

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
MATHEMATICAL MODELLING



Научная статья

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-64-81

УДК 537.311.322; 621.383; 538.915; 681.586

Дата: поступления статьи: 13.12.2023  
после рецензирования: 19.01.2024  
принятия статьи: 28.02.2024

**М.В. Долгополов**

Самарский государственный технический университет, г. Самара, Российская Федерация  
E-mail: mikhaildolgopolov68@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8725-7831>

**М.В. Елисов**

Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация  
E-mail: maksimelisov2003@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-3097-2703>

**С.А. Раджапов**

Физико-технический институт НПО "ФИЗИКА-СОЛНЦЕ" АН РУз, г. Ташкент, Узбекистан  
E-mail: rsafti@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4615-027X>

**И.Р. Рахманкулов**

Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация  
E-mail: 79297014450@ya.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-9873-0093>

**А.С. Чипура**

Самарский государственный технический университет, г. Самара, Российская Федерация  
E-mail: al\_five@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0009-0004-0425-0653>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР  
ДЛЯ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ЭНЕРГИИ И ДАТЧИКОВ

**АННОТАЦИЯ**

Представлен комплекс программ моделирования построения последовательности энергетических зон гетеропереходов для анализа распределения носителей зарядов в гетероструктуре и внутренних характеристик, описания процессов переноса и аккумуляции заряда. Использовались аналитическая система Wolfram Mathematica и язык программирования Delphi. Основными элементами материалов задаются полупроводники, металлы контактных структур и области инжекции неравновесных носителей. Программы позволяют определять конструктивные характеристики материалов, активных зон и областей пространственного заряда, вычислять квазиуровни Ферми и встроенные потенциалы, а также эффективность гетероструктур в целом и для разделения–сбора заряда, эмиссии высокоэнергетичных бета-электронов и генерации неравновесных носителей заряда в активной области пространственного заряда, накопления заряда, определения типов барьерных гетеропереходов и типа металлизации контактности барьерного или омического, в том числе для устройств в интегральном исполнении. Программа и результаты могут быть использованы для определения свойств полупроводниковых гетероструктур в разработках преобразователей энергии и датчиков в фото- и бетавольтаике

**Ключевые слова:** комплекс программ, математическое моделирование, гетеропереходы, гетероструктуры, полупроводники, инжекция, энергопреобразователи, датчики, активированные наноразмерные гетеропереходы, *p-n*-переходы, электронная зонная структура.

**Цитирование.** Долгополов М.В., Елисов М.В., Раджапов С.А., Рахманкулов И.Р., Чипура А.С. Моделирование полупроводниковых гетероструктур для преобразователей энергии и датчиков // Вестник Самарского университета. Естественная серия / Vestnik of Samara University. Natural Science Series. 2024. Т. 30, № 1. С. 64–81. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-64-81>.

**Информация о конфликте интересов:** авторы и рецензенты заявляют об отсутствии конфликта интересов.

© Долгополов М.В., Елисов М.В., Раджапов С.А., Рахманкулов И.Р., Чипура А.С., 2024

*Михаил Вячеславович Долгополов* — доцент, кандидат физико-математических наук, кафедра высшей математики, Самарский государственный технический университет, Российская Федерация, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244.

*Максим Вячеславович Елисов* — студент, кафедра общей и теоретической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

*Сали Аширович Раджапов* — доктор физико-математических наук, Физико-технический институт НПО "ФИЗИКА-СОЛНЦЕ" АН РУз, 100084, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Чингиз Айтматов, 2Б.

*Ирек Рафаильевич Рахманкулов* — сотрудник, совместная лаборатория математической физики, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34.

*Чипура Александр Сергеевич* — преподаватель кафедры высшей математики, Самарский государственный технический университет, 443100, Российская Федерация, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244.

## Введение

Композитные фотобетаэлектрические гетеропереходные элементы, изготовленные из различных полупроводников  $n$ - и  $p$ -типа легирования и проводимости с технологически совместимыми механическими свойствами напряжения и периодами атомной решетки, сегодня представляют повышенный интерес с точки зрения фото- и бетавольтаики [1–4]. Когда полупроводниковая ячейка энергопреобразователя или датчика-сканера освещена, или облучена, в каждой точке генерации создается одинаковая плотность неравновесных носителей  $n$  и  $p$ , но это приводит к значительно большему увеличению относительной концентрации для второстепенных носителей, чем для основных носителей. Чтобы создать эффективный фотобетаэлектрический гетеропереход, необходимо исследовать электронные свойства используемых полупроводников с легирующими примесями и их оптимальное взаимное распределение в области гетероперехода [5; 6]. Приводится обзор известных программ анализа и оптимизации гетероструктур для неравновесных процессов с инъекцией внешнего и внутреннего облучения для прикладного использования в датчиках и преобразователях. В статье представлено использование квазиуровней Ферми для описания эффекта генерации напряжения в разомкнутой цепи во время работы фотобетагеттера — источника инъекции. Носители заряда в зоне проводимости и в валентной зоне могут создавать фотобетаэлектрическое напряжение подобно двум независимым элементам. Для некоторых диапазонов излучения большой энергии, когда генерируются неравновесные носители-электроны, элемент с проводящими контактами создает значение напряжения разомкнутой цепи. Для других диапазонов излучения возможно, что при образовании неосновных носителей дырок ячейка валентной зоны создает значение напряжения разомкнутой цепи. В случае общей генерации неосновных электронов и дырок в обоих элементах они вносят вклад в напряжение разомкнутой цепи, что позволяет исследовать взаимовлияние факторов друг на друга и явления самоорганизации.

## 1. Обзор разработок высокоэффективных интегрированных гетеропереходных бетавольтаических ячеек, активируемых внутренним инжектором

Обычные или традиционные бетавольтаические элементы и ячейки с внешним источником бета-излучения не дают возможности увеличить эффективность преобразования энергии бета-распада ввиду значительных потерь на излучение, самопоглощение, эффективное последовательное сопротивление, потери в контактных структурах [2–4; 6; 7]. Потенциальной возможностью повышения производительности интегрированных бетавольтаических батарей, элементов питания и их ячеек для встраивания микросистем источников энергии в микроустройства является способ использования активированных радионуклидами полупроводников, представляющих собой сочетание в интегральном исполнении или просто в одном материале [8–12] как источника инъекции, так и преобразователя энергии. Эффекты проявляются энергетически в виде явления «внутреннего солнца» [13] и эффекта спонтанных микроплазменных сфер или неполных сфер, пучков или цилиндров на масштабе длины диффузии как источника электронов и электрон-дырочных пар при ионизационных потерях. В то же время структура взаимосвязей компонентов на молекулярном уровне [8; 13] играет решающую роль. Здесь мы предполагаем механизм диффузии на

основе встречного движения атомов углерода и кремния [14; 15] с использованием механизма вакансии и взаимного проникновения кремниевой и углеродной решеток друг в друга.

Исследования облучения полупроводниковых материалов всегда были неотъемлемой частью процедур приемки устройств, изготовленных из полупроводниковых материалов, и проводились довольно длительное время начиная примерно с 1970–80-х годов. Однако сравнительно недавно, примерно с 2010 года, активно проводятся исследования взаимодействия излучения с веществом в области материаловедения изотопов в связи с изучением внутренних эффектов инжекторов бета-излучения низкоэнергетического спектра [16; 17] с энергией ниже порога разрушения кристаллической решетки. Уделяется внимание повышению эффективности преобразования энергии при одновременном снижении уровня легирования, особенно обедненной зоны, до определенного уровня насыщения [17]. Кроме того, при низких энергиях электронов возможно необходим учет эффектов фононов и экситонов с резонансным накоплением энергии в микрогенераторах на наногетеропереходах, а также учет (импульсного) [18] эффекта туннелирования с возможностью накопления эффекта экситон + фонон — в поляритонах. Одной из важных характеристик импульсного эффекта туннелирования является возможность выбора фронта подъема импульса таким образом, чтобы он точно соответствовал энергетическому барьеру [18] на гетеропереходе с соответствующим градиентом квазиуровней Ферми [19; 20].

Хорошо известно, что инжекция имеет важное практическое значение, при ней нарушается равновесие потоков носителей заряда через ОПЗ. Инжекция происходит, если дополнительное взаимодействие направлено против поля, существующего из-за разницы в термодинамической работе выхода полупроводников, контактирующих в интерфейсе. Известно, что проникновение избыточных носителей заряда происходит по-разному для основных и неосновных носителей заряда. При инжекции неосновных носителей их заряд нейтрализуется основными носителями; поэтому в полупроводниках с высокой электропроводностью неосновные носители перемещаются из-за амбиполярной диффузии и амбиполярного дрейфа на достаточно большую глубину, ограниченную рекомбинацией и захватом носителей в центрах примесей. Инжекция неосновных носителей осуществляется блокирующими или запирающими контактами — *p-n* переходами и барьерными гетеропереходами.

В 2015 году Чепурнов, Гурская, Долгополов и др. [21] предложили устройства для генерации электрического тока путем преобразования энергии бета-распада C-14 на основе технологии эндотаксии (HT CVD) роста тонких пленок карбида кремния в кремний. Были созданы и запатентованы ООО «Бета-Вольтаика» устройства с добавлением углерода-14 на уровне *ppm* к углероду-12 в пористые или непористые структуры [22]. Устройства основывались на пористой структуре SiC/Si [9,22]. Чепурнов, Раджапов, Долгополов и др. исследовали образцы гетероструктуры с тонкими пленками SiC из непористого SiC/Si с изотипными и анизотипными гетеропереходами и измерили бета-спектры с полупроводниковыми датчиками в диапазоне энергии от 10 эВ до 200 кэВ [23; 24]. Диффузия атомов углерода по поверхности выше, чем подвижность атомов кремния, и рост пленки SiC происходит из небольшого числа активных центров [25]. Устройство включает полупроводниковую структуру планарного или вертикального типа с *p-n* переходом, радиоизотопный материал с бета-распадом, более длительным периодом активности и достаточным периодом полураспада, электрические выводы для подключения структурных элементов к электрической цепи с возможностью управления характеристиками по току и напряжению; устройство также имеет корпус для обеспечения экологической безопасности [22]. Удельная эффективность значительно увеличилась из-за меньшей скорости самопоглощения углерода-14 и объединения источника активности и активной зоны ОПЗ с использованием гетероструктуры карбида кремния на кремниевой подложке в качестве прямого преобразователя энергии [6; 22].

Важно подчеркнуть следующее. Во время процесса эндотаксии сетка дислокаций концентрируется в фазе Si. В свою очередь, SiC растет за счет превращения фазы Si, поэтому сетка дислокаций перемещается перед фронтом роста фазы SiC, тем самым улавливая неконтролируемые примеси, легирующие добавки подложки и радионуклид [21; 23]. В то же время сверхкритические ядра фазы SiC на подложке Si еще не формируют механических напряжений из-за несовпадения параметров решетки. Технически возможно создать таким образом масштабируемые активированные наномасштабные гетеропереходы [20; 26] (АНГП, ANHJ — Activated Nanoscale Heterojunctions).

