特效应核电池诞生。Rappaport等人用 β 放射源（ $^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$ ）释放的 β 粒子轰击硅基p-n结半导体器件并用电极收集在半导体器件内部产生的辐生电子-空穴对，这种现象被称为 β 辐射伏特效应。该装置完成了将 β 放射源的衰变能转换为电能的过程。

[参考文献] Rappaport P. The Electron-Voltaic Effect in p-n Junctions Induced by Beta-Particle Bombardment. Physical Review. 1953, 93: 246-247.



1. 研究背景

1.3. β 辐射伏特效应核电池的发展历史与研究现状

现有 β 辐射伏特效应核电池的研究涉及多个方面，包括效率极限、优化设计、不同半导体材料及环境因素影响等。

放射源：衰变类型、半衰期、最大能量、平均能量、比活度、比功率...

半导体材料：辐射损伤阈值、输出特性、材料及器件加工工艺...

Si、Ge、GaAs、SiC、GaN、ZnO、C...

电极材料、器件结构、封装...

表 1.1 辐射伏特效应同位素电池常用同位素源

同位素源	衰变类型	半衰期 (年)	最大能量 (MeV)	平能能量 (MeV)	比活度 (Ci/g)	比功率 (W/g)
^3H	β^-	12.32	0.01860	0.00568	9678.90	0.326
^{32}Si	β^-	153	0.213	0.0647	73.07	0.028
^{33}P	β^-	0.069	0.249	0.0766	156084.16	70.876
^{35}S	β^-	0.239	0.16747	0.04883	42699.26	12.360
^{63}Ni	β^-	101.2	0.06587	0.01713	56.11	0.006
^{85}Kr	β^- , 弱 γ	10.752	0.687	0.25051	391.43	0.110
^{90}Sr	β^-	28.9	0.546	0.1958	137.54	0.160
^{90}Y	β^-	0.007	2.2839	0.93471	543753.50	601.164
^{106}Ru	β^-	1.019	0.03940	0.01003	3313.11	0.197
^{147}Pm	β^- , 弱 γ	2.6234	0.2247	0.06196	927.63	0.149
^{204}Tl	β^- , 弱 X	3.783	0.7634	0.24393	463.54	0.670
^{210}Po	α , 弱 γ	0.379	—	5.30449	4493.35	120.505
^{241}Am	α , 弱 γ 、X	432.26	—	5.47906	3.43	0.108
^{244}Cm	α , 弱 γ 、X	18.1	—	5.79450	81.00	2.705

[参考文献] 刘云鹏. β 辐射伏特效应同位素电池的设计、制备及环境因素影响 [M]. 2014 年 9月.

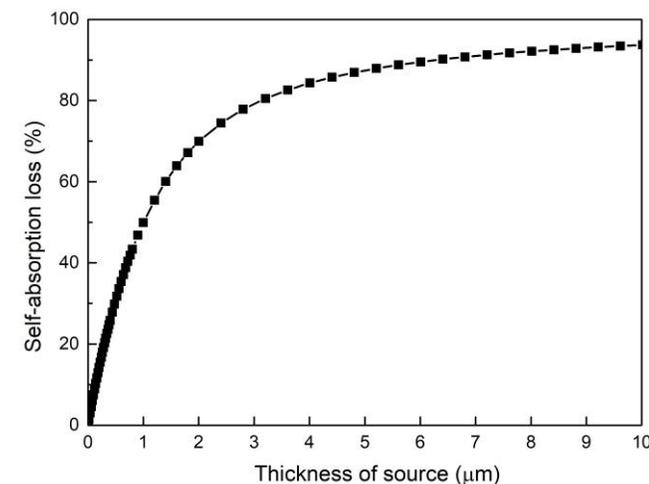
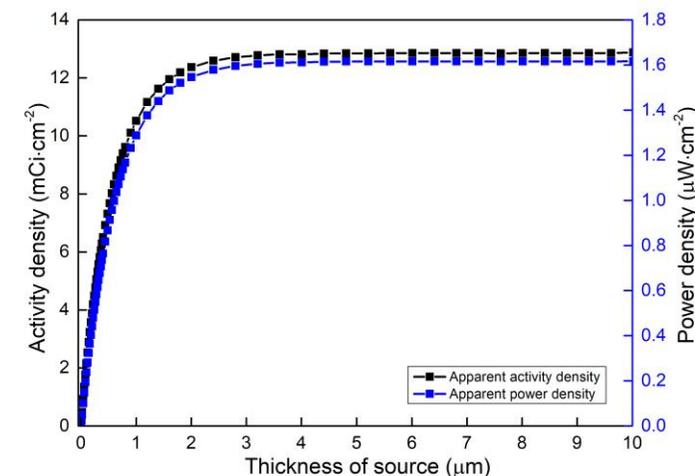
2. 放射源自吸收规律及其 β 粒子在材料中运输过程的研究

