

СПЕКТРАЛЬНО-ЗАРЯДОВЫЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ПЛЕНКА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК / КРЕМНИЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ИНФРАКРАСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.А. Курапцова, А.Л. Данилюк

*Учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники», Минск, Беларусь*

Аннотация. В работе путем компьютерного моделирования в программном пакете Comsol Multiphysics исследуются спектрально-зарядовые свойства гетероструктуры пленка одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) *n*-типа проводимости на кремниевой подложке *n*-типа проводимости в диапазоне толщин пленки ОУНТ d от 10 до 50 нм в условиях падающего на пленку излучения длиной волны 750 нм с плотность мощности 1 кВт/м². Учтено наличие ловушечных состояний в объеме слоя SiO₂ на поверхности кремниевой пластины. Было рассчитано распределение скоростей генерации и концентрации носителей заряда в гетероструктуре, зависимости плотности заряда σ и электрического потенциала V_s на поверхности пленки ОУНТ от энергии E_i ловушечных состояний на поверхности пленки и от толщины пленки d . Также было выявлено отличие в значениях V_s при отсутствии падающего на гетероструктуру излучения и при его наличии, наибольшее различие обнаружено для толщины пленки $d = 20$ нм и энергии $E_i = 0,1$ эВ. Полученные результаты способствуют разработке детекторов ИК-излучения.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки; пленка; кремний; оксид кремния; гетероструктура; инфракрасное излучение; зарядовые свойства; ловушки; моделирование; детектор.

SPECTRAL-CHARGE PROPERTIES OF CARBON NANOTUBE FILM/SILICON HETEROSTRUCTURE UNDER INFRARED RADIATION

H.A.Kuraptsova, A.L.Danilyuk

*Educational Institution "Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics",
Minsk, Belarus*

Abstract. In this work, the spectral and charge properties of a heterostructure film of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) of n -type conductivity on a silicon substrate of n -type conductivity are investigated by means of computer modeling in the Comsol Multiphysics software package in the range of SWCNT film thicknesses d from 10 to 50 nm under radiation on the film with a wavelength of 750 nm and a power density of 1 kW/m². The presence of trap states in the bulk of the SiO₂ layer on the surface of the silicon wafer is taken into account. The distribution of the generation rates and concentration of charge carriers in the heterostructure, the dependences of the charge density σ and the electric potential V_s on the surface of the SWCNT film on the energy E_t of trap states on the film surface and on the film thickness d were calculated. A difference in the V_s values was also revealed in the absence of radiation incident on the heterostructure and in its presence: the greatest difference was found for a film thickness $d=20$ nm and energy $E_t=0.1$ eV. The results obtained will contribute to the development of IR radiation detectors.

Keywords: carbon nanotubes; film; silicon; silicon oxide; heterostructure; infrared radiation; charge properties; traps; modeling; detector.

Введение

Среди потенциальных применений гетероструктур на основе углеродных композитов в различных областях электроники следует особо отметить их перспективность в оптоэлектронике. Углеродные наноматериалы представляют широкий класс соединений: графен, фуллерены, нанотрубки, нановолокна и другие. Одной из перспективной макроструктур являются пленки углеродных нанотрубок [1]. Это связано с рядом их отличительных особенностей, таких как низкое удельное сопротивление, высокая прозрачность в видимом и ближнем ИК-диапазоне, возможность гибкой настройки свойств материала за счет изменения параметров роста или химического легирования, стабильность при температурах, значительно превышающих комнатную, прямая запрещенная зона [3]. Пленка одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) состоит из переплетенных нанотрубок, каждая из которых характеризуется своими свойствами, такими как диаметр, длина, хиральность и т.д. Однако пленку ОУНТ можно рассматривать, как целостный объект, что упрощает интерпретацию данных [1]. Перспективной для оптоэлектроники является гетероструктура пленка ОУНТ/кремний, зарядовые свойства которой рассматриваются в данной работе. В работах последнего десятилетия продемонстрирована перспективность использования гетеропереходов ОУНТ/кремний в качестве солнечных элементов для преобразования энергии, а также эффективных сверхбыстрых широкополосных фотодетекторов [2].