В 2018 году в университете Бристоля было предложено понятие радиоактивных алмазов. Возможность выращивания алмазов с углеродом-14 с использованием метода химического осаждения из газовой фазы (CVD) была описана в 2022 году в процессе замкнутого цикла переработки для бетавольтаики [27].

В 2019 году Хванг и др. предложили с целью сделать структуру батареи более компактной использовать углерод-14 как источник бета-излучения и электрод одновременно [28].

В 2020 году [29] Ванг и др. теоретически предложили бетавольтаическую батарею с гетеропереходом <sup>63</sup>NiO/Si, которая решает недостаток эффекта самопоглощения радиоактивного источника [10].

В 2022 году были описаны теоретические и экспериментальные исследования по производительности бетавольтаической ядерной батареи на основе GaN-PIN. Работа включала в себя исследование внутрен-

непроизводимого радиоизотопа  $^{63}\text{Ni}$  для прямого преобразования (бетавольтаика) в батарее. Авторами были Хи и др. [30].

Исследование [20] в 2023 году предлагает новую парадигму для повышения эффективности чипов преобразователей энергии путем интеграции методологий геометрического и количественного масштабирования с активацией наномасштабных гетеропереходов (ANHJ) [26; 31]. Геометрическое масштабирование, характеризующееся уменьшением размеров отдельных гетеропереходов, используется для увеличения плотности гетеропереходов в ограниченной пространственной области. Параллельно применяются стратегии активации, включающие генерацию дополнительных электрон-дырочных пар внутри самого гетероперехода, особенно путем имплантации радиоактивной примеси. Это отклонение от традиционных (или конвенциональных conventional [10]) конструкций, где радиоактивный источник находится вне преобразователя, этим предполагается смягчить потери энергии [6; 20]. Активация относится к генерации дополнительных электрон-дырочных пар внутри гетероперехода, выходящей за пределы традиционной практики, ограниченной поверхностным размещением радиоизотопа. Этот подход позволяет увеличить эффективность преобразования бетавольтаического эффекта за счет максимального использования энергии радиоактивного источника.

В 2023 году Ли и др. предложили интегрированную бетавольтаическую батарею с алмазом  $^{14}\text{C}$ , который используется как источник бета-излучения и материал для преобразования энергии в бетавольтаической батарее [11]. Стабильность и зонная структура бета-распадающегося алмаза исследуются с использованием теории функционала плотности (DFT). Самая стабильная конфигурация  $\text{C}_{62}\text{N}_2$  имеет непрямую запрещенную зону 2.5603 эВ, которая меньше, чем у чистого алмаза. С течением времени бетавольтаическая батарея с алмазом  $^{14}\text{C}$  алмаз- $^{12}\text{C}$  переключается между  $p$ - $n$  переходом и  $p$ -типа диодом Шоттки, и максимальный короткозамкнутый ток выше, чем у традиционного алмаза. Использование радиоактивных полупроводников, в частности предложение о включении алмаза  $^{14}\text{C}$ , предлагается в качестве двухцелевого полупроводникового материала, преобразователя энергии и бета-источника. Проводятся строгие расчеты из первых принципов с использованием DFT для изучения стабильности и электронных свойств в результате изменения решетки при распаде  $^{14}\text{C}$  [11].

Предлагаемая методология включает прямую интеграцию радиоактивного изотопа в один из полупроводников, составляющих гетеропереход [26], например, в тонкую пленку широкозонного полупроводника [32]. Такое включение облегчает поглощение энергии внутри объема полупроводника, способствуя тем самым генерации электрон-дырочных пар и увеличению суммарной плотности тока. Примером такой стратегии и служит использование алмаза  $^{14}\text{C}$  в качестве полупроводника, способного выступать как материал бета-источника, так и один из компонентов гетероперехода [11].

При распаде  $^{14}\text{C}$  предполагается, что атомы азота заменяют атомы углерода в кристаллической решетке. Стабильность и электронные свойства в результате этого процесса замещения/активации тщательно исследуются с использованием расчетов из первых принципов.

Основная цель — внутренняя активация гетероперехода, при которой радиоактивный изотоп выполняет композиционную роль в его материалах. Этот подход внутренней активации позволяет смягчить потери энергии по сравнению с традиционными конфигурациями, зависящими от внешних радиоактивных источников.

## 2. Программы для моделирования сбора заряда бетавольтаического эффекта в полупроводниковых гетероструктурах

Введение в область моделирования полупроводниковых гетероструктур часто включает в себя необходимость анализа и выбора подходящего программного обеспечения. Представим краткую выборку обзора различных программных инструментов, доступных для моделирования таких структур, и проведем выборочный сравнительный анализ их возможностей и характеристик в рамках определяемых решаемыми задачами требований.

Задачи моделирования полупроводниковых гетероструктур включают рассмотрение конкретных вычислений следующих основных характеристик неравновесного состояния: плотности тока короткого замыкания (короткой цепи) и его составляющих в эмиттере, базе, коллекторе, плотности обратного тока насыщения (плотности тока утечки), напряжения холостого хода (открытой цепи), фактора заполнения, КПД преобразования или эффективности, диффузионных длин носителей заряда, встроенных потенциалов, квазиуровней Ферми.

Специфика задач определяется малой удельной мощностью инжектора и, соответственно, малой удельной мощностью выходной, порядка от микроватт до ватта, что характерно для задач бетавольтаи-

ки и источников питания для микроэлектроники, датчиков. Математически это означает рассмотрение предела слабой инжекции [19], когда концентрация генерируемых за счет инжектора неравновесных носителей много меньше концентрации легирования материала (например, электронов в случае материала  $n$ -типа проводимости), но много больше, чем соответствующих собственных неосновных носителей (в данном примере дырок для материала полупроводника  $n$ -типа).

Отметим в целом много- и разномасштабность по расстояниям и эффектам обоснования. На масштабе ячеек из нескольких атомов предсказаны новые фазы в билинейных системах интерметаллидов на основе метода выпуклых оболочек (convex hull), адаптированного для сравнения структур с различной стехиометрией путем пересчета энергии образования структур в энергию связывания, приходящуюся на атом. Данный подход распространяется на структуры с наличием точечных дефектов [33]. Проведены квантово-механические расчеты для структуры 3C-SiC в различных реализациях теории функционала плотности (программы VASP, Siesta), исследованы влияния концентраций атомов-допантов на положение уровня Ферми, а также положение глубокого уровня в зонной структуре карбида кремния в присутствии атома азота [34]. Если мы рассматриваем формирование активированных наногетеропереходов и масштабируем их свойства на большее количество и концентрацию на поверхности подложки, то адаптируем моделирование вольт-амперных и ватт-вольтовых характеристик [7] до экстракции и идентификации с экспериментальными данными.

Вводимыми управляющими параметрами являются размеры тонких пленок (эмиттера, размеры активной зоны (областей пространственного заряда в гетеропереходе), размеры подложки (базы) в случае вертикальной структуры, размеры областей геометрических тонких пленок и дорожек топологии нанесения на поверхностные структуры в случае планарных структур). Размеры тонких пленок рассматривают от нанометров до десятков микрометров, что в совокупности с зависимостями диффузионных длин неосновных носителей заряда от концентраций легирования донорной и акцепторной примеси определяют граничные условия для решения уравнений Пуассона и транспортных уравнений Больцмана.

Важным элементом является часть с моделированием прохождения излучения инжектора определенного спектра радионуклида [2–4; 6], который может находиться как снаружи, так и внутри последовательности гетеропереходов и в приконтактной области [13]. Точный расчет зависит от обработки всего спектра и параметров полупроводникового материала, например, в программах на основе методов Монте-Карло.

Одним из программных инструментов является PC1D [35]. Эта программа предоставляет множество опций, позволяя исследователям настраивать параметры структуры солнечной ячейки на основе кремния. Например, с ее помощью можно оптимизировать кремниевые подложки  $p$ -типа, легированные атомами бора, и настраивать параметры технологий, такие как концентрация легирующих атомов и их глубина проникновения в материал. Программа также позволяет моделировать переднюю диффузию фосфора как примеси  $n$ -типа с различными значениями поверхностной концентрации и глубины проникновения, а также создавать области  $p$ -типа с обратной стороны структуры, легированные алюминием, с параметрами, аналогичными фосфорной диффузии, а также с настраиваемыми поверхностными характеристиками [36]. Эта гибкость в настройке параметров позволяет исследователям создавать энергетические диаграммы солнечных ячеек, точно соответствующие специфическим условиям и требованиям их исследования.

Однако стоит отметить, что у PC1D есть некоторые ограничения. Например, программа решает уравнение диффузии в одномерном приближении, что может не учитывать размерные эффекты в более сложных трехмерных структурах. Она также не учитывает некоторые важные явления, такие как туннелирование, пьезоэлектричество, деформации материала и неоднородности внутри структуры. Ограничены возможности моделирования различных типов границ раздела материалов и дефектов. Программа не предоставляет расчет оптических и электрических свойств, которые могут быть важными для моделирования датчиков и преобразователей. Кроме того, она не обеспечивает прямую интеграцию результатов с другими программами для получения более сложных характеристик.

С использованием программного пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [37] возможно провести моделирование структуры материала с применением метода молекулярной динамики [38] и исследовать воздействие колебаний температуры на определенный слой. Это позволяет более детально рассмотреть, как материал реагирует на изменения температуры. Кроме того, LAMMPS обладает гибкостью и позволяет учитывать квантовые свойства носителей заряда в полупроводниках, что может быть важно для точного моделирования электронных и оптических свойств.

Важным аспектом работы является возможность подбора межатомных потенциалов, которые учитывают химический состав и свойства полупроводников. Это позволяет получить более точные результаты при описании сложных полупроводниковых соединений. Кроме того, данный пакет позволяет моделировать кристаллические решетки и границы раздела фаз с высокой атомной детализацией, что может быть полезно для изучения дефектов, напряжений и деформаций.

Интеграция результатов с другими программами позволяет более полно исследовать транспортные и оптические свойства материалов. Также LAMMPS способен моделировать локальные нагревы и преобразование энергии при взаимодействии носителей с дефектами, что может быть важно для понимания работы солнечных и бетавольтаических элементов.

Однако следует учитывать, что LAMMPS ориентирован на классическое молекулярное моделирование, представляя атомы как классические частицы. Это может не полностью учитывать квантовые эффекты, которые могут играть роль в полупроводниковых структурах. Также при использовании необходимо подбирать подходящие межатомные потенциалы для конкретных материалов и задач, что может потребовать дополнительного анализа и настройки. Несмотря на эти ограничения, LAMMPS остается мощным инструментом для исследования полупроводниковых структур и их потенциала в области солнечной энергии.