2.1. ^{63}Ni 源自吸收规律研究

β 粒子从放射源出射的过程存在自吸收效应， β 粒子会与放射源材料本身发生相互作用，损失一定能量甚至停留在放射源内部，这将导致放射源的表面出射活度密度和表面出射功率密度小于其总活度密度和总功率密度。

当放射源厚度不断增加时，表面出射活度密度和表面出射功率密度将会有所增加但最终会趋于饱和值，同时自吸收损失率也逐渐向100%靠近，这将影响 β 辐射伏特效应核电池对放射源能量的利用效率，并且会限制核电池的输出上限。

β 粒子在换能材料表面会发生反散射，由此带来了一定的能量损失。

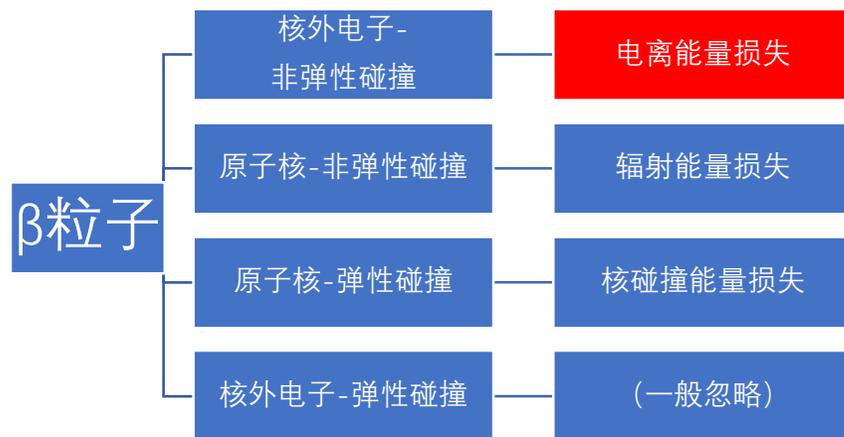


^{63}Ni 源表面出射活度密度、功率密度(上), 自吸收损失率(下)和厚度的关系

2. 放射源自吸收规律及其β粒子在材料中运输过程的研究

2.2. ⁶³Ni源β粒子在材料中的运输过程

射线与物质相互作用



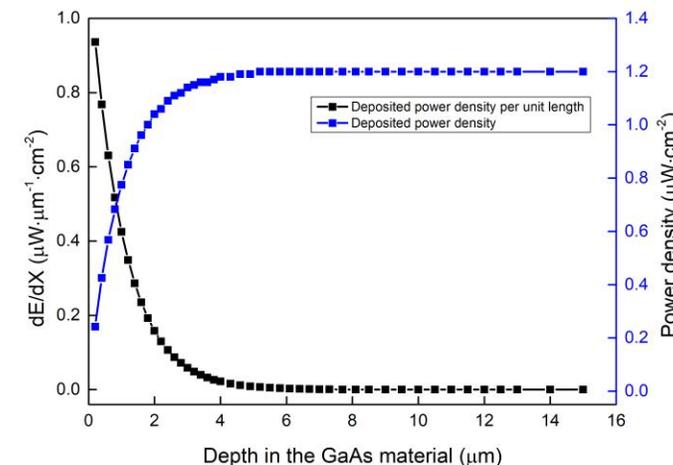
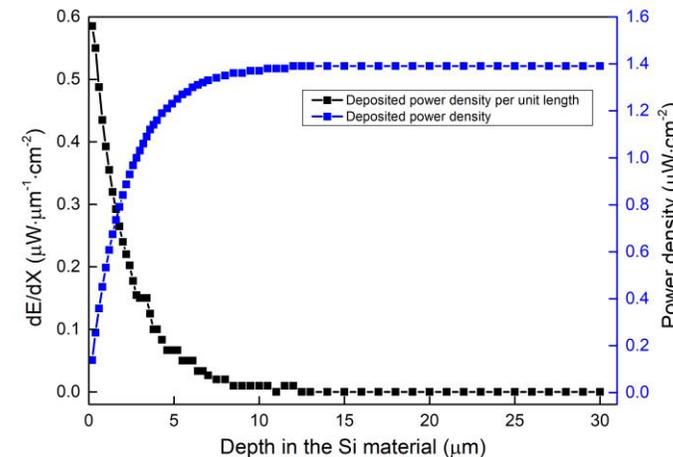
不同放射源β粒子能量不同，不同半导体材料原子序数不同、电子密度不同，导致能量沉积分布遵循不同的规律。

