# СПИН-ЗАВИСИМОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ НА ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ДИОКСИДА ТИТАНА В УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛАХ

### Т. Н. Сидорова

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, П. Бровки, 6, 220013, Минск, Республика Беларусь, e-mail: sharsu antea@bk.ru

Представлены результаты моделирования спин-зависимого туннелирования электронов на поверхностные состояния диоксида титана, образованные адсорбированными органическими загрязнениями. Коэффициент туннельной прозрачности для генерируемых солнечным светом электронов рассчитан с помощью разработанной модели на основе метода фазовых функций. В качестве инжектора спин-зависимых электронов в диоксид титана в структуре используется пленка ферромагнетика. Показано, что величина спиновой поляризации электронов на поверхностных состояниях достигает значения до 25 %, что может способствовать реализации процессов спинового катализа очистки от органических загрязнений.

*Ключевые слова:* туннелирование; коэффициент туннельной прозрачности; диоксид титана; поверхностные состояния.

# SPIN-DEPENDENT TUNNELING TO THE SURFACE STATES OF THE TITANIUM DIOXIDE

## T. N. Sidorova

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, P.Brouki, 6, 220013, Minsk, Belarus Corresponding author: T. N. Sidorova (sharsu antea@bk.ru)

A simulation of spin-dependent tunneling of electrons to the surface states of the titanium dioxide, which are created by the adsorbed organic impurities is performed. Coefficient of tunneling transparency for the generated by the sunlight electrons is calculated by the model based on phase function method. As injector of spin-dependent electrons to the titanium dioxide in the structure a film of the ferromagnetic is used. It is shown that value of electron spin polarization on the surface states reach a value up to 25 %. It can help in the realization of process of the spin catalysis peeling from the organic impurities.

Key words: tunneling; tunneling transmission coefficient; titanium dioxide; surface states.

#### введение

Диоксид титана является востребованным материалом для фотовольтаики и систем очистки от органических загрязнений [1]. Он обладает широкой запрещенной зоной (3.1–3.5 эВ) и его прямое использование ограничивается ультрафиолетовым диапазоном солнечного света [2–4]. Поэтому большой интерес находят гетероструктуры, в состав которых входит диоксид титана наряду с другими полупроводниками, имеющими меньшую ширину запрещенной зоны, например, кремнием. Это позволяет использовать каталитические свойства диоксида титана в видимой части спектра солнечного излучения. В данной работе рассматриваются процессы, происходящие в гетероструктуре TiO<sub>2</sub>/Co/Si (Si – подложка, TiO<sub>2</sub> – пленка нанометровой толщины, в качестве источника спин-поляризованных электронов применяется пленка Со между кремнием и TiO<sub>2</sub>). Генерированные электронно-дырочные пары в кремнии разделяются в гетеропереходе за счет потенциальных барьеров.

Взаимодействуя с реагирующей системой, спиновый катализатор обобществляет свой спин со спином реагирующей системы. В такой обобщённой спиновой системе ранее закрытые реакционные каналы становятся открытыми, т.е. разрешенными по спину.

Схема рассматриваемого процесса показана на рис. 1. Дырки, фотогенерируемые в кремнии, отталкиваются от потенциального барьера на границе с кобальтом и рекомбинируют с электронами в кремнии. Электроны, генерируемые в кремнии, ввиду отсутствия потенциального барьера на границе с кобальтом переходят в него. Далее электроны, приобретая определенную спиновую поляризацию в Со, переходят в  $TiO_2$ и далее на его поверхностные состояния. На своем пути к границе раздела между структурой и окружающей ее газовой (или жидкой) средой они встречают потенциальный барьер из поверхностных состояний, образованных адсорбированными на поверхности  $TiO_2$  примесями. В общем случае он имеет достаточно сложную форму. Здесь каждый локальный энергетический максимум соответствует определенному поверхностному состоянию, а потенциальные ямы между максимумами отражают возможность перехода электронов из одного поверхностного состояния в другое.



Рисунок 1. – Потенциальная диаграмма структуры TiO<sub>2</sub>/Si с учетом поверхностных состояний на TiO<sub>2</sub>. На рисунке показаны  $E_{C1}$ ,  $E_{C2}$  – дно зоны проводимости,  $E_{V1}$ ,  $E_{V2}$  – потолок валентной зоны,  $E_{g1}$ ,  $E_{g2}$  – ширина запрещенной зоны *p*-Si и *n*-TiO<sub>2</sub> соответственно,  $E_F$  – уровень Ферми,  $\chi_1$ ,  $\chi_2$ ,  $\chi_3$  — сродство к электрону

При наличии спиновой поляризации электроны с различной ориентацией спина приобретают селективность в процессах туннелирования и процессах взаимодействия с органическими комплексами на поверхности TiO<sub>2</sub>, что позволяет реализоваться процессам спинового катализа.