Использование TCAD-моделирования (Technology Computer-Aided Design) [39] представляет собой эффективный метод для анализа и проектирования полупроводниковых гетероструктур, применяемых в устройствах преобразования энергии и датчиках. TCAD предоставляет возможность моделирования физических процессов в полупроводниковых структурах с учетом их взаимодействий, что является важным для оптимизации характеристик устройств. Этот подход позволяет предварительно оценивать работоспособность различных конструктивных и технологических решений на этапе проектирования, что сокращает необходимость в дорогостоящих натуральных экспериментах.

Кроме того, TCAD позволяет учитывать влияние температуры, радиации и других факторов внешней среды на параметры структур и моделировать трехмерные эффекты в гетероструктурах. С точки зрения физических аспектов TCAD-моделирования полупроводниковых гетероструктур, этот подход имеет преимущества, такие как возможность учета множества физических эффектов, включая генерацию и рекомбинацию носителей, туннелирование, дрейф-диффузию, пьезоэффект и термоэффекты.

Однако существуют и недостатки TCAD-моделирования, такие как сложность адекватного физического описания некоторых процессов, особенно в наноструктурах, что может потребовать дополнительной калибровки параметров на основе экспериментов. Также для трехмерных моделей требуется выполнение большого объема вычислений, что может потребовать значительных вычислительных ресурсов. Ограниченная точность физических моделей может потребовать дополнительной настройки и калибровки в соответствии с реальными данными. Сложность учета наноструктурных эффектов, таких как квантовые ямы и узкие полосы, также является одним из вызовов в TCAD-моделировании.

Технология компьютерного проектирования с поддержкой TCAD имеет важное значение в разработке полупроводниковых устройств. TCAD представляет собой компромисс между строгим обращением с физикой и вычислительной эффективностью, необходимой для инженерных приложений.

Известны работы по созданию бетавольтаических элементов и их электрофизических характеристик по TCAD-моделированию [40].

Полное квантовое моделирование, такое как метод неравновесных функций Грина (NEGF) [41], редко требуется [19], потому что, например, большинство биполярных транзисторов являются полуклассическими устройствами, хотя использование методов NEGF имеет перспективы для обоснования проявлений ряда квантовых эффектов. Также отметим, что учет несовершенств структур и различия параметров решетки сопрягаемых материалов гетеропереходов II типа, наиболее эффективных для разделения и транспорта носителей заряда, приводит к оценке эффектов туннелирования, которые могут иметь и определяющий характер в механизме тока [42].

Отметим что в TCAD, а также в Comsol MultiPhysics [43] имплементированы средства построения энергетических зонных полос (энергетических диаграмм) гетеропереходов.

Дополним, что в пограничном слое часто возникают линейные дефекты типа дислокации несоответствия и напряжение, обусловленные различием решеток кремния и карбида кремния, например в [44]. Возможность улучшения связана с резким гетеропереходом, например [42], с моделированием структуры энергетической полосы зонной диаграммы с использованием программы ADEPT [45].

Как пример использования аналитической системы Wolfram Mathematica и пакета прикладных программ Matlab приведем работу по теоретическому исследованию [46] бетавольтаической батареи на гетеропереходе GaN-Si с эффективностью преобразования 23 %.

Таким образом, так называемые ядерные микробатареи на основе полупроводниковых гетеропереходных ячеек являются перспективными разработками для достижения эффективного преобразования энергии частиц, испускаемых радиоактивным источником, в электрическую. Выбор полупроводников с соответствующей структурой устройства и источником излучения эффективно улучшает их выходные характеристики.

Для сравнения в исследовании 2024 года [5] Бузид со соавторами исследовали бетавольтаическую гетеропереходную ячейку  $In_{0,49}Ga_{0,51}P/GaAs$ , работающую на облучении прометием-147 ( $Pm-147$ ), который испускает отрицательные бета-частицы со средней кинетической энергией 61,93 кэВ, используя

лабораторное программное обеспечение. Моделирование плотности тока-напряжения ячейки  $J(V)$  и выходной электрической мощности  $P(V)$  было выполнено с использованием комплексной аналитической модели. Предложенная модель учитывала омические потери, отражение падающих бета-частиц от передней поверхности, пределы области пространственного заряда и металлургические пограничные эффекты. Для оптимизации работы ячейки авторы этой работы провели несколько симуляций, варьируя концентрацию легирования и толщину основания в конструкции устройства, а также скорости поверхностной рекомбинации в передней и тыльной областях. Кроме того, предположили разные значения плотности активности Рm-147. Полученные результаты показали, что Рm-147 в сочетании с гетеропереходом  $InGaP/GaAs$  является очень подходящим решением для получения электрической энергии. Для сравнения были рассмотрены в моделировании альтернативные источники бета-излучения: H-3, Ni-63, Co-60, Cs-137 и Sr-90. Расчетная плотность электрической мощности улучшенной ячейки достигает  $436,66 \text{ нВт}\cdot\text{см}^{-2}$ , а эффективность преобразования —  $11,91 \%$  при облучении Рm-147. Эти значения могут увеличиться до  $1441,29 \text{ нВт}\cdot\text{см}^{-2}$  и  $12,43 \%$  при использовании Sr-90 в качестве источника излучения.

Отметим для сравнения теоретическое исследование и моделирование в работе [47] Мохаммади 2023–2024 годов бетавольтаической батареи с радионуклидом  $^{14}\text{C}$  и полупроводниками GaAs, GaN, SiC и алмазом в структуре  $p$ - $n$ -перехода, в котором толщина насыщенного источника бета-излучения  $^{14}\text{C}$  и распределение энергии по положению бета-частиц излучения, излучаемых этим источником, моделируются и рассчитываются с использованием кода Монте-Карло MCNPX. Оптимизированная толщина  $^{14}\text{C}$  была достигнута на глубине 30 мкм. Зависимости между концентрацией легирующей добавки, плотностью тока короткого замыкания были оценены напряжением разомкнутой цепи (холостого хода) и плотностью выходной мощности. При использовании алмаза в качестве полупроводника удельная выходная мощность разработанной батареи была увеличена до  $9,68 \text{ мкВт}\cdot\text{см}^{-2}$  по сравнению с другими рассмотренными полупроводниками.

Таким образом, при выборе программного обеспечения для моделирования полупроводниковых гетероструктур исследователям следует учитывать как преимущества, так и ограничения каждого инструмента, чтобы подходящим образом адаптировать его к своим потребностям. При этом отметим, что удобной программы построения последовательности гетеропереходов с контактной металлизацией с контролем квазиуровней Ферми, определением электрофизических характеристик и эффективности преобразования, разделения носителей и транспорта заряда на данный момент нет. Поэтому авторами представляется собственная программа, учитывающая комплекс требований обозначенных выше, на основе языка программирования Delphi и аналитической системы Wolfram Mathematica.

### 3. Модель и программа моделирования гетероструктур

Таким образом покажем, как определяются программным образом задачи построения выборок наиболее подходящих топологий последовательностей гетеропереходов, которые создают наибольшую плотность потока зарядов и безбарьерный переход на металлизацию, с одной стороны, омический — с другой, и накопление заряда в виде 2D Ферми-газа электронов или дырок. Для интерфейса между вычисляемыми параметрами и структурой последовательности гетеропереходов программа, согласно выводному рисунку, комбинирует в материалы инжекторов, металлов, полупроводников в требуемой последовательности в текущем интерактивном режиме практически моментально, которые характеризуются определенными свойствами: диэлектрическая проницаемость, собственная концентрация носителей, концентрации легирования и тип легирования, данные ширины запрещенных зон, электронного сродства, работ выхода полупроводников и металлов, активности инжекторов.

Покажем выбор переменных и управляющих параметров, а также роли квазиуровней Ферми ( $F_n, F_p$ ), градиент которых определяется как источник направленности транспорта неравновесных носителей заряда [48]. Запишем хорошо известное уравнение непрерывности для дырок:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot \frac{\vec{J}_p}{q} + G_p - R_p. \quad (3.1)$$

Здесь  $G_p$  — темп генерации дырок,  $R_p$  — темп рекомбинации, плотность тока  $\vec{J}_p$  связана с напряженностью электрического поля, поэтому в данном случае необходимо составить уравнение для электрического поля, которое действует на заряд  $q$ , распределений с определенной объемной плотностью  $p$ . Таким образом, можно сказать, что диэлектрическая проницаемость и электрическое поле определяют суммарную объемную плотность (концентрацию) заряда в данной точке:

$$\nabla(k_s \epsilon_0 \vec{E}) = \rho(\vec{r}). \quad (3.2)$$

Суммарная плотность заряда определяется тем, что в полупроводнике могут находиться носители заряда как дырки (с плотностью или концентрацией заряда  $p$ ), так и электроны ( $n$ ), ионизированные доноры  $N_D^+$ , которые заряжены положительно, а акцепторы ( $N_A^-$ ) заряжены отрицательно, таким образом, получаем следующее уравнение:

$$\rho(\vec{r}) = q[p(\vec{r}) - n(\vec{r}) + N_D^+(\vec{r}) - N_A^-(\vec{r})]. \quad (3.3)$$

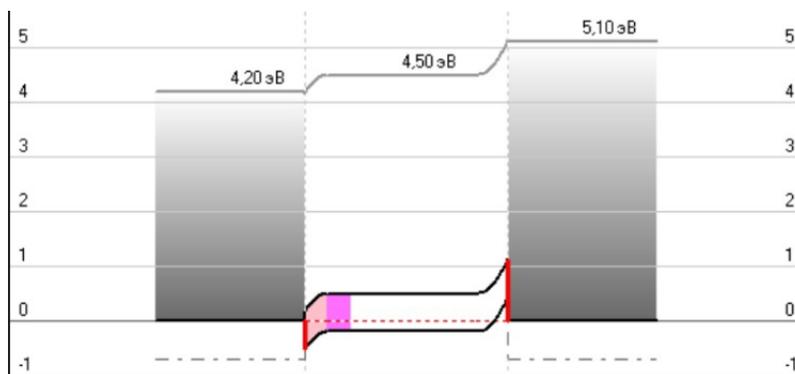


Рис. 3.1. Пример металлизированной гетероструктуры с инжекцией  
 Fig. 3.1. An example of a metallized heterostructure with injection