$$E_{dep}(X) = \frac{dE}{dX} = G_0 e^{-\alpha X}$$

计算电子空穴对的产生速率

$$G(X) = E_{dep}(X) / \varepsilon$$

$$\varepsilon = 2.8E_g + 0.5eV$$

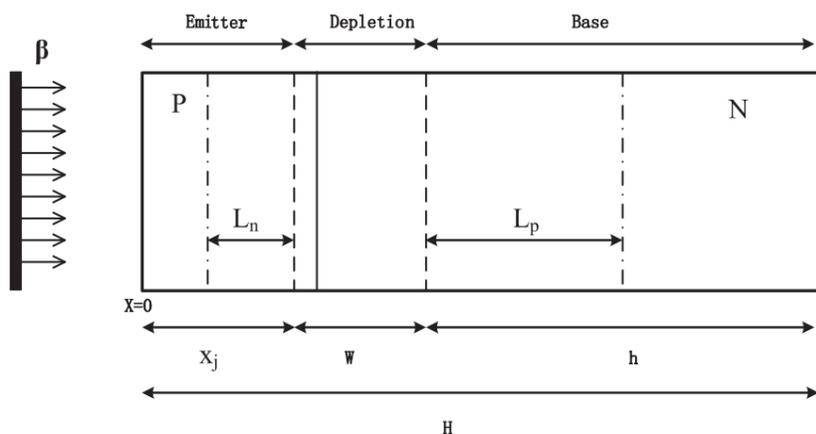


⁶³Ni源 (2 μm)在Si (上)、GaAs (下)材料中的能量沉积分布

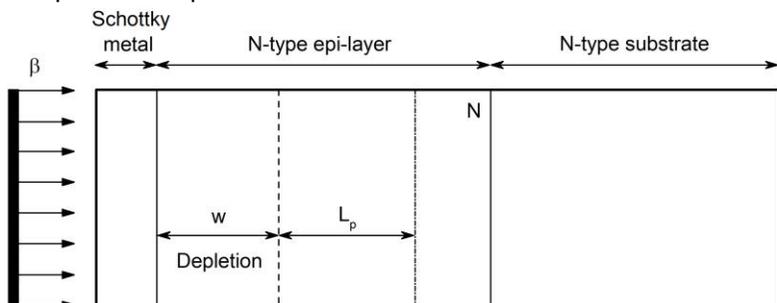
3. β 辐射伏特效应核电池结构参数的优化设计

3.1. 结构参数优化设计模型的建立

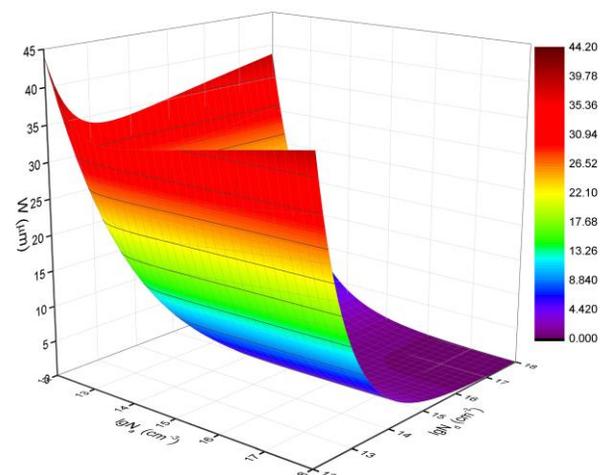
- β 辐射伏特效应核电池产生辐生电流的有效区域是换能单元的耗尽层及耗尽层两边一个少数载流子扩散长度范围内的区域。
