

Министерство образования Республики Беларусь  
Учреждение образования  
Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники

Зайцев Владимир Александрович

Влияние солнечного излучения на электронные процессы на поверхности  
оксидов титана и цинка

**АВТОРЕФЕРАТ**

на соискание степени магистра технических наук  
по специальности 1-41 80 01 Твердотельная электроника, радиоэлектронные  
компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах

---

Научный руководитель  
Данилюк Александр Леонидович  
кандидат физ.-мат. наук, доцент

---

Минск 2019

## КРАТКОЕ ВВЕДЕНИЕ

Загрязнение воды является проблемой глобального масштаба. Органические соединения природного и искусственного происхождения, например, углеводороды, полихлорированные дифенилы, удобрения и пестициды, постоянно попадают в окружающую среду в виде отходов промышленности и сельского хозяйства. Промышленные очистные сооружения позволяют удалить большую часть загрязняющих веществ с помощью различных технологий очистки. Однако, данные технологии малоэффективны в отношении биологически токсичных и неразлагаемых органических соединений, процессы нейтрализации которых требуют применения усовершенствованных методов, таких как использование активированного угля, и окислительных процессов, имеющих высокую себестоимость и часто экономически нецелесообразных.

Применение полупроводниковых фотокатализаторов с целью генерирования свободных радикалов для активации процессов окисления органических соединений является одним из наиболее перспективных методов для реализации недорогостоящей и энергоэффективной методики очистки воды. Дополнительным преимуществом является то, что в «идеальных» условиях фотокаталитический материал не нуждается в замене, что обеспечивает непрерывность работы устройств на его основе. Таким образом, разработка и исследование эффективных фотокатализаторов на основе наноструктурированных полупроводниковых материалов является перспективным научным направлением.

В качестве таких фотокатализаторов могут быть использованы широкозонные полупроводники на основе оксидов титана ( $\text{TiO}_2$ ) и цинка ( $\text{ZnO}$ ), обладающих высокой фотокаталитической активностью, химической стойкостью, биосовместимостью и малой токсичностью.

Ключевым шагом в процессе разработки методики очистки воды является понимание того, насколько хорошо работает фотокатализатор при различных условиях окружающей его среды. Эффективность фотокатализатора обычно оценивают путем контроля скорости разложения в водном растворе в контролируемых условиях тестового красителя, обладающего рядом общих свойств какой-либо группы загрязнителей (например, для органических загрязнителей – бензолные кольца, сульфатные и аминогруппы) [10]. В качестве модельного органического загрязнителя целесообразно использование Родамина В ( $\text{C}_{28}\text{H}_{31}\text{ClN}_2\text{O}_3$ ), изменение концентрации которого в растворе удобно оценивать методом абсорбционной спектроскопии по уменьшению интенсивности основного пика поглощения.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### **Актуальность темы магистерской диссертации.**

Исследования электронных процессов на поверхности оксидов титана и цинка в настоящее время является весьма актуальным в связи с мировой потребностью на дешевые в эксплуатации системы фильтрации воды от загрязняющих органических соединений природного и искусственного происхождения, например, углеводов, полихлорированных дифенилов, удобрений и пестицидов, поскольку современные промышленные очистные сооружения, использующие технологии осаждения, фильтрации, биотехнологических методов и др., считающихся относительно эффективными и безопасными при очистке сточных вод. Однако, данные технологии малоэффективны в отношении биологически токсичных и неразлагаемых органических соединений, процессы нейтрализации которых требуют применения усовершенствованных методов, таких как использование активированного угля, и окислительных процессов, имеющих высокую себестоимость и часто экономически нецелесообразных.

**Цели и задачи исследования.** Целью является оценка эффективности оксидов титана и цинка в качестве фотокаталитических нейтрализаторов органических загрязнений.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- Разработать и изготовить макет эффективного проточного каталитического реактора.
- Провести исследование по фотокаталитической очистке воды от органических загрязнений.
- Изучить влияние солнечного излучения на электронные процессы на поверхности оксидов титана и цинка.

**Объект и предмет исследования.** В качестве объекта исследования выбраны структуры из оксидов титана и цинка.

Предметом исследования являются электронные процессы, происходящие на поверхности оксидов титана и цинка.

**Связь работы с приоритетными направлениями научных исследований и запросами реального сектора экономики.** Работа выполнена на кафедре микро- и нанoeлектроники и в Центре 4.11 Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники за время обучения в магистратуре.