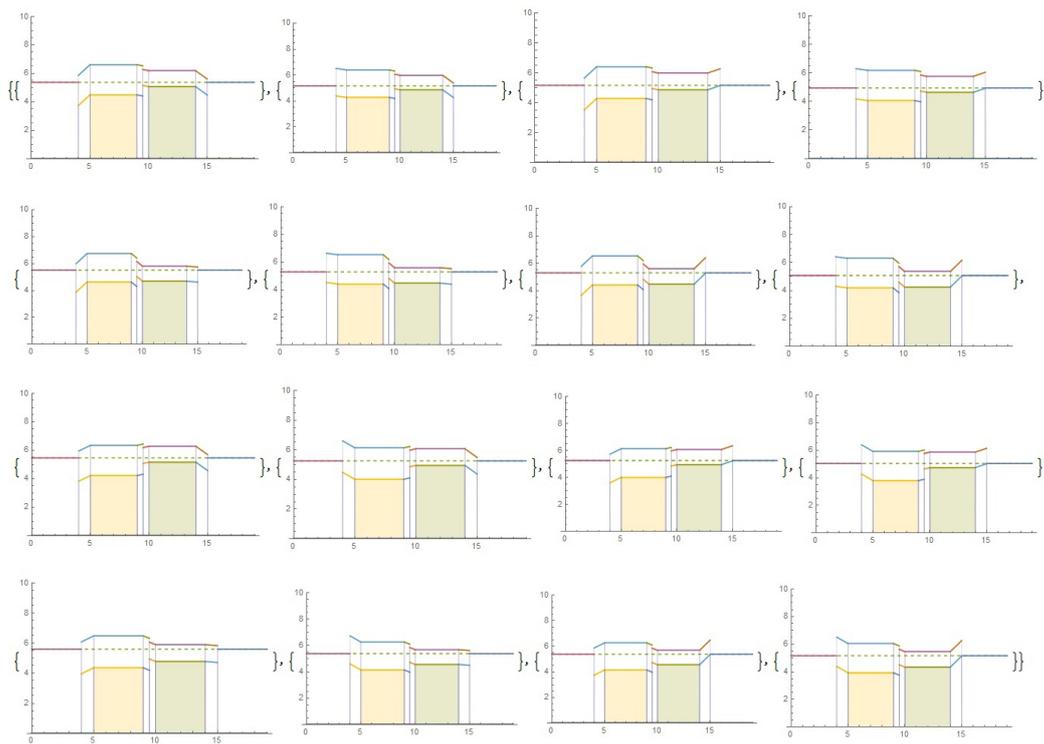


Рис. 3.2. Набор вариантов гетероперехода карбида кремния на кремнии с различными металлами  
 Fig. 3.2. Set of silicon carbide on silicon heterojunction options with various metals

Уравнения для концентраций зарядов и электрического поля выглядят следующим образом:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot \left( \frac{\vec{J}_p}{q} \right) + G_p - R_p, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \left( \frac{\vec{J}_n}{-q} \right) + G_n - R_n, \quad (3.5)$$

где

$$\vec{J}_p = pq\mu_p \vec{E} - qD_p \vec{\nabla} p = p\mu_p \vec{\nabla} F_p, \quad \vec{J}_n = nq\mu_n \vec{E} - qD_n \vec{\nabla} n = n\mu_n \vec{\nabla} F_n, \quad (3.6)$$

$$\rho = q(p - n + N_D^+ - N_A^-), \quad \vec{E}(\vec{r}) = \nabla V(\vec{r}), \quad (3.7)$$

$\mu_n, \mu_p, D_n, D_p$  — коэффициенты мобильности и диффузии электронов и дырок.

Следовательно, получаем уравнения для полупроводников, которые определяют общую суммарную плотность тока и плотности токов электронов и дырок. Также в программе учитывается плотность пространственного заряда в терминах плотности дырок и электронов, которые вычисляются, и концентрации легирования полупроводников примесями, которые предположительно известны и варьируются. В формулах (3.6) определяется связь напряженности электрического поля с отрицательным градиентом электростатического потенциала. Таким образом, мы можем рассматривать неизвестные переменные либо в терминах плотностей или концентраций носителей зарядов, либо в терминах квазиуровней Ферми.

Таблица

Представленные на рис. 3.2 стеки с учетом механического напряжения (под стеклом указана степень легирования в эВ как расстояние в эВ единицах от дна зоны проводимости и потолка валентной зоны), металл — карбид кремния — кремний — металл  
 Table

Shown in Fig. 3.2 stacks taking into account mechanical stress (under the stack the doping degree in eV is indicated as the distance in eV units from the bottom of the conduction band and ceiling of the valence band), metal — silicon carbide — silicon — metal

Al-P-p-Al	Au-P-p-Al	Al-P-p-Au	Au-P-p-Au
1.24/0.88-0.82/0.3	1.24/0.88-0.82/0.3	1.24/0.88-0.82/0.3	1.24/0.88-0.82/0.3
Al-P-n-Al	Au-P-n-Al	Al-P-n-Au	Au-P-n-Au
1.24/0.88-0.3/0.82	1.24/0.88-0.3/0.82	1.24/0.88-0.3/0.82	1.24/0.88-0.3/0.82
Al-N-p-Al	Au-N-p-Al	Al-N-p-Au	Au-N-p-Au
0.88/1.24-0.82/0.3	0.88/1.24-0.82/0.3	0.88/1.24-0.82/0.3	0.88/1.24-0.82/0.3
Al-N-n-Al	Au-N-n-Al	Al-N-n-Au	Au-N-n-Au
0.88/1.24-0.3/0.82	0.88/1.24-0.3/0.82	0.88/1.24-0.3/0.82	0.88/1.24-0.3/0.82

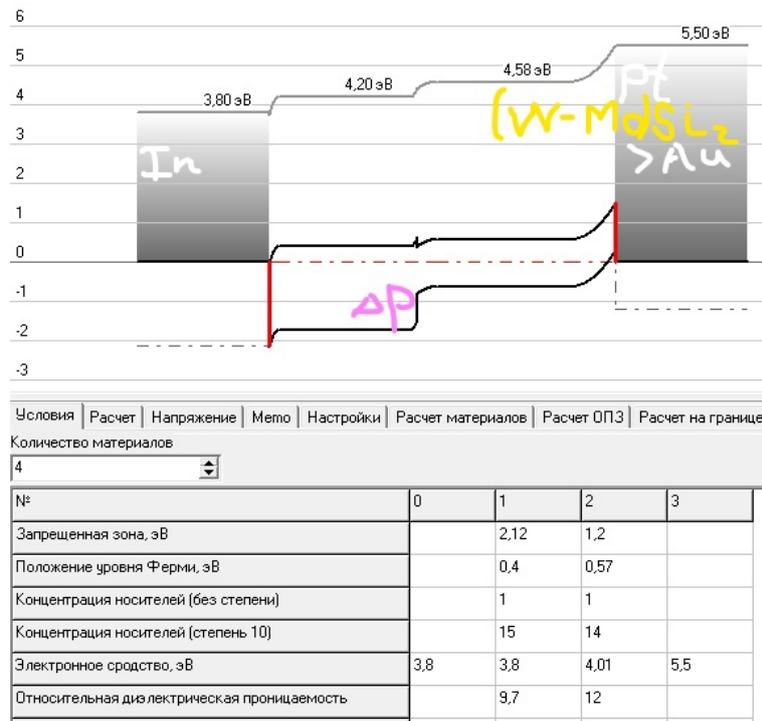


Рис. 3.3. Оптимальная структура  $N - i(N - 3C - SiC/i - Si)$  с учетом механического и сдвигового напряжений с отметками подходящих металлов для контакта

Fig. 3.3. Optimal  $N - i$  structure ( $N - 3C - SiC/i - Si$ ) taking into account mechanical and shear stresses with marks of suitable metals for contact

В целом программа позволяет смоделировать композитную гетероструктуру [49] с инжектором и с металлизацией (рис. 3.1), оптимизировать ее с целью повышения эффективности преобразования энергии фото- и бета-излучения.

На рис. 3.2 приведен пример 16 диаграмм, соответствующих двум типам легирования карбида кремния и кремния в гетероструктурах (изотипных и анизотипных) и двум контактными материалами с различной работой выхода, больше и меньше, чем у кремния и карбида кремния (таблица с учетом механического напряжения). Выборка удобно позволяет определить качественно последовательность гетероперехода и металлизации с большими разделением электрон-дырочных пар и потоком заряда.

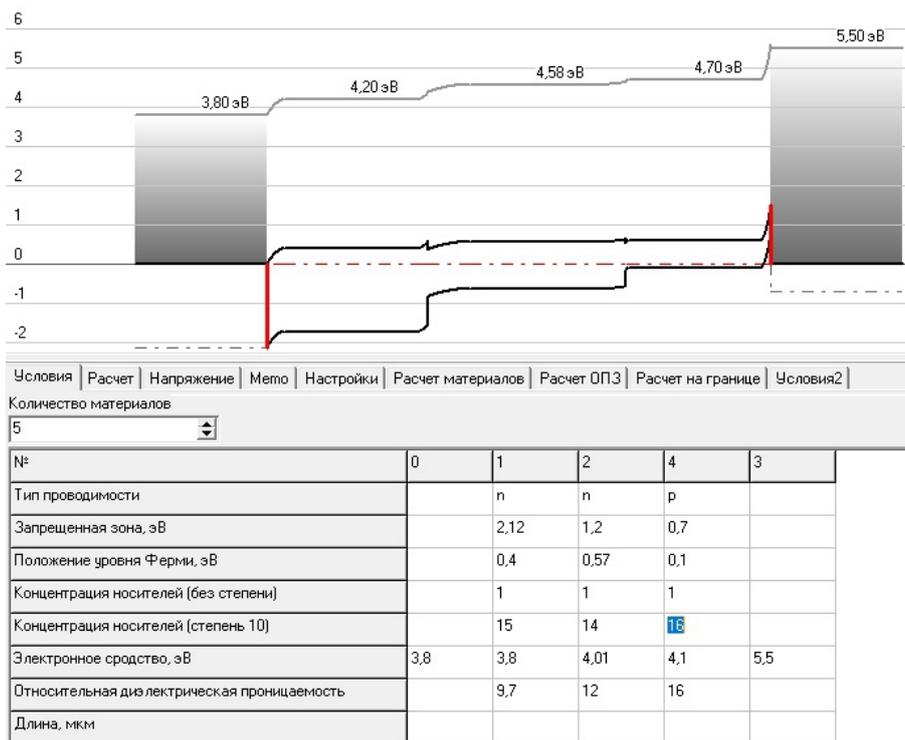


Рис. 3.4. Структура  $N-i$  с учетом механического и сдвигового напряжений, справа  $p-aGe$  увеличивает концентрацию и подвижность неосновных носителей в приконтактной зоне  
 Fig. 3.4.  $N-i$  structure taking into account mechanical and shear stresses, on the right  $p-aGe$  increases concentration and mobility of minority carriers in the contact zone

В качестве металлов для контактов были смоделированы ситуации, исходя из данных работ выхода: алюминий (4.2–4.28 эВ), индий (3.60–4.09), золото (4.8–5.17), платина 5.30–5.55, свинец (4.05), бериллий (3.92), неодим (3.3), литий (2.49), кальций, цинк, подлегирование  $n(p)$  альфа-германий, хром, силицид молибдена (5–6), дисилицид вольфрама (5–6) и другие. Отмечено, что наиболее эффективными являются структуры вертикальные и планарные с отличающимися от полупроводников работами выхода в большую и меньшую стороны.