- 扩散长度越长，耗尽层外产生的电子空穴对越容易扩散到耗尽层被收集，对短路电流密度的贡献越大。



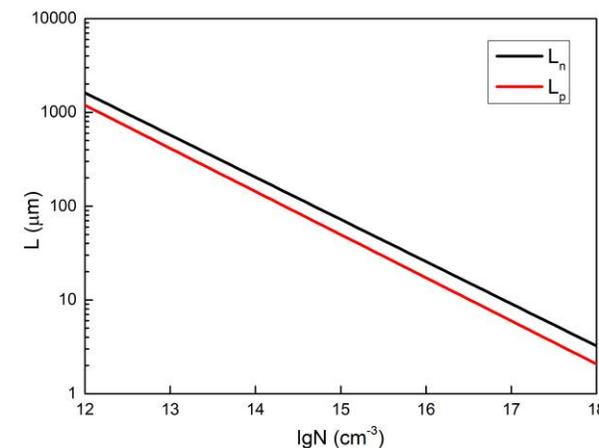
p-n结型 β 辐射伏特效应核电池的结构示意图



Schottky型 β 辐射伏特效应核电池的结构示意图



GaAs基p-n结耗尽层宽度与各区掺杂浓度的关系



GaAs材料少子扩散长度与掺杂浓度的关系

- p-n结型核电池的结深应尽可能小，且选取n型衬底材料。

3. β 辐射伏特效应核电池结构参数的优化设计

3.1. 结构参数优化设计模型的建立

电子空穴对的产生、复合与收集

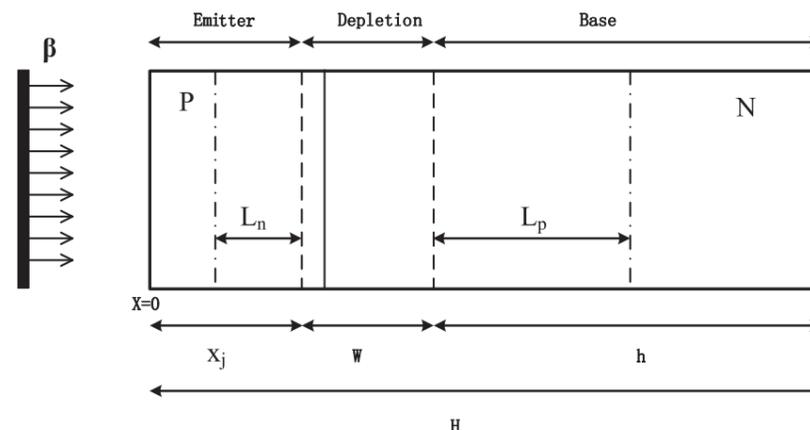
- β 粒子在换能材料中的能量沉积分布
- 载流子的连续性方程、双极输运方程、电场的泊松方程