**Основные положения диссертации, выносимые на защиту.** На защиту выносятся следующие основные положения:

1. Фотокаталитическая активность сформированных покрытий, оцененная по относительному уменьшению концентрации Родамина *B* на длине волны солнечного света 555 нм, составила 30 % для  $\text{TiO}_2$  и 38 % для  $\text{ZnO}$  при использовании УФ светодиода и 35 % для  $\text{TiO}_2$  и 43 % для  $\text{ZnO}$  при использовании ртутной лампы.
2. Зависимость коэффициента туннельной прозрачности при туннелировании электронов на поверхностные состояния от длины волны солнечного света, содержащая пики и спады, является нелинейной. Особенности коэффициента прохождения определяются интерференцией, проходящей и отраженной волн, волны надбарьерного прохождения и отраженной волны в условиях сложного рельефа потенциального барьера.

**Личный вклад соискателя.** Все основные результаты и выводы получены соискателем самостоятельно. Во время работы над диссертацией соискателем были изучены математические модели расчета электронных процессов, разработан и изготовлен корпус каталитического реактора, проведены практические исследования электронных процессов. Разработка, моделирование и практические исследования проводились совместно с научным руководителем, кандидатом физико-математических наук, доцентом Данилюком А. Л.

**Апробация результатов диссертации.** Результаты исследований, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались на научных конференциях: 26-й международной научно-практической конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика конденсированного состояния», 54-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов БГУИР, а также опубликованы в виде соответствующих тезисов и материалов конференций.

**Публикации.** Основные положения работы и результаты диссертации изложены в 1 опубликованной работе.

**Структура и объем диссертации.** Диссертационная работа состоит из титульного листа, общей характеристики работы, введения, четырех глав, заключения, списка использованных источников из 44 наименований, графического материала. Полный объем диссертации составляет 57 страниц, в том числе 29 рисунков.

## КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В **первой главе** рассмотрены энергетические диаграммы гетеропереходов с оксидами титана и кремнием.

Во **второй главе** описаны каталитические свойства гетероструктур на основе оксидов титана и цинка.

В **третьей главе** представлено описание каталитического реактора, лабораторной установки, а также методика проведения исследований и их результаты.

В **четвертой главе** рассмотрена методика моделирования электронных процессов на поверхности оксидов титана и цинка, облучаемых солнечным светом.

В **пятой главе** рассмотрены результаты практических исследований и результаты моделирования различных электронных процессов.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан и изготовлен каталитический реактор, проведено практическое исследование по очистке воды от органических загрязнений. Созданная лабораторная установка для фотокаталитической очистки воды от органических загрязнений в проточном реакторе обеспечивает эффективное тестирование в реальном масштабе времени фотокатализаторов, иммобилизованных на твердых подложках. Для инициирования фотокатализа предусмотрена возможность использования источников излучения как УФ, так и видимого диапазонов длин волн. Отбор проб в процессе очистки позволяет регистрировать кинетику очистки воды различными фотокаталитическими материалами и сравнивать их эффективность.

Рассчитаны токи короткого замыкания, напряжение холостого хода в условиях солнечного облучения. Проведено моделирование режимов холостого хода и короткого замыкания. Установлено, что напряжение холостого хода может быть повышен за счет увеличения соотношения фототока к току насыщения.

Проведено моделирование процессов рекомбинации и токопереноса неравновесных носителей заряда в гетеронаноструктурах кремний/оксид титана. Определены условия эффективного разделения неравновесных электронов и дырок в них. Показано, что эффективность разделения неравновесных носителей заряда, генерированных солнечным светом в оксиде титана, определяется в основном толщиной пленки оксида титана концентрацией неравновесных носителей заряда, генерируемых светом, концентрацией дефектов, ее оптимальная величина обуславливается характерными временами жизни неравновесных носителей заряда и длинами их диффузии относительно процессов рекомбинации.

Исследованы механизмы электронно-дырочных, каталитических процессов и реакций на поверхности оксидов титана и меди, стимулированных электромагнитным излучением.

С помощью модифицированной модели на основе метода фазовых функций были проведены расчеты туннельных переходов электронов на поверхностные центры, образованные органическими комплексами. Показано, что изменение формы потенциального барьера на поверхности гетеропереходов кремний/оксида титана, содержащей органические комплексы, приводит к немонотонной зависимости коэффициента прохождения электронов на поверхностные центры от энергии, характеризуемой спадом в области относительно высоких энергий, выше уровня Ферми.

## **СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА**

[1-А] Установка для фотокаталитической очистки воды от органических загрязнений в проточном реакторе / А.В. Баглов, А.А. Родионов, Е.Б. Чубенко, В.А. Зайцев, В.Е. Борисенко // ФКС XXVI: Доклады БГУИР 2018 №4 (114) – С. 45–50.