На рис. 3.3–3.7 представлены выборки оптимальных структур гетеропереходов с выращенной пленкой карбида кремния на кремнии с металлизацией. Красной линией показан барьерный переход для соответствующего носителя зарядов, электронов либо дырок.

Для описания динамики квазиуровней Ферми введем один дополнительный динамический параметр — напряжение на нагрузке. От него будут зависеть формулы для квазиуровней, а также связанные с ними потенциалы. При этом значения динамического параметра возможно брать как из экспериментальных характеристик, так и теоретически расчетное. Также с ним будет связана точка максимальной мощности, к ней из программы с динамической версией структур возможно установить плотность тока или ток и определять, когда произведение тока на напряжение максимально. В статической картине обычно рисунок соответствует нулевому или какому-то постоянному значению напряжения на нагрузке. В программе заложена возможность математически определять квазиуровни Ферми при различном напряжении нагрузки, динамику и точку максимальной мощности.

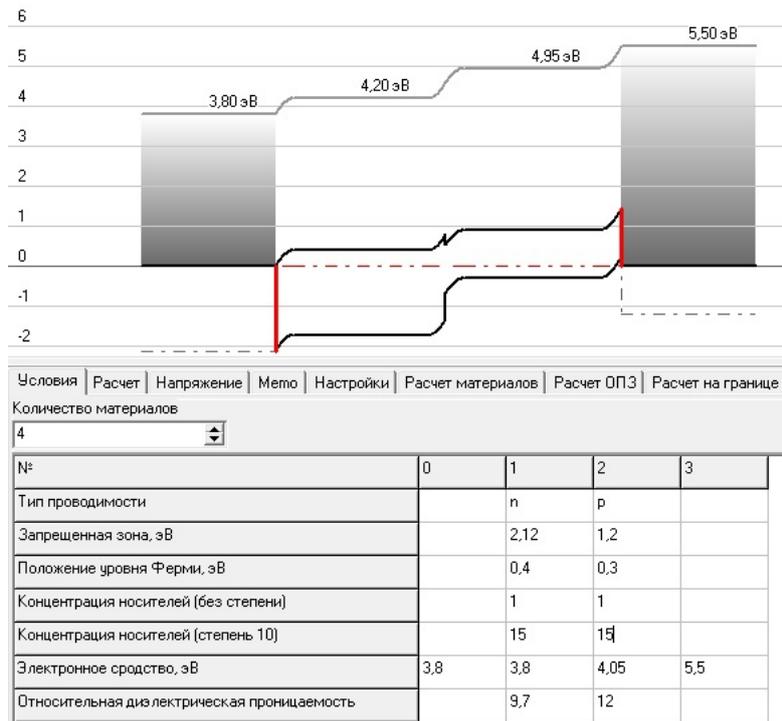


Рис. 3.5. Структура (максимально подходящая)  $N-p$  с учетом механического и сдвигового напряжений ( $Ge$  не улучшает), имеется "пик" (или "клюв") для увеличения концентрации электронного 2D Ферми-газа

Fig. 3.5. Structure (most suitable)  $N-p$  taking into account mechanical and shear stresses ( $Ge$  does not improve), there is a "spike" (or "beak") to increase the concentration of electron 2D Fermi gas

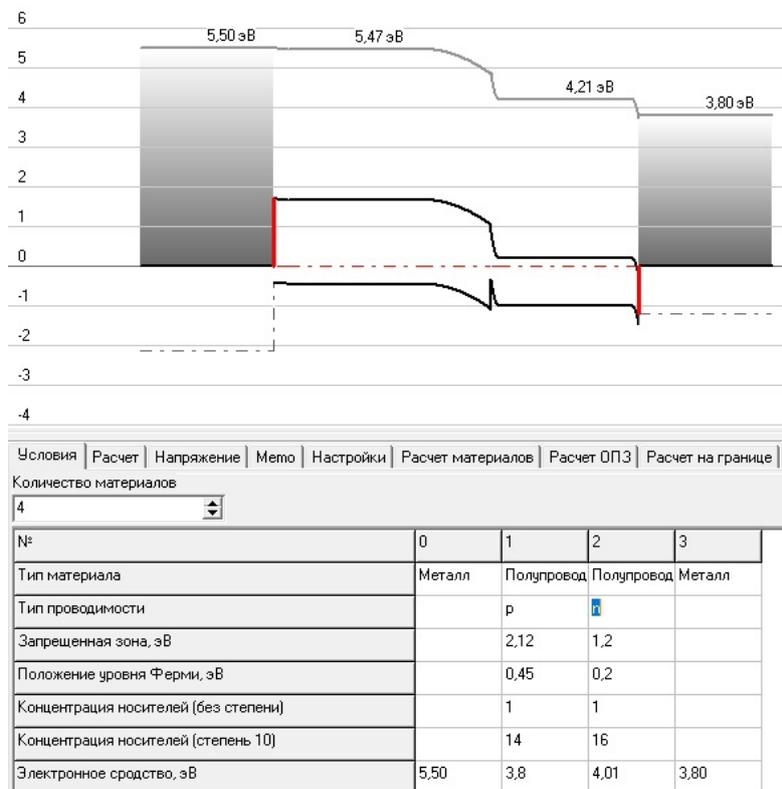


Рис. 3.6. Структура (максимально подходящая)  $P-n$  с учетом механического и сдвигового напряжений  
 Fig. 3.6. Structure (most suitable)  $P-n$  taking into account mechanical and shear stresses

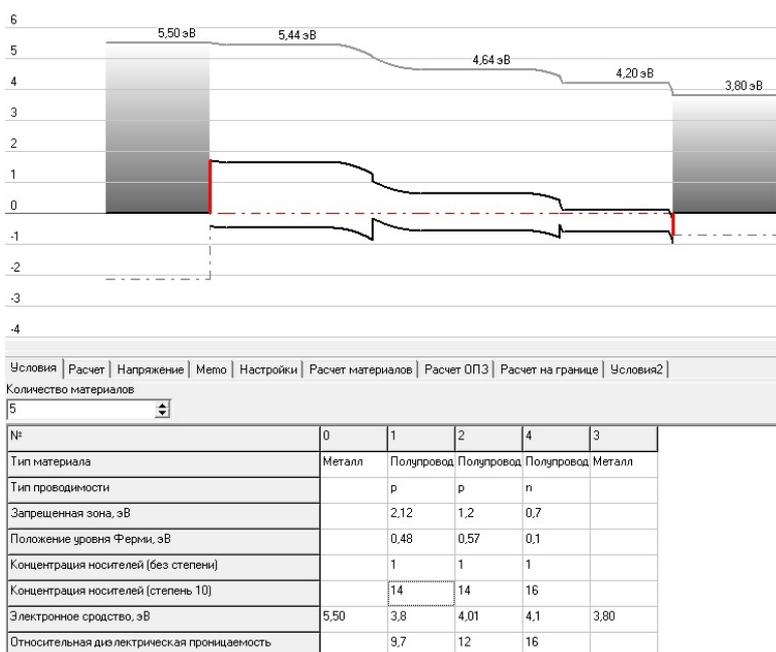


Рис. 3.7. Улучшение структуры  $P-p-n-aGe$  с учетом механического и сдвигового напряжений  
 Fig. 3.7. Improvement of the  $P-p-n-aGe$  structure, taking into account mechanical and shear stresses

## Заклучение

В данной статье рассматриваются различные методологии математического моделирования полупроводниковых гетероструктур, которые имеют широкое применение в расчетах и в практических разработках и прогнозировании энергетических преобразователей и датчиков. Исследование представляет развитую версию программы для оптимизации солнечных элементов, фотобетапреобразователей и датчиков на гетеропереходах, представляя комплексный подход к моделированию и анализу. Также осуществлен критический обзорный анализ возможностей и ограничений TCAD-моделирования для описания физических процессов в наноструктурах, учитывая сложное взаимодействие различных эффектов. Подчеркнуты перспективы улучшения TCAD через более точные физические модели и оптимизацию вычислений. Представлены примеры использования молекулярной динамики с использованием программы LAMMPS для изучения дефектов и диффузии в гетероструктурах, а также одномерной модели PC1D для моделирования тонкопленочных солнечных элементов и детекторов. Приведены примеры. Отмечена возможность интеграции результатов молекулярной динамики в TCAD-моделирование для более полного описания физических процессов.

Обосновано применение Wolfram Mathematica для аналитического решения уравнений, описывающих физику исследуемых структур, и для визуализации результатов. Например, этот инструмент используется для построения графиков с использованием функций ContourPlot, Dynamic Visualization и Manipulate для анализа КПД и плотности токов, особенно для динамических моделей неравновесных процессов для активной зоны гетероперехода с источником генерации внутри и с различными граничными условиями. В качестве примеров, иллюстрирующих программу в Delphi, используются статические модели на основе  $Me - 3C - SiC/Si - Me$  с различными вариациями легирования и последовательностями гетеропереходов и контактов с металлами.

Таким образом, комплексный подход, объединяющий TCAD, PC1D, LAMMPS, Delphi и Wolfram Mathematica и моделирование Монте-Карло, предоставляет возможность всестороннего исследования физических процессов в полупроводниковых гетероструктурах на различных временных и пространственных шкалах, что имеет важное значение для улучшения характеристик энергетических преобразователей и датчиков.

## Литература

- [1] Алфёров Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // Физика и техника полупроводников. 1998. Т. 32, № 1. С. 3–18. URL: <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/34218>.