辐生电流密度的计算

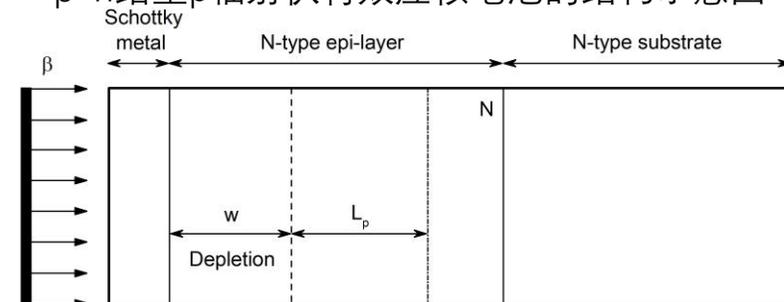
- 发射极电流 $J_E = \frac{G_0 L_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \cdot \frac{q}{\epsilon} \cdot \left\{ \frac{\frac{S_n L_n}{D_n} + \alpha L_n - \exp(-\alpha \chi_j) \left[\frac{S_n L_n}{D_n} \cosh\left(\frac{\chi_j}{L_n}\right) + \sinh\left(\frac{\chi_j}{L_n}\right) \right]}{\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh\left(\frac{\chi_j}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{\chi_j}{L_n}\right)} - \alpha L_n \exp(-\alpha \chi_j) \right\}$
- 基极电流 $J_B = \frac{G_0 L_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} \exp(-\alpha(\chi_j + w)) \cdot \frac{q}{\epsilon} \cdot \left\{ \alpha L_p - \frac{\frac{S_p L_p}{D_p} \left[\cosh\left(\frac{h}{L_p}\right) - \exp(-\alpha h) \right] + \sinh\left(\frac{h}{L_p}\right) + \alpha L_p \exp(-\alpha h)}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh\left(\frac{h}{L_p}\right) + \cosh\left(\frac{h}{L_p}\right)} \right\}$
- 耗尽层电流 $J_D = \frac{G_0}{\alpha} e^{-\alpha \chi_j} (1 - e^{-\alpha w}) \cdot \frac{q}{\epsilon}$

核电池输出参数计算

- 理想二极管方程
- 电流-电压特性曲线——最大功率点



p-n结型 β 辐射伏特效应核电池的结构示意图

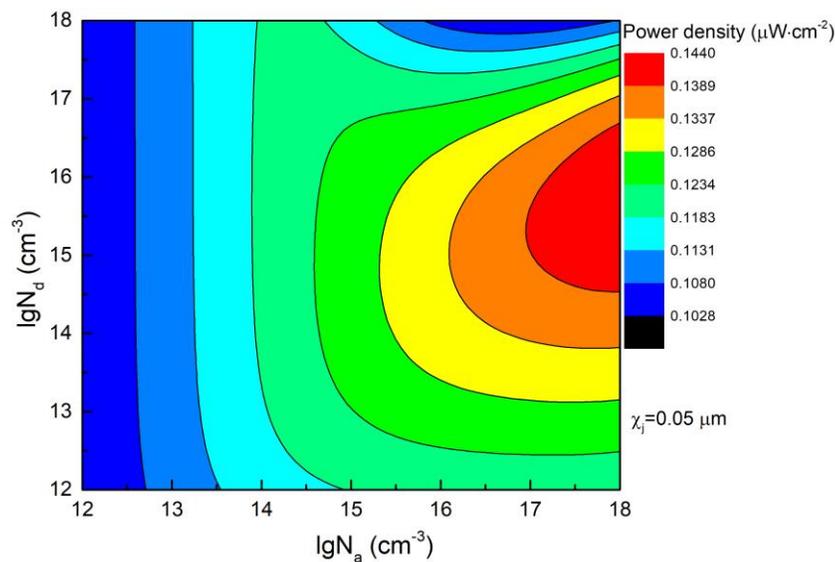
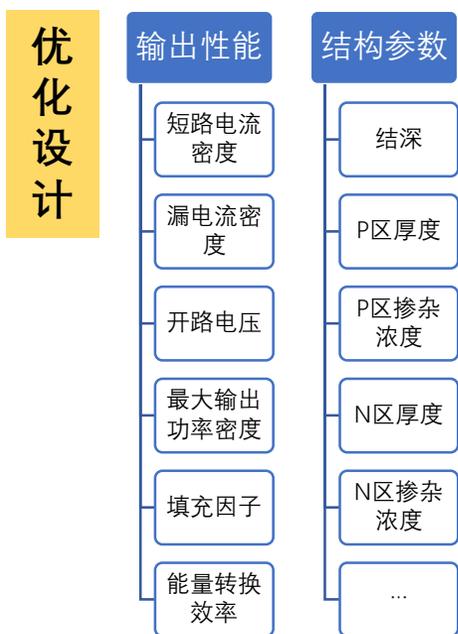