### модель

Для расчетов коэффициента туннельной прозрачности потенциальных барьеров нами разработана модель на основе метода фазовых функций (МФФ) [5]. Для моде-

лирования спин-зависимых коэффициентов прохождения мы используем квазиодномерное уравнение Шредингера для каждой спиновой компоненты в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\uparrow\downarrow}^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2 k_{\uparrow\downarrow}^2}{2m_{\uparrow\downarrow}^*} + U_0 - h_0 \sigma - qV_p(x) - q\varphi(x) \pm V_{sc}(x) \bigg| \Psi_{\uparrow\downarrow}(x) = E \Psi_{\uparrow\downarrow}(x) , \qquad (1)$$

где x – координата направления туннелирования,  $V_{sc}$  – потенциал рассеяния,  $q = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл – элементарный заряд,  $\psi_{\uparrow\downarrow}(x)$  – волновая функция,  $V_p > 0$  – потенциал, обусловленный внешним электрическим полем на поверхности TiO<sub>2</sub>,  $m^* = 9,11 \cdot 10^{-31}$  кг и E – эффективная масса и энергия туннелирующего электрона,  $q\varphi(x)$  – потенциальная энергия,  $U_0$  – максимальная высота потенциального барьера на поверхности TiO<sub>2</sub> для электронов из зоны проводимости,  $\hbar$  – постоянная Планка. Согласно методу фазовых функций [5], уравнение для функции отражения B(x) от потенциального барьера имеет вид:

$$\frac{dB_{\uparrow\downarrow}(x)}{dx} = -\frac{U_{eff}(x)}{2ik_{\uparrow\downarrow}} \left[ \exp(ik_{\uparrow\downarrow}x) + B_{\uparrow\downarrow}(x) \exp(-ik_{\uparrow\downarrow}x) \right]^2,$$
(2)

с граничным условием  $B_{\uparrow\downarrow}(x \to +\infty) = 0$ , где  $k_{\uparrow\downarrow} = \sqrt{2m^*_{\uparrow\downarrow}(E \pm h_0 \sigma)/\hbar^2}$  – волновой вектор туннелирующих электронов,  $\sigma = \pm 1$  – индекс спина (спин-вверх и спин-вниз);  $h_0 = 1-2$  эВ – молекулярное поле в ферромагнетике, d – ширина туннельного барьера,  $U_{eff}$  – эффективный потенциал. Принимая, что B(x) = a(x) + ib(x) и разлагая  $\exp(\pm ikx)$ , получим следующую систему уравнений для нахождения компонент функции отражения:

$$\frac{da_{\uparrow\downarrow}(x)}{dx} = \frac{U_{eff}(x)}{2k_{\uparrow\downarrow}} \Big[ -\sin(2k_{\uparrow\downarrow}x) - 2b_{\uparrow\downarrow} + (a_{\uparrow\downarrow}^2 - b_{\uparrow\downarrow}^2)\sin(2k_{\uparrow\downarrow}x) - 2a_{\uparrow\downarrow}b_{\uparrow\downarrow}\cos(2k_{\uparrow\downarrow}x) \Big], \quad (3)$$

$$\frac{db_{\uparrow\downarrow}(x)}{dx} = \frac{U_{eff}(x)}{2k_{\uparrow\downarrow}} \Big[ \cos(2k_{\uparrow\downarrow}x) + 2a_{\uparrow\downarrow} + (a_{\uparrow\downarrow}^2 - b_{\uparrow\downarrow}^2) \cos(2k_{\uparrow\downarrow}x) - 2a_{\uparrow\downarrow}b_{\uparrow\downarrow} \sin(2k_{\uparrow\downarrow}x) \Big], \quad (4)$$

Коэффициент туннельного прохождения через барьер равен:

$$D_{\uparrow\downarrow} = \exp\left[\frac{1}{k_{\uparrow\downarrow}}\int_{a}^{b} U_{eff}(x) \left[b_{\uparrow\downarrow}(x)\cos(2k_{\uparrow\downarrow}x) - a_{\uparrow\downarrow}(x)\sin(2k_{\uparrow\downarrow}x)\right] dx\right].$$
(5)

Система уравнений (3)–(5) позволяет рассчитать коэффициент туннельной прозрачности D(E) при туннелировании электронов, генерированных солнечным светом на поверхностные состояния.

Степень спиновой поляризации электронов на поверхностных состояниях определяется разницей значений волнового вектора на уровне Ферми для электронов спин-вверх и спин-вниз. Ее величину находим из выражения:

$$P = \frac{\left|D_{\uparrow} - D_{\downarrow}\right|}{D_{\uparrow} + D_{\downarrow}},\tag{6}$$

где  $D_{\uparrow}$  и  $D_{\downarrow}$  – туннельная прозрачность для электронов спин-вверх и спин-вниз соответственно.