- [2] Yakimov E.V. Prediction of Betavoltaic Battery Parameters // *Energies*. 2023. Vol. 16, Issue 9. Article number 3740. DOI: <https://doi.org/10.3390/en16093740>.
- [3] Naseem M.B., Kim H.S., Lee J., Kim C.H., In S.-I. Betavoltaic Nuclear Battery: A Review of Recent Progress and Challenges as an Alternative Energy Source // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2023. Vol. 127, Issue 16. Pp. 7565–7579. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c00684>.
- [4] Zhou Chunlin, Zhang Jinsong, Wang Xu, Yang Yushu, Xu Pan, Li Peixian, Zhang Lu, Chen Zhiyuan, Feng Huanran, Wu Weiwei. Review—Betavoltaic Cell: The Past, Present, and Future // *ECS Journal of Solid State Science and Technology*. 2021. Vol. 10, Number 2. Article number 027005. DOI: <https://doi.org/10.1149/2162-8777/abe423>.
- [5] Bouzid F., Kayahan E., Saeed M.A. et al. Modeling and simulation of an InGaP/GaAs heterojunction betavoltaic cell powered by promethium-147 // *Applied Physics A*. 2024. Vol. 130. Article number 222. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-024-07377-y>.
- [6] Чепурнов В.И., Раджапов С.А., Долгополов М.В., Пузырная Г.В., Гурская А.В. Задачи определения эффективности для микроструктур SiC\*/Si и контактообразования // *Computational nanotechnology*. 2021. Т. 8, № 3. С. 59–68. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2021-8-3-59-68>. EDN: <https://www.elibrary.ru/eybfqt>.
- [7] Долгополов М.В., Елисов М.В., Раджапов С.А., Чипура А.С. Модели масштабирования электрических свойств фото- и бета-преобразователей с наногетеропереходами // *Computational Nanotechnology*. 2023. Т. 10, № 1. С. 138–146. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-1-138-146>. EDN: <https://www.elibrary.ru/wkeac>.
- [8] Сурнин О.Л., Чепурнов В.И. Карбид кремния: материал для радиоизотопного источника энергии // Патент на изобретение RU 2 733 616 C2, 05.10.2020. Заявка № 2020110496 от 11.03.2020. URL: [https://yandex.ru/patents/doc/RU2733616C2\\_20201005](https://yandex.ru/patents/doc/RU2733616C2_20201005).
- [9] Dolgopolov M., Akimchenko A., Chepurnov V., Gurskaya A., Kuznetsov O., Mashnin A., Radenko V., Radenko A., Surnin O., Zanin G. Betavoltaic device in por-SiC/Si C-nuclear energy converter // *EPJ Web of Conferences*. 2017. Vol. 158. P. 06004. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201715806004>. EDN: <https://www.elibrary.ru/xnlzim>.
- [10] Wang Y., Zheng R., Lu J., Li X., Chen Z., Zhang X., Zhang Y., Liang L., Zeng Y., Qin L., Liu Y. Theoretical prediction of output performance of <sup>63</sup>NiO-Si heterojunction betavoltaic cell // *Applied Physics Letters*. 2022. Vol. 121, Issue 8. Article Number 083901. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0100186>.
- [11] Li X., Lu J., Chen Z., Liu X., Liu Y., Zhang Y., Zhang Y., Tian F. <sup>14</sup>C diamond as energy converting material in betavoltaic battery: A first principles study // *AIP Advances*. 2023. Vol. 13, Issue 11. Article Number 115314. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0177302>.
- [12] Мордкович В.З., Филимонов И.С. Тарелкин С.А., Приходько Д.Д., Лупарев Н.В., Голованов А.В., Урванов С.А., Бланк В.Д. Бетавольтаический источник тока и способ его изготовления // Патент на изобретение RU 2807315 C1, 14.11.2023. Заявка № 2023119639 от 26.07.2023. URL: <https://patents.google.com/patent/RU2807315C1/ru>.
- [13] Гурская А.В., Долгополов М.В., Раджапов М.В., Чепурнов В.И. Контакты для SiC-преобразователей в диапазоне нано-микроватт // *Вестник Московского университета. Сер. 3: Физика. Астрономия*. 2023. Т. 78, № 1. С. 2310103. DOI: <https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.78.2310103>. EDN: <https://www.elibrary.ru/fcrbrk>.
- [14] Hong J.D., Davis R.F. Self-diffusion of carbon-14 in high-purity and n-doped  $\alpha$ -SiC single crystals // *Journal of the American Ceramic Society*. 1980. Vol. 63, Issue 9-10. Pp. 546–552. DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1980.tb10762.x>.
- [15] Hon M.H., Davis R.F. Self-diffusion of <sup>14</sup>C in polycrystalline  $\beta$ -SiC // *Journal of Materials Science*. 1979. Vol. 14. Pp. 2411–2421. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF00737031>.
- [16] Chandrashekar M.V., Thomas C.I., Li H., Spencer M.G., Lal A. Demonstration of a 4H SiC betavoltaic cell // *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 88, Issue 3. Article Number 033506. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2166699>.
- [17] Qiao D.-Y., Chen X.-J., Ren Y., Yuan W.-Z. A Micro Nuclear Battery Based on SiC Schottky Barrier Diode // *Journal of Microelectromechanical Systems*. 2011. Vol. 20, Issue 3. Pp. 685–690. DOI: <https://doi.org/10.1109/JMEMS.2011.2127448>.
- [18] Рахимов Р.Х., Возможный механизм импульсного квантового туннельного эффекта фотокатализаторов на основе наноструктурированной функциональной керамики // *Computational Nanotechnology*. 2023. Т. 10, № 3. С. 26–34. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-3-26-34>. EDN: <https://elibrary.ru/QZQMCA>.
- [19] Lundstrom M. Carrier Transport in BJTs: from Ballistic to Diffusive and Off-Equilibrium // *IEEE BiCMOS and Compound Semiconductor Integrated Circuits and Technology Symposium (BCICTS)*. San Diego, CA, USA. 2018. Pp. 174–181. DOI: <https://doi.org/10.1109/BCICTS.2018.8551154>.
- [20] Dolgopolov M.V., Chepurnov V.I., Chipura A.S., Elisov M.V., Radzhapov S. Scaling and activation of nanoheterojunctions on silicon and silicon carbide substrates // *Proceedings of the International Conference “Fundamental and Applied Problems of Modern Physics”*. 2023. Section II. Pp. 88–92. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=54922680>. EDN: <https://www.elibrary.ru/mfrqsi>.

- [21] Гурская А.В., Долгополов М.В., Чепурнов В.И.  $^{14}\text{C}$  бета-преобразователь // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2017. Т. 48, № 6. С. 901–909. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=48163114>. EDN: <https://www.elibrary.ru/dmrnfd>.
- [22] Долгополов М.В., Сурнин О.Л., Чепурнов В.И. Устройство генерирования электрического тока посредством преобразования энергии радиохимического бета-распада C-14 // Патент на изобретение RU 2 714 690 C2, 19.02.2020. Заявка № 2019127719 от 02.09.2019. URL: [https://yandex.ru/patents/doc/RU2714690C2\\_20200219](https://yandex.ru/patents/doc/RU2714690C2_20200219).
- [23] Dolgoplov M., Chepurnov V., Gurskaya A., Akimchenko A., Puzyrnaya G., Radzhapov S. Micro alloying of SiC by radioisotope // EPJ Web of Conferences. 2019. Vol. 222. P. 02013. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201922202013>. EDN: <https://www.elibrary.ru/bxidmg>.
- [24] Dolgoplov M., Kuznetsov O., Chepurnov V., Gurskaya A., Radzhapov S. C-beta energy converter efficiency modeling // EPJ Web of Conferences. 2019. Vol. 222. P. 02012. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201922202012>. EDN: <https://www.elibrary.ru/txrdbh>.
- [25] Galashev A.Y., Abramova K.A. Computer simulation of obtaining thin films of silicon carbide // Physical Chemistry Chemical Physics. 2023. Vol. 25, Issue 5. Pp. 3834–3847. DOI: <https://doi.org/10.1039/D2CP04208H>.
- [26] Долгополов М.В., Елисов М.В., Раджапов С.А., Чепурнов В.И., Чипура А.С. КПД активированных наногетеропереходов на подложках кремния и карбида кремния // Computational Nanotechnology. 2023. Т. 10, № 4. С. 91–102. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-4-91-102>. EDN: <https://www.elibrary.ru/bbevkn>.
- [27] Verbelen Y., Boardman M., Andrade H.D., Mackenzie R., Wallace-Smith T., Kaluvan S., Hutson C., Osbourne S., Bickerton I., Fox N. et al. Closed-loop Recycling Process Flow for Diamond Betavoltaics // In: F. Kongoli, K. Aifantis, C. Capiglia, A. Fox, V. Kumar, A. Tressaud, Z. Bakenov, A. Qurashi. (Eds.), Sustainable Industrial Processing Summit SIPS2022 Volume 14 Yazami Intl. Symp Secondary Battery Manufacturing & Recycling and Electrochemistry (pp. 89-104). Montreal, Canada: FLOGEN Star Outreach. URL: <https://www.flogen.org/sips2022/paper-14-244.html>.
- [28] Hwang Y., Park Y.H., Kim H.S., Kim D.H., Ali S., Sorcar S., Flores M.C., Hoffmann M.R., In S.-I. C-14 powered dye-sensitized betavoltaic cells // Chemical Communications. 2020. Vol. 56, Issue 52. Pp. 7080–7083. DOI: <https://doi.org/10.1039/D0CC02046J>.
- [29] Li X., Lu J., Zheng R., Wang Y., Xu X., Liu Y., He R. Comparison of time-related electrical properties of PN junctions and Schottky diodes for ZnO-based betavoltaic batteries // Nuclear Science and Techniques. 2020. Vol. 31. Article number 18. DOI: <https://doi.org/10.1007/s41365-020-0723-y>.
- [30] Shanxue Xi, Linxiang Li, Chunzhi Zhou, Haijun Li, Guangwei Huang, Kun Wu, Zungang Wang, Yiyun Zhang. Researches on the performance of GaN-PIN betavoltaic nuclear battery // Radiation Effects and Defects in Solids. 2022. Vol. 177, Issue 3–4. Pp. 213–229. DOI: <https://doi.org/10.1080/10420150.2021.2024541>.
- [31] Гурская А.В., Долгополов М.В., Елисов М.В. и др. Комбинированное масштабирование наночипов-генераторов для бетавольтаики // Письма в журнал Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2023. Т. 20, № 5. С. 1230–1237.
- [32] Долгополов М.В., Чипура А.С. Моделирование бетавольтаического элемента на наногетеропереходах GaN и GaP на подложках Si и 3C-SiC/Si // Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия. 2023. Т. 29, № 4. С. 133–142. DOI: <https://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-4-133-142>. EDN: <https://www.elibrary.ru/cwlrwb>.
- [33] Chepurnov V.I., Dolgoplov M.V., Gurskaya A.V., Puzyrnaya G.V., Elkhimov D.E. Radiation-doped SiC\*/Si heterostructure formation and defects evolution // Journal of Physics: Conference Series. 2022. Vol. 2155. Article number 012012. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2155/1/012012>. EDN: <https://www.elibrary.ru/tyuxar>.
- [34] Alimov L.E., Anufriev A.V., Gurskaya A.V., Chepurnov V.I., Puzyrnaya G.V., Dolgoplov M.V. Silicon Carbide 3C-SiC phase band structures calculation in DFT // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1686. Article number 012040. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1686/1/012040>. EDN: <https://www.elibrary.ru/sjiien>.
- [35] Manual PC1Dmod 6.1. PC1D. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/welcome-to-pvcdrom/pc1d> (дата обращения: 15.03.2023)
- [36] Battaglia Corsin, Cuevas Andres, De Wolf Stefaan. High-efficiency Crystalline Silicon Solar Cells: Status and Perspectives // Energy & Environmental Science. 2016. Vol. 9, Issue 5. Pp. 1552–1576. DOI: <https://doi.org/10.1039/C5EE03380B>.
- [37] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <https://www.lammps.org/> (дата обращения: 15.03.2023)
- [38] Chavez J., Zhou X., Almeida S., Aguirre R., Zubia D. Molecular Dynamics Simulations of CdTe/CdS Heteroepitaxy - Effect of Substrate Orientation // Journal of Materials Science Research. 2016. Vol. 5, Issue 3. DOI: <https://doi.org/10.5539/jmsr.v5n3p1>.
- [39] Synopsys. URL: <https://www.synopsys.com/manufacturing/tcad.html> (дата обращения: 15.03.2023)