Schottky型 β 辐射伏特效应核电池的结构示意图

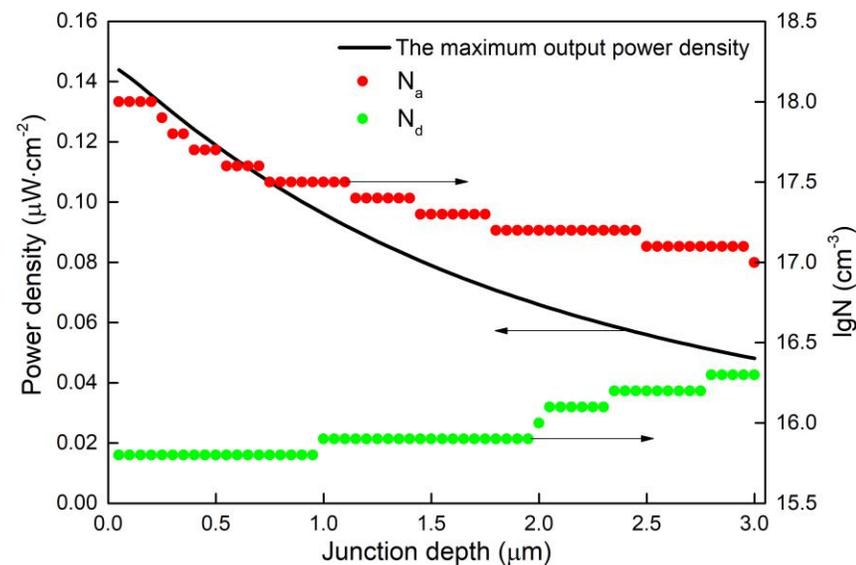
主要分析 β 粒子在半导体材料不同区域的能量沉积分布、P区掺杂浓度 N_a 、少子电子扩散长度 L_n 、扩散系数 D_n 、N区掺杂浓度 N_d 、少子空穴扩散长度 L_p 、扩散系数 D_p ，以及耗尽层宽度、结深对核电池输出参数的影响。

3. β 辐射伏特效应核电池结构参数的优化设计

3.2. 结果与讨论



GaAs基p-n结型核电池最大输出功率密度与各区掺杂浓度的关系 (结深0.05 μm)



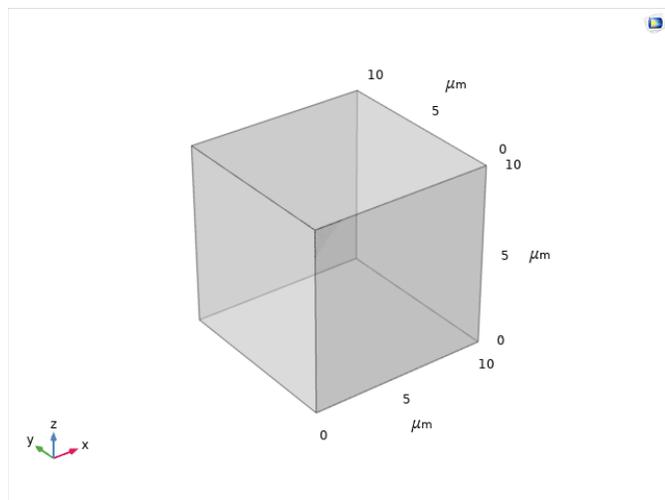
不同结深下核电池最大输出功率密度及相应各区掺杂浓度

短路电流密度0.249 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$, 开路电压0.685 V,
最大输出功率密度0.144 $\mu\text{W}/\text{cm}^2$, 总能量转换效率2.79%。

