

## СПЕКТРАЛЬНО-ЗАРЯДОВЫЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ДИОКСИД ТИТАНА/КРЕМНИЙ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ СОЛНЕЧНЫМ СВЕТОМ

А. А. Кураптова\*, А. Л. Данилюк

УДК 539.143.5

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Беларусь; e-mail: anku21qwerty@gmail.com

(Поступила 23 марта 2023)

С помощью компьютерного моделирования исследованы спектрально-зарядовые свойства гетероструктуры пленки диоксида титана ( $\text{TiO}_2$ )  $n$ -типа проводимости толщиной 100 нм на кремниевой подложке  $p$ -типа проводимости в диапазоне 300—1200 нм солнечного излучения. Учтено наличие ловушечных состояний в пленке  $\text{TiO}_2$ , способствующих локализации носителей заряда. Моделирование проводилось с использованием модели Андерсона для полупроводниковых гетеропереходов, решения уравнения Пуассона, уравнений непрерывности для электронов и дырок и уравнений Максвелла для электромагнитных волн в программном пакете Comsol Multiphysics. Рассчитаны распределение скоростей генерации и концентрации носителей заряда в гетероструктуре, распределение плотности заряда и электрического потенциала от длины волны  $\lambda$  падающего на пленку  $\text{TiO}_2$  солнечного излучения, а также от энергии ловушечных состояний  $E_t$ , которая задавалась внутри запрещенной зоны, считая от дна зоны проводимости. Интегральная плотность солнечного излучения  $1 \text{ кВт/м}^2$  принималась одинаковой для всех длин волн. Выявлены немонотонные зависимости скорости генерации носителей заряда в  $\text{TiO}_2$  в области  $\lambda = 325\text{—}375 \text{ нм}$ . Установлено, что для относительно мелких ловушек ( $E_t = 0.2\text{—}0.3 \text{ эВ}$ ) в объеме пленки  $\text{TiO}_2$  формируется положительный заряд с плотностью  $1.6 \text{ мКл/см}^3$ , слабо зависящий от длины волны. С ростом энергии ловушек объемная плотность заряда в пленке  $\text{TiO}_2$  снижается и меняет знак, достигая  $-3.4 \text{ мКл/см}^3$  при  $E_t = 0.8 \text{ эВ}$  и  $\lambda = 900 \text{ нм}$ . Плотность поверхностного заряда на пленке  $\text{TiO}_2$  отрицательная, ее величина возрастает с ростом энергии ловушек  $E_t$  и длины волны излучения, достигая  $-2.8 \cdot 10^{-4} \text{ мКл/см}^2$  при  $E_t = 0.8 \text{ эВ}$  и  $\lambda = 900 \text{ нм}$ . Полученные результаты объясняются взаимосвязью процессов интерференции в  $\text{TiO}_2$  падающей и отраженной от границы раздела волн, разделением генерированных солнечным светом носителей заряда на этой границе, а также локализацией электронов на поверхностных состояниях  $\text{TiO}_2$ .

**Ключевые слова:** диоксид титана, кремний, гетероструктура, солнечное излучение, зарядовые свойства, ловушки, моделирование.

The spectral-charge properties of the heterostructure of a 100-nm-thick  $n$ -type titanium dioxide ( $\text{TiO}_2$ ) film on a  $p$ -type silicon substrate in the solar radiation wavelength range of 300–1200 nm studied by computer simulation. The presence of trap states in the  $\text{TiO}_2$  film, which contribute to the localization of charge carriers, is taken into account. The simulation has been carried out using the Anderson model for semiconductor heterojunctions, the solution of the Poisson equation, the continuity equations for electrons and holes, and the Maxwell equations for electromagnetic waves in the Comsol Multiphysics software package. We have calculated the distribution of the generation rates and concentration of charge carriers in the heterostructure, the distribution of charge density and electric potential on the wavelength  $\lambda$  of solar radiation incident on the  $\text{TiO}_2$  film, and also on the energy of trap states  $E_t$ , which has been set inside the band gap, counting from the bottom of the conduction band. The integral density of solar radiation  $1 \text{ kW/m}^2$  is assumed to be the same for all wavelengths. Nonmonotonic dependences of the generation rate of charge carriers in  $\text{TiO}_2$  in the wavelength range  $\lambda = 325\text{--}375 \text{ nm}$  are revealed. It has been established that for relatively shal-

---

## SPECTRAL-CHARGE PROPERTIES OF A TITANIUM DIOXIDE/SILICON HETEROSTRUCTURE UNDER SUNLIGHT

H. A. Kuraptova\*, A. L. Danilyuk (Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus; e-mail: anku21qwerty@gmail.com)

---

*low traps ( $E_t = 0.2\text{--}0.3$  eV) a positive charge with the density of  $1.6$  mC/cm<sup>3</sup> is formed in the volume of a TiO<sub>2</sub> film, which weakly depends on the radiation wavelength  $\lambda$ . As the trap energy increases, the volume charge density in the TiO<sub>2</sub> film decreases and changes sign, reaching  $-3.4$  mC/cm<sup>3</sup> at  $E_t = 0.8$  eV and  $\lambda = 900$  nm. The surface charge density on the titanium dioxide film is negative, its value increases with increasing the trap energy  $E_t$  and the radiation wavelength  $\lambda$ , reaching  $-2.8 \cdot 10^{-4}$   $\mu\text{C}/\text{cm}^2$  at  $E_t = 0.8$  eV and  $\lambda = 900$  nm. We explain the results obtained by the interrelation between the interference processes in TiO<sub>2</sub> of the incident and reflected waves from the interface, the separation of charge carriers generated by sunlight at this interface, and also by the localization of electrons on the surface states of TiO<sub>2</sub>.*

**Keywords:** titanium dioxide, silicon, heterostructure, solar radiation, charge properties, traps, modeling.