- [40] Петросянц К.О., Харитонов И.А., Пугачев А.А. Расчет ВАХ бетавольтаических микробатарей с использованием универсальной TCAD-модели // Наноиндустрия. 2020. № S96-1. С. 291–294. DOI <https://doi.org/10.22184/1993-8578.2020.13.3s.291.294>. EDN: <https://www.elibrary.ru/pytdkj>.
- [41] Supriyo Datta. Nanoscale device modeling: the Green's function method // Superlattices and Microstructures. 2000. Vol. 28, Issue 4. Pp. 253–278. DOI: <https://doi.org/10.1006/spmi.2000.0920>.
- [42] Qamar A., Tanner P., Dao D.V., Phan H.P., Dinh T. Electrical Properties of p-type 3C-SiC/Si Heterojunction Diode Under Mechanical Stress // IEEE Electron Device Letters. 2014. Vol. 35, Issue 12. Pp. 1293–1295. DOI: <https://doi.org/10.1109/LED.2014.2361359>.
- [43] COMSOL — Software for Multiphysics Simulation: semiconductor-module. URL: <https://www.comsol.ru/semiconductor-module> (дата обращения: 15.03.2023)
- [44] Rahimi R., Miller C.M., Raghavan S., Stinespring C.D., Korakakis D., Electrical properties of strained nano-thin 3C-SiC/Si heterostructures // Journal of Physics D: Applied Physics. 2009. Vol. 42, Number 5. Article number 055108. DOI: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/42/5/055108>.
- [45] nanoHUB. URL: [www.nanohub.org](http://www.nanohub.org). (дата обращения: 15.03.2023)
- [46] Reyyan Kavak Yuruk, Hayriye Tutunculer. Theoretical Investigation of High-Efficiency GaN-Si Heterojunction Betavoltaic Battery // Canadian Journal of Physics. 2019. Vol. 97, Number 9. Pp. 1031–1038. DOI: <https://doi.org/10.1139/cjp-2018-0579>.
- [47] Mohammadi N. Evaluation of Different Semiconductors Effect on Radio-Isotopic Battery Performance // Iranian Journal of Applied Physics. 2024. Vol. 13, Issue 4 - Serial Number 35, Pp. 93–111. DOI: <https://doi.org/10.22051/ijap.2023.44175.1334>.
- [48] Lundstrom Mark S. Fundamentals of Nanotransistors. In: Lessons from Nanoscience: A Lecture Notes Series: Vol. 6. Singapore: World Scientific Publishing Company, 2017. <https://doi.org/10.1142/9018>
- [49] Милнс А., Фойхт Д. Гетеропереходы и переходы "металл-полупроводник". Москва: Мир, 1975. 432 с.



Scientific article

DOI: 10.18287/2541-7525-2024-30-1-64-81

Submitted: 13.12.2023

Revised: 19.01.2024

Accepted: 28.02.2024

**M. V. Dolgopolov**

Samara State Technical University, Samara, Russian Federation

E-mail: [mikhaildolgopolov68@gmail.com](mailto:mikhaildolgopolov68@gmail.com). ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8725-7831>

**M. V. Elisov**

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: [maksimelisov2003@gmail.com](mailto:maksimelisov2003@gmail.com). ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-3097-2703>

**S. A. Radzhapov**

Physical-Technical Institute NGO PHYSICS-SUN, ASUZ

E-mail: [rsoft@mail.ru](mailto:rsoft@mail.ru). ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4615-027X>

**I. R. Rakhmankulov**

Samara National Research University, Samara, Russian Federation

E-mail: [79297014450@ya.ru](mailto:79297014450@ya.ru). ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-9873-0093>

**A. S. Chipura**

Samara State Technical University, Samara, Russian Federation

E-mail: [al\\_five@mail.ru](mailto:al_five@mail.ru). ORCID: <https://orcid.org/0009-0004-0425-0653>

## MODELING OF SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURES FOR ENERGY CONVERTERS AND SENSORS

### ABSTRACT

A set of modeling programs for constructing a sequence of energy zones of heterojunctions is presented for analyzing the distribution of charge carriers in the heterostructure and internal characteristics, for describing the processes of charge transfer and accumulation. Wolfram Mathematica analytical system and Delphi programming language were used. The main elements of materials are semiconductors, metals of contact structures and injection regions of nonequilibrium carriers. The programs allow determining the structural characteristics of materials, active zones and spatial charge regions, calculating quasi-Fermi levels and built-in potentials, as well as the efficiency of heterostructures in general and for separation-charge collection, charge accumulation, determining the type of metallization of barrier or ohmic contact.

**Key words:** software package; mathematical modeling; heterojunctions; heterostructures; semiconductors; injection; energy converters; sensors; activated nanoscale heterojunctions; p-n junctions; electronic band structure.

**Citation.** Dolgoplov M.V., Elisov M.V., Radzhapov S.A., Rakhmankulov I.R., Chipura A.S. Modeling of semiconductor heterostructures for energy converters and sensors. *Vestnik Samarского университета. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2024, vol. 30, no. 1, pp. 64–81. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2024-30-1-64-81>. (In Russ.)

**Information about the conflict of interests:** authors and reviewers declare no conflict of interests.

© Dolgoplov M.V., Elisov M.V., Radzhapov S.A., Rakhmankulov I.R., Chipura A.S., 2024

*Mikhail V. Dolgoplov* — associate professor, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Department of Higher Mathematics, Samara State Technical University, 244, Molodogvardeyskaya Street, Samara, 443100, Russian Federation.

*Maksim V. Elisov* — Department of General and Theoretical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

*Sali A. Radzhapov* — Physical-Technical Institute NGO PHYSICS-SUN, ASUZ, 2B, Chingiz Aitmatov Street, Tashkent, 100084, Uzbekistan.

*Irek R. Rakhmankulov* — Employee, Laboratory of Mathematical Physics, Samara National Research University, 34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russian Federation.

*Alexander Sergeevich Chipura* — researcher and lecturer of the Department of Higher Mathematics, Samara State Technical University, 244, Molodogvardeyskaya Street, Samara, 443100, Russian Federation.

## References

- [1] Alferov Zh.I. The History and Future of Semiconductor Heterostructures. *Semiconductors*, 1998, vol. 32, issue 1, pp. 3–18. Available at: <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/34218>.
- [2] Yakimov E.B. Prediction of Betavoltaic Battery Parameters. *Energies*, 2023, vol. 16, issue 9, Article number 3740. DOI: <https://doi.org/10.3390/en16093740>.
- [3] Naseem M.B., Kim H.S., Lee J., Kim C.H., In S.-I. Betavoltaic Nuclear Battery: A Review of Recent Progress and Challenges as an Alternative Energy Source. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2023, vol. 127, issue 16, pp. 7565–7579. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c00684>.
- [4] Zhou Chunlin, Zhang Jinsong, Wang Xu, Yang Yushu, Xu Pan, Li Peixian, Zhang Lu, Chen Zhiyuan, Feng Huanran, Wu Weiwei. Review—Betavoltaic Cell: The Past, Present, and Future. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 2021, vol. 10, number 2, Article number 027005. DOI: <https://doi.org/10.1149/2162-8777/abe423>.
- [5] Bouzid F., Kayahan E., Saeed M.A. et al. Modeling and simulation of an InGaP/GaAs heterojunction betavoltaic cell powered by promethium-147. *Applied Physics A*, 2024, vol. 130, article number 222. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-024-07377-y>.
- [6] Chepurnov V.I., Rajapov S.A., Dolgoplov M.V., Puzyrnaya G.V., Gurskaya A.V. Efficiency determination problems for SiC\*/Si microstructures and contact formation. *Computational Nanotechnology*, 2021, vol. 8, no. 3, pp. 59–68. DOI: <http://doi.org/10.33693/2313-223X-2021-8-3-59-68>. EDN: <https://www.elibrary.ru/eybfqt>. (In Russ.)
- [7] Dolgoplov M.V., Elisov M.V., Rajapov S.A., Chipura A.S. Scaling Models of Electrical Properties of Photo- and Beta-Converters with Nano-Heterojunctions. *Computational Nanotechnology*, 2023, vol. 10, no. 1, pp. 138–146. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-1-138-146>. EDN: <https://www.elibrary.ru/wkecac>. (In Russ.)
- [8] Surnin O.L., Chepurnov V.I. Silicon carbide: materials for radioisotope energy sources. Patent Ru 2 733 616 C2, 05.10.2020. Application № 2020110496 dated 11.03.2020. Available at: [https://yandex.ru/patents/doc/RU2733616C2\\_20201005](https://yandex.ru/patents/doc/RU2733616C2_20201005). (In Russ.)
- [9] Dolgoplov M., Akimchenko A., Chepurnov V., Gurskaya A., Kuznetsov O., Mashmin A., Radenko V., Radenko A., Surnin O., Zanin G. Betavoltaic device in por-SiC/Si C-nuclear energy converter. *EPJ Web of Conferences*, 2017, vol. 158, p. 06004. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201715806004>. EDN: <https://www.elibrary.ru/xnlzim>.
- [10] Wang Y., Zheng R., Lu J., Li X., Chen Z., Zhang X., Zhang Y., Liang L., Zeng Y., Qin L., Liu Y. Theoretical prediction of output performance of <sup>63</sup>NiO-Si heterojunction betavoltaic cell. *Applied Physics Letters*, 2022, vol. 121, issue 8, Article Number 083901. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0100186>.