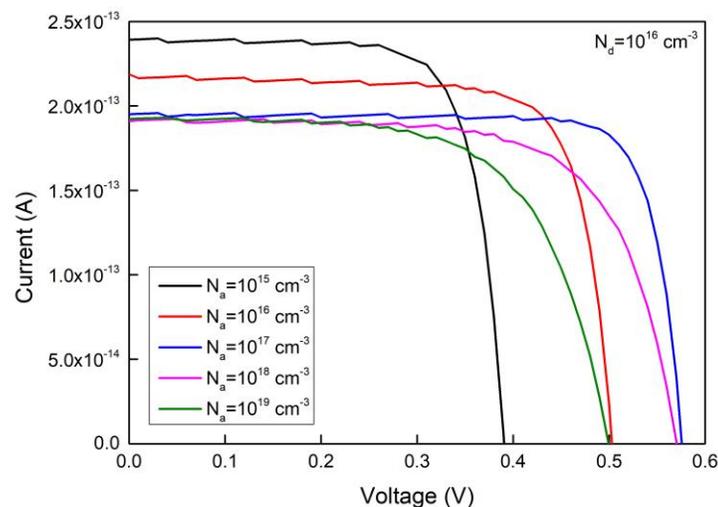
4. 半导体器件模拟仿真

COMSOL Multiphysics

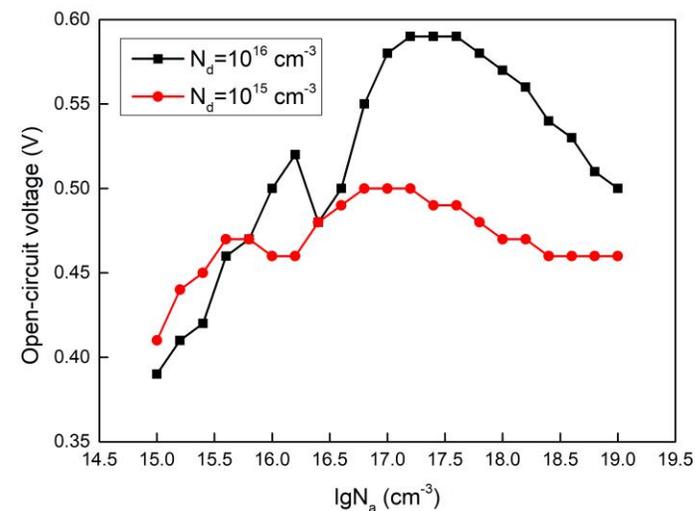
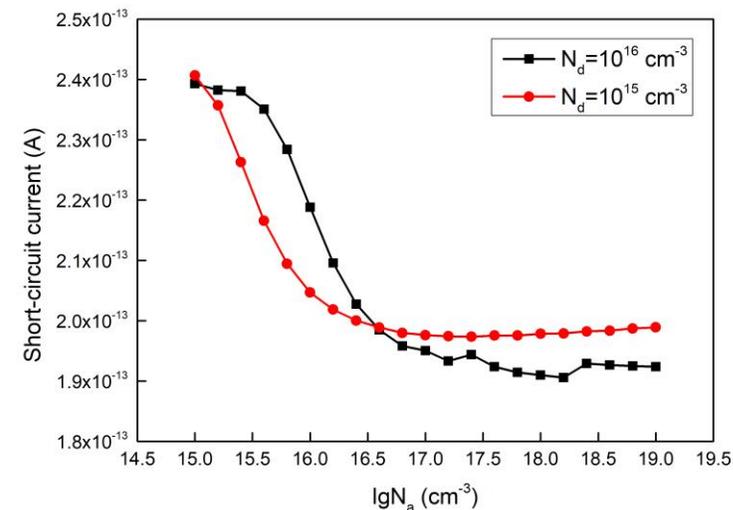
以有限元法为基础，通过求解偏微分方程（单场）或偏微分方程组（多场）来实现真实物理现象的仿真，分析半导体器件的运行状态。主要内容是将基于蒙特卡罗方法计算出的电子空穴对的产生速率引入到仿真软件中，模拟器件性能。