#### РЕЗУЛЬТАТЫ

Для расчетов мы используем потенциальный рельеф, состоящий из 2-х потенциальных барьеров и потенциальной ямы между ними (рис. 2, *a*). Параметры расчёта: ширина туннельного барьера d = 0.5 нм,  $qV_p = 0,1-1$  эВ, высота потенциального барьера  $U_0 = 120$  эВ. Рис. 2б иллюстрирует зависимость величины степени поляризации от приложенного потенциала для различных форм потенциального рельефа. Как видно характер зависимостей может кардинально меняться в зависимости от ширины потенциальной ямы (0,1, 0,15 и 0,2 нм для профилей 2, 1 и 3 соответственно). В случае меньшей ширины потенциальной ямы между двумя барьерами степень поляризации меняется относительно линейно. При незначительном изменении ширины потенциальной ямы качественно зависимость  $P(qV_p)$  не изменяется (рис. 2,  $\delta$ , линии l и 2).



Рисунок 2. – *а* – Форма потенциального рельефа на поверхности структуры, *б* – величина степени поляризации от приложенного потенциала в зависимости от формы потенциального рельефа

Однако при дальнейшем увеличении ширины потенциальной ямы наблюдается иной характер зависимостей – при  $qV_p = 0,2$  эВ появляется область насыщения (рис. 2, б, линия 3). Величина степени поляризации остается постоянной (P = 7,5%) вплоть до момента, когда приложенный потенциал достигает значения 0,9 эВ, после чего начинает постепенно падать. Таким образом, при изменении  $qV_p = 0-1,0$  эВ величина спиновой поляризации P электронов на поверхностных состояниях изменяется от 0,1 до 25%.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изучена зависимость степени поляризации электронов на поверхности от приложенного напряжения. Данная зависимость была рассмотрена для потенциального рельефа, состоящего из двух потенциальных барьеров, разделенных потенциальной ямой. Для относительно узкой ямы величина спиновой поляризации растет почти линейно с ростом приложенного напряжения. Однако с увеличением ширины потенциальной ямы зависимость спиновой поляризации от приложенного напряжения насыщается. Область насыщения наступает при небольшом значении  $qV_p$  равном 0,2 эВ, а при  $qV_p = 0.9$  эВ величина P начинает уменьшаться. Такое поведение объясняется резонансным прохождением электронов через дискретные уровни в квантовой яме и интерференцией электронных волн, отражённых от второго барьера.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

- 1. Константинова, Е. А. Наноматериалы на основе диоксида титана с высокой фотокаталитической активностью / Е.А. Константинова, М.П. Кушников // Российские нанотехнологии, 2019. – Т. 14, № 5–6. – С. 3–10.
- Antireflecting-passivating dielectric films on crystalline silicon solar cells for space applications / M. Barrera [et al.] // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2008. – Vol. 92, № 9. – P. 1115–1122.
- Nanostructured materials for solar energy conversion / Ed. by T. Soga. Amsterdam: Elsevier, 2006. – P. 200–216.
- 4. Electrical and photoelectrical properties of photosensitive heterojunctions *n*-TiO<sub>2</sub>/*p*-CdTe / V.V. Brus [et al.] // Semicond. Sci. Technol. 2011. Vol. 26, № 12. P. 125006.
- 5. Бабиков, В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике / В.В. Бабиков. Москва: Наука, 1976. 288 с.

# ВОЛЬТ-АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОТРИОДА С КАТОДОМ СПИНДТА

## Н. Ф. Столяр

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П.Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь, e-mail: n.stolyar@list.ru

Представлены результаты моделирования вольт-амперной характеристики нанотриода с катодом Спинда. Получено оценочное значение предельной плотности тока автоэлектронной эмиссии, при которой катод обладает тепловой устойчивостью. Приведены результаты сравнения вольт-амперных характеристик нанотриодов с медным и платиновым катодами. Произведены расчеты коэффициента усиления для нанотриода при предельно возможных для него плотностях тока.

*Ключевые слова:* катод Спиндта; вакуумная наноэлектроника; автоэлектронная эмиссия; тепловая устойчивость.

# CURRENT-VOLTAGE CHARACTERISTICS OF NANOTRIODE WITH SPINDT CATHODE

## N. F. Stoliar

Belarus State University of Informatics and Radioelectronics, P.Brovka str. 6, 220013 Minsk, Belarus Corresponding author: N. F. Stoliar (n.stolyar@list.ru)

Modeling of current-voltage characteristic of nanotriode with Spindt cathode is shown. Estimated value of limiting current density of field emission when cathode has heat stability was calculated. Comparison of current-voltage characteristic of nano triodes with cooper and platina cathodes is given. Coefficient of gain of triode on ultimate possible values of current density was calculated.

Key words: Spindt cathode; vacuum nanoelectronics; field emission; thermal stability.

#### введение

На сегодняшний день перспективным направлением развития электроники является вакуумная наноэлектроника, которая представляет собой симбиоз вакуумной и