- [11] Li X., Lu J., Chen Z., Liu X., Liu Y., Zhang Y., Zhang Y., Tian F.  $^{14}\text{C}$  diamond as energy converting material in betavoltaic battery: A first principles study. *AIP Advances*, 2023, vol. 13, issue 11, Article Number 115314. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0177302>.
- [12] Mordkovich V.Z., Filimonenkov I.S., Tarelkin S.A. Prikhodko D.D., Luparev N.V., Golovanov A.V., Urvanov S.A., Blank V.D. Beta-voltaic current source and method of its manufacture. Patent RU 2807315 C1, 14.11.2023. Application № 2023119639 dated 26.07.2023. Available at: <https://patents.google.com/patent/RU2807315C1/ru>. (In Russ.)
- [13] Gurskaya A.V., Dolgopolov M.V., Rajapov S.A., Chepurnov V.I. Contacts for SiC Nano-Microwatt Energy Converters. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 3: Fizika. Astronomiya*, no. 1, p. 2310103. DOI: <https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.78.2310103>. EDN: <https://www.elibrary.ru/fcrbrk>.
- [14] Hong J.D., Davis R.F. Self-diffusion of carbon-14 in high-purity and n-doped  $\alpha$ -SiC single crystals. *Journal of the American Ceramic Society*, 1980, vol. 63, issue 9-10, pp. 546–552. DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1980.tb10762.x>.
- [15] Hon M.H., Davis R.F. Self-diffusion of  $^{14}\text{C}$  in polycrystalline  $\beta$ -SiC. *Journal of Materials Science*, 1979, vol. 14, pp. 2411–2421. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF00737031>.
- [16] Chandrashekhara M.V., Thomas C.I., Li H., Spencer M.G., Lal A. Demonstration of a 4H SiC betavoltaic cell. *Applied Physics Letters*, 2006, vol. 88, issue 3, Article Number 033506. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2166699>.
- [17] Qiao D.-Y., Chen X.-J., Ren Y., Yuan W.-Z. A Micro Nuclear Battery Based on SiC Schottky Barrier Diode. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2011, vol. 20, issue 3, pp. 685–690. DOI: <https://doi.org/10.1109/JMEMS.2011.2127448>.
- [18] Rakhimov R.Kh. A possible mechanism of the optical quantum tunneling effect in photocatalysts based on nanostructured functional ceramics. *Computational Nanotechnology*, 2023, vol. 10, no. 3, pp. 26–29. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-3-26-34>. EDN: <https://elibrary.ru/QZQMCA>. (In Russ.)
- [19] Lundstrom M. Carrier Transport in BJTs: from Ballistic to Diffusive and Off-Equilibrium. In: *IEEE BiCMOS and Compound Semiconductor Integrated Circuits and Technology Symposium (BCICTS)*. San Diego, CA, USA, 2018, pp. 174–181. DOI: <https://doi.org/10.1109/BCICTS.2018.8551154>.
- [20] Dolgopolov M.V., Chepurnov V.I., Chipura A.S., Elisov M.V., Radzhapov S. Scaling and activation of nanoheterojunctions on silicon and silicon carbide substrates. In: *Proceedings of the International Conference “Fundamental and Applied Problems of Modern Physics”*, 2023, section II, pp. 88–92. Available at: <https://elibrary.ru/item.asp?id=54922680>. EDN: <https://www.elibrary.ru/mfrqsi>.
- [21] Gurskaya A.V., Dolgopolov M.V., Chepurnov V.I. C-14 Beta Converter. *Physics of Particles and Nuclei*, 2017, vol. 48, no. 6, pp. 941–944. DOI: <https://doi.org/10.1134/S106377961706020X>. EDN: <https://www.elibrary.ru/xnlfpm>. (In English; original in Russian)
- [22] Dolgopolov M.V., Surnin O.L., Chepurnov V.I. Device for generating electric current by converting the energy of radio-chemical beta-decay of C-14. Patent Ru 2 714 690 C2, 19.02.2020. Application № 2019127719 dated 02.09.2019. Available at: [https://yandex.ru/patents/doc/RU2714690C2\\_20200219](https://yandex.ru/patents/doc/RU2714690C2_20200219). (In Russ.)
- [23] Dolgopolov M., Chepurnov V., Gurskaya A., Akimchenko A., Puzyrnaya G., Radzhapov S. Micro alloying of SiC by radioisotope. *EPJ Web of Conferences*, 2019, vol. 222, p. 02013. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201922202013>. EDN: <https://www.elibrary.ru/bxidmg>.
- [24] Dolgopolov M., Kuznetsov O., Chepurnov V., Gurskaya A., Radzhapov S. C-beta energy converter efficiency modeling. *EPJ Web of Conferences*, 2019, vol. 222, p. 02012. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201922202012>. EDN: <https://www.elibrary.ru/txrdbh>.
- [25] Galashev A.Y., Abramova K.A., Computer simulation of obtaining thin films of silicon carbide. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2023, vol. 25, issue 5, pp. 3834–3847. DOI: <https://doi.org/10.1039/D2CP04208H>.
- [26] Dolgopolov M.V., Elisov M.V., Radzhapov S.A., Chepurnov V.I., Chipura A.S. Efficiency of Activated Nano-Heterojunctions on Silicon and Silicon Carbide Substrates. *Computational Nanotechnology*, 2023, vol. 10, no. 4, pp. 91–102. DOI: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2023-10-4-91-102>. EDN: <https://www.elibrary.ru/bbevkn>. (In Russ.)
- [27] Verbelen Y., Boardman M., Andrade H.D., Mackenzie R., Wallace-Smith T., Kaluvan S., Hutson C., Osbourne S., Bickerton I., Fox N. et al. Closed-loop recycling process flow for diamond betavoltaics. In: F. Kongoli, K. Aifantis, C. Capiglia, A. Fox, V. Kumar, A. Tressaud, Z. Bakenov, A. Qurashi. (Eds.). Sustainable Industrial Processing Summit SIPS2022 Volume 14 Yazami Intl. Symp Secondary Battery Manufacturing & Recycling and Electrochemistry (pp. 89–104). Montreal, Canada: FLOGEN Star Outreach. URL: <https://www.flogen.org/sips2022/paper-14-244.html>.
- [28] Hwang Y., Park Y.H., Kim H.S., Kim D.H., Ali S., Sorcar S., Flores M.C., Hoffmann M.R., In S.-I. C-14 powered dye-sensitized betavoltaic cells. *Chemical Communications*, 2020, vol. 56, issue 52, pp. 7080–7083. DOI: <https://doi.org/10.1039/D0CC02046J>.

- [29] Li X., Lu J., Zheng R., Wang Y., Xu X., Liu Y., He R. Comparison of time-related electrical properties of PN junctions and Schottky diodes for ZnO-based betavoltaic batteries. *Nuclear Science and Techniques*, 2020, vol. 31, Article number 18. DOI: <https://doi.org/10.1007/s41365-020-0723-y>.
- [30] Shanxue Xi, Linxiang Li, Chunzhi Zhou, Haijun Li, Guangwei Huang, Kun Wu, Zungang Wang, Yiyun Zhang. Researches on the performance of GaN-PIN betavoltaic nuclear battery. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 2022, vol. 177, issue 3-4, pp. 213–229. DOI: <https://doi.org/10.1080/10420150.2021.2024541>.
- [31] Gurskaya A.V., Dolgoplov M.V., Elisov M.V., Radenko V.V., Radzhapov S.A. Combined Scaling of Nanochip Generators for Betavoltaics. *Physics of Particles and Nuclei Letters*, 2023, vol. 20, no. 5, pp. 1088–1093. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1547477123050333>. EDN: <https://www.elibrary.ru/fseakz>.
- [32] Dolgoplov M.V., Chipura A.S. Modeling of nanoheterojunction betavoltaic cell on GaN and GaP with Si and 3C-SiC/Si. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya / Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2023, vol. 29, no. 4, pp. 133–142. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2023-29-4-133-142>. EDN: <https://www.elibrary.ru/cwlrwb>. (In Russ.)
- [33] Chepurnov V.I., Dolgoplov M.V., Gurskaya A.V., Puzyrnaya G.V., Elkhimov D.E. Radiation-doped SiC\*/Si heterostructure formation and defects evolution. *Journal of Physics: Conference Series*, 2022, vol. 2155, Article number 012012. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2155/1/012012>. EDN: <https://www.elibrary.ru/tyuxar>.
- [34] Alimov L.E., Anufriev A.V., Gurskaya A.V., Chepurnov V.I., Puzyrnaya G.V., Dolgoplov M.V. Silicon Carbide 3C-SiC phase band structures calculation in DFT. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1686, Article number 012040. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1686/1/012040>. EDN: <https://www.elibrary.ru/sjien>.
- [35] Manual PC1Dmod 6.1. PC1D. Available at: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/welcome-to-pvcdrom/pc1d> (accessed 15.03.2023)
- [36] Battaglia Corsin, Andres Cuevas, Stefaan De Wolf. High-efficiency Crystalline Silicon Solar Cells: Status and Perspectives. *Energy & Environmental Science*, 2016, vol. 9, issue 5, pp. 1552–1576. DOI: <https://doi.org/10.1039/C5EE03380B>.
- [37] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Available at: <https://www.lammps.org/> (accessed 15.03.2023)
- [38] Chavez J., Zhou X., Almeida S., Aguirre R., Zubia D. Molecular Dynamics Simulations of CdTe/CdS Heteroepitaxy — Effect of Substrate Orientation. *Journal of Materials Science Research*, 2016, vol. 5, issue 3. DOI: <https://doi.org/10.5539/jmsr.v5n3p1>.
- [39] Synopsys. Available at: <https://www.synopsys.com/manufacturing/tcad.html> (accessed 15.03.2023)
- [40] Petrosyants K.O., Pugachev A.A., Kharitonov A.A. Calculating CVC Betavoltaic Microbatteries Using A Universal TCAD Model. *Nanoindustry*, 2020, no. S96-1, pp. 291–294. DOI: <https://doi.org/10.22184/1993-8578.2020.13.3s.291.294>. EDN: <https://www.elibrary.ru/pytdkj>. (In Russ.)
- [41] Supriyo Datta. Nanoscale device modeling: the Green's function method. *Superlattices and Microstructures*, 2000, vol. 28, issue 4, pp. 253–278. DOI: <https://doi.org/10.1006/spmi.2000.0920>.
- [42] Qamar A., Tanner P., Dao D.V., Phan H.P., Dinh T. Electrical Properties of p-type 3C-SiC/Si Heterojunction Diode Under Mechanical Stress. *IEEE Electron Device Letters*, 2014, vol. 35, issue 12, pp. 1293–1295. DOI: <https://doi.org/10.1109/LED.2014.2361359>.
- [43] COMSOL: semiconductor-module. Available at: <https://www.comsol.ru/semiconductor-module> (accessed 15.03.2023)
- [44] Rahimi R., Miller C.M., Raghavan S., Stinespring C.D., Korakakis D., Electrical properties of strained nano-thin 3C-SiC/Si heterostructures. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2009, vol. 42, number 5, Article number 055108. DOI: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/42/5/055108>.
- [45] nanoHUB. Available at: [www.nanohub.org](http://www.nanohub.org) (дата обращения: 15.03.2023)
- [46] Reyyan Kavak Yuruk, Hayriye Tutunculer, Theoretical Investigation of High-Efficiency GaN-Si Heterojunction Betavoltaic Battery. *Canadian Journal of Physics*, 2019, vol. 97, number 9, pp. 1031–1038. DOI: <https://doi.org/10.1139/cjp-2018-0579>.
- [47] Mohammadi N. Evaluation of Different Semiconductors Effect on Radio-Isotopic Battery Performance. *Iranian Journal of Applied Physics*, 2024, vol. 13, issue 4, Serial Number 35, pp. 93–111. DOI: <https://doi.org/10.22051/ijap.2023.44175.1334>.
- [48] Lundstrom Mark S. Fundamentals of Nanotransistors. In: (*Lessons from Nanoscience: A Lecture Notes Series: Vol. 6*). Singapore: World Scientific Publishing Company, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1142/9018>.
- [49] Milnes A.G., Feucht D.L. Heterojunctions and metal-semiconductor junctions. Moscow: Mir, 1975, 432 p. (In Russ.)