在长方体材料模型中，设定不同的掺杂区域以及掺杂浓度



GaAs基p-n结型核电池在不同掺杂条件下的I-V特性曲线

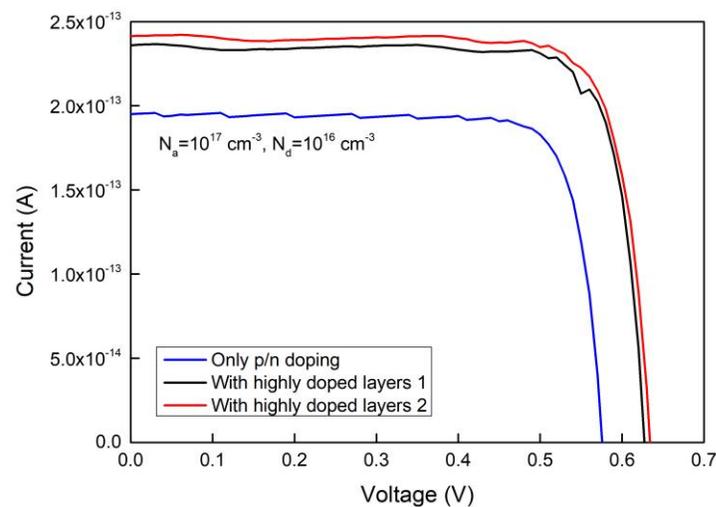


GaAs基p-n结型核电池短路电流、开路电压和各区掺杂浓度的关系

4. 半导体器件模拟仿真

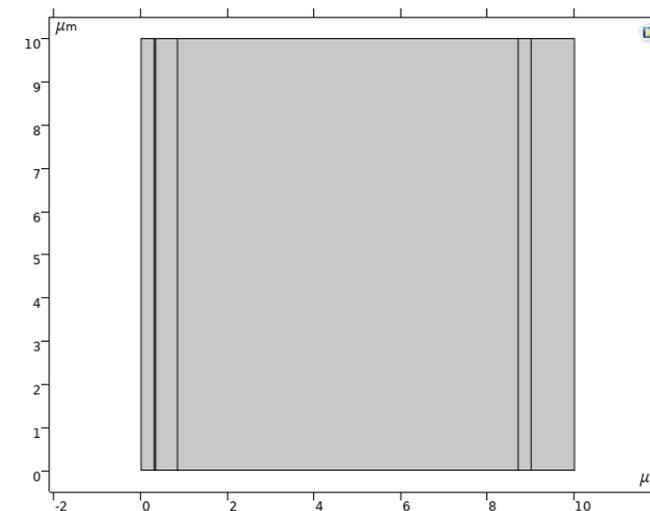
单结GaAs核电池叠层结构设计

在器件表面进行高掺杂，可有效提高电池的输出性能



GaAs基p-n结型核电池在不同掺杂条件下的I-V特性曲线

- 在主要辐射吸收区域以外采用与GaAs材料禁带宽度不同的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 材料，形成扩散势垒，将扩散到界面的少子反射回去，降低少子在界面复合的概率。
- 高掺杂形成 p^+-p 、 $n-n^+$ 结，形成漂移场加速辐生少子在电池中的输运，提高辐生电流的值。
- 对电池各层参数(材料组分、厚度、掺杂浓度)进行优化设计。



材料	厚度/ μm	掺杂浓度
p^+ -GaAs	0.3	N_{a1}
p - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	0.04	N_{a2}
p -GaAs	0.5	N_{a3}
n -GaAs	7.86	N_{d4}
n - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	0.3	N_{d5}
n -GaAs	1	N_{d6}

模拟不同材料、不同掺杂条件下半导体器件的工作状态，以实现 β 辐射伏特效应核电池进行优化设计和性能预测。器件的精细化结构设计我们还在探索之中...

5. 总结与展望

- 建立了 β 辐射伏特效应核电池的结构模型
- 搭建了核电池各结构参数与电池性能的理论关系
- 对放射源厚度以及换能单元材料组分、厚度、掺杂条件等进行了优化设计

该研究工作，可为 β 辐射伏特效应核电池的性能评估、器件设计、性能改进提供重要理论依据和数据支持。未来研究工作要在现有基础之上进行，搭建可精确预测电池各项输出性能随器件结构参数、环境因素变化的等效电路模型，并在器件制备方面取得一定的进展；同时，开展新材料、新结构、新机制方面的研究。



谢谢!