

ЗАРЯДОВЫЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ TiO₂/Si ПРИ ОБЛУЧЕНИИ СОЛНЕЧНЫМ СВЕТОМ

А.А. Кураптова, А.Л. Данилюк

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. П. Бровки 6, Минск 220013, Беларусь, anku21qwerty@gmail.com, danilyuk@bsuir.by

В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования зарядовых свойств гетероструктуры пленка диоксида титана толщиной 100 нм на кремниевой подложке под воздействием излучения, в соответствии со спектром AM1.5g. Были исследованы зависимости скоростей генерации на поверхности пленки TiO₂ и на границе раздела полупроводников, а также величины поверхностной плотности электрического заряда σ на пленке TiO₂, от длины волны падающего излучения и от энергии E_t дефектного уровня Ti³⁺ в диоксиде титана. Было выявлено монотонное возрастание плотности электронного заряда σ на пленке диоксида титана с ростом энергии E_t и немонотонное изменение с ростом длины волны. Также было установлено, что в формировании заряда на поверхности пленки диоксида титана участвуют носители заряда, сгенерированные в кремниевой подложке под воздействием солнечного излучения, и максимальная величина заряда на поверхности пленки TiO₂ совпадает с длиной волны максимальной мощности солнечного излучения.

Ключевые слова: диоксид титана; кремний; гетероструктура; дефекты; фотокатализ; солнечный спектр.

CHARGING PROPERTIES OF THE TiO₂/Si HETEROSTRUCTURE UNDER SOLAR IRRADIATION

Hanna Kuraptsova, Alexander Danilyuk

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,
6 P. Brovki Str., 220013 Minsk, Belarus, anku21qwerty@gmail.com, danilyuk@bsuir.by

This work presents the results of computer modeling of the charge properties of a heterostructure consisting of a 100 nm thick titanium dioxide film on a silicon substrate under irradiation, in accordance with the AM1.5g spectrum. The radiation power density attributable to each of the wavelengths used in the calculations was set in proportion to the power density in the AM1.5g spectrum, fixed as a standard for describing the efficiency of photovoltaic systems. The total power density for all wavelengths was 1 kW/m². The dependences of the generation rates on the TiO₂ film surface and at the semiconductor interface, as well as the surface electric charge density σ on the TiO₂ film, on the incident radiation wavelength and on the energy E_t of the Ti³⁺ defect level in titanium dioxide were studied. A monotonic increase in the electron charge density σ was observed on a titanium dioxide film with increasing energy E_t , and a non-monotonic change with increasing wavelength was detected. It was also found that charge carriers generated in the silicon substrate under the influence of solar radiation participate in the formation of a charge on the surface of a titanium dioxide film, and the maximum charge on the surface of the TiO₂ film coincides with the wavelength of the maximum power of solar radiation.

Keywords: titanium dioxide; silicon; heterostructure; defects; photocatalysis; solar spectrum.

Введение

Оксиды титана TiO₂, цинка ZnO, молибдена MoO_x и другие широкозонные полупроводниковые оксиды металлов широко используются в различных областях: в очистке воды и воздуха, в том числе от тяжелых металлов и органических соединений, в солнечных батареях, фотокаталитическом разложении воды, производстве защитных покрытий, композит-

ных строительных материалах, прозрачных контактах в солнечных батареях и оптических дисплеях и во многих других сферах [1, 2]. Диоксид титана TiO₂ отличается налаженной технологией производства, дешевизной, химической стабильностью, отсутствием токсичности. Ширина запрещенной зоны диоксида титана TiO₂ в различных модификациях составляет 3.0-3.2 эВ, поэтому диоксид ти-

тана может быть возбужден только ультрафиолетовым излучением с длиной волны менее 380 нм. Использование полупроводников с более узкой запрещенной зоной позволяет расширить диапазон длин волн, при котором происходит генерация носителей заряда в гетероструктуре.

Большой вклад в проводимость диоксида титана вносят ловушки, вызванные присутствием кислородных вакансий вследствие нарушения стехиометрии TiO₂. Энергия данных ловушечных уровней в запрещенной зоне составляет 0.2-0.8 эВ, считая от дна зоны проводимости [3].

Плотность мощности солнечного излучения различается для каждой длины волны излучения и определяется поглощением фотонов при прохождении через слой атмосферы. Спектр AM1.5g был выбран и закреплен в международных стандартах для того, чтобы можно было сравнивать мощность разных солнечных батарей и других фотоэлектрических устройств. Ему соответствует интегральная плотность мощности солнечного излучения, равная 1 кВт/м² [4].

Материалы и методы исследования

Исследуемая гетероструктура представляла собой пленку диоксида титана толщиной 100 нм на кремниевой подложке. Моделирование было проведено с помощью программного пакета Comsol Multiphysics с учетом захвата носителей заряда на ловушки в TiO₂. Энергетический уровень ловушек Ti³⁺ задавался равным $E_f=0.2-0.6$ эВ ниже дна зоны проводимости на. Концентрация дефектов в объеме пленки диоксида титана 10^{16} см⁻³, на поверхности 10^{12} см⁻². Температура 300 К. Толщина пленки TiO₂ 100 нм.

Основные параметры материалов в данной структуре, использованные при моделировании, представлены в таблице 1 [1].

Оптические параметры материалов задавались таблично как действительная и мнимая части коэффициентов преломле-

ния [5, 6]. Максимумы мнимых частей коэффициентов преломления (коэффициентов экстинкции) для TiO₂ и Si равны 1.5 и 5.29 и соответствуют длинам волн 260 и 290 нм.

Табл. 1. Параметры материалов

	p-Si	n-TiO ₂
E_g , эВ	1.124	3.2
χ , эВ	4.05	4.8
ϵ	11.7	40
τ_n , мкс	10	0.024
τ_p , мкс	10	0.0023
μ_n , см ² /(В·с)	1450	4
μ_p , см ² /(В·с)	500	0,1
N_a, N_d , см ⁻³	10^{17}	10^{16}

Плотность мощности падающего на структуру излучения P задавалась для каждой длины волны в соответствии со спектром AM1.5g, табл.2.

Табл. 2. Плотность мощности излучения

Длина волны, нм	P , Вт/м ²
300	0.33
350	56.55
400	108.72
500	168.57
600	160.24
700	141.06
800	118.26
900	77.049
1000	80.34
1110	42.31
1200	46.58

Результаты и их обсуждение

На рисунке 1 представлены зависимости скорости генерации G на поверхности пленки TiO₂ и на границе раздела Si/TiO₂ от длины волны падающего излучения. Максимальная скорость генерации на поверхности пленки равна $1.1 \cdot 10^{13}$ см⁻³с⁻¹ при длине волны 350 нм, а на границе раздела $7.93 \cdot 10^{14}$ см⁻³с⁻¹ соответственно при $\lambda=800$ нм.

Поверхностная плотность заряда σ в зависимости от длины волны падающего излучения представлена на рисунке 2.

Как можно видеть из рис.1, скорость генерации носителей заряда в кремнии существенно превышает скорость генера-

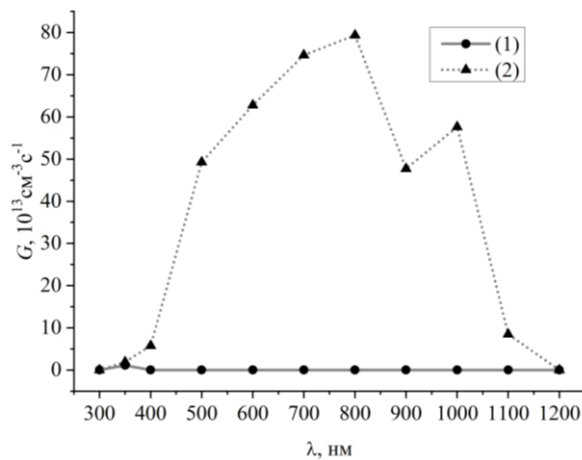


Рис. 1. Зависимость скорости генерации от длины волны на поверхности пленки TiO₂ (1) и на границе раздела Si/TiO₂ (2)

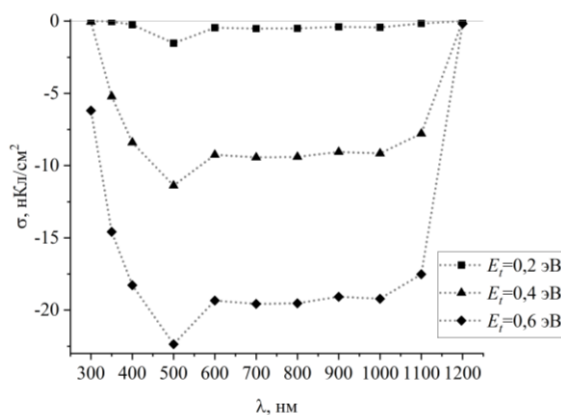


Рис. 2. Поверхностная плотность электрического заряда на поверхности пленки диоксида титана

ции в пленке диоксида титана.

Это связано с тем, что поглощение излучения в TiO₂ существенно только в УФ области, а в кремнии достигает максимума в области длин волн 700-800 нм. При этом для данной гетероструктуры Si/TiO₂ результаты проведенного моделирования воздействия, приближенного к спектральному составу солнечного света, продемонстрировали, что генерация носителей заряда в кремниевой подложке существенно влияет на образование отрицательного заряда на поверхности пленки диоксида титана, которая, в свою очередь,

возрастает при увеличении энергии ловушечных уровней в диоксиде титана.

Заключение

Результаты компьютерного моделирования зарядовых свойств гетероструктуры пленка диоксида титана толщиной 100 нм на кремниевой подложке под воздействием солнечного излучения, соответствующего спектру AM1.5g, показали следующее. Превалирующий вклад в скорость генерации носителей заряда, наблюдаемый в области длин волн 500-1000 нм, вносит кремниевая подложка, что коррелирует с максимальной плотностью поверхностного отрицательного заряда в этом диапазоне, величина которой растет с увеличением энергии ловушек в TiO₂. Полученные результаты позволяют расширить спектр поглощения TiO₂ в фотокаталитических устройствах и управлять фотокаталитическими процессами на поверхности диоксида титана.

Библиографические ссылки

- Ola O., Maroto-Valer M.M. Review of material design and reactor engineering on TiO₂ photocatalysis for CO₂ reduction. *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews* 2014; 24: 16-42.
- Novopashin V.V., Skvortsov L.A., Skvortsova M.I. Effect of composition nonstoichiometry on the optical properties of titanium dioxide films. *Journal of optical technology* 2018; 85(12): 803-807.
- Smirnova O.S., Grebenyuk A.G., Lobanov V.V. Titanium dioxide defect structures as catalytic sites. *Surface* 2017; 9(24): 44-56.
- IEC International Standard 60904-3 Ed. 2: "Photovoltaic Devices - Part 3: Measurement principles for terrestrial photovoltaic (PV) solar devices with reference spectral irradiance data", Geneva, 2008.
- Sarkar S., Gupta V., Kumar M., Schubert J., Probst P.T., Joseph J. et al. Hybridized guided-mode resonances via colloidal plasmonic self-assembled grating. *ACS Applied Materials & Interfaces* 2019; 11: 13752-13760.
- Green M.A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300K including temperature coefficients. *Solar Energy Materials & Solar Cells* 2008; 92: 1305-1310.