На поверхности пленки ОУНТ в процессе формирования возникают различные ловушки носителей заряда. В основном они вызваны адсорбцией ионов кислорода O⁺, что обеспечивает n -тип проводимости ОУНТ [1,3].

Основная часть

Моделирование проводилось в программном пакете Comsol Multyphysics на основании модели Андерсона для полупроводниковых гетеропереходов, решения уравнения Пуассона, уравнений непрерывности для электронов и дырок и уравнений Максвелла для электромагнитных волн. В данной работе рассматривается

гетероструктура пленка ОУНТ на кремнии. Целью данной работы является моделирование зарядовых свойств гетероструктуры пленка ОУНТ толщиной d от 10 нм до 50 нм на кремниевой подложке толщиной 2 мкм. В процессе формирования пленки ОУНТ на кремнии образуется тонкий слой оксида кремния SiO_2 , в исследуемой модели толщина слоя SiO_2 составляла 2 нм.

Для ОУНТ, кремния и оксида кремния задавался комплексный показатель преломления, его действительная n и мнимая k части [4,5,6]. Для кремния $n=3,717$ и $k=0,008$, для пленки ОУНТ $n=1,59697$ и $k=0,49209$, для оксида кремния $n=1,46$ и $k=0,0019$.

На поверхности ОУНТ также были заданы ловушечные состояния донорного типа плотностью 10^{12} см^{-2} и с энергией E_t от 0 до 0,1 эВ считая от дна зоны проводимости [1], в объеме SiO_2 были заданы ловушечные состояния донорного типа плотностью 10^{12} см^{-3} и энергией 0,34 эВ считая от дна зоны проводимости [7]. Вероятность захвата носителей заряда ловушками на поверхности пленки ОУНТ и в объеме SiO_2 задавалась через среднее эффективное значение сечения захвата, $1,913 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2$ и $2,838 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2$ соответственно [8].

Плотность мощности излучения равна 1 кВт/м^2 , длина волны падающего на гетероструктуру излучения 750 нм, температура 300 К. Используемые при моделировании параметры материалов представлены в таблице.

Таблица 1. Свойства материалов
Table 1. Materials properties

	$n\text{-Si}$	SiO_2	$n\text{-ОУНТ}$
Ширина запрещенной зоны, эВ	1.124	9	0.6
Сродство к электрону, эВ	4.05	0.75	4.2
Относительная диэлектрическая проницаемость	11.7	3.9	4.75
Время жизни электронов, мкс	10	0.012	0.0004
Время жизни дырок, мкс	10	0.012	0.0004
Концентрация примеси, см^{-3}	10^{16}	-	10^{18}
Подвижность электронов, $\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	1450	21	56
Подвижность дырок, $\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	500	0.0001	56

Под воздействием излучения наблюдалась генерация носителей заряда в гетероструктуре. При толщине пленки ОУНТ $d=50$ нм на поверхности пленки скорость генерации носителей заряда на поверхности пленки составила $4,42 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$, в кремниевой подложке на границе разделения с пленкой ОУНТ составляла $7,9 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$. С уменьшением толщины пленки d до 10 нм скорость генерации носителей заряда на поверхности пленки монотонно уменьшалась до $2,21 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ и увеличивалась до $1,16 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$, соответственно.

Поверхностная плотность электрического заряда σ на пленке ОУНТ не зависит от наличия падающего излучения или его отсутствия, но монотонно убывает от значения $\sigma=2,05 \cdot 10^{-2} \text{ мкКл/см}^2$ до $1,09 \cdot 10^{-3} \text{ мкКл/см}^2$ при росте энергии E_t от 0 В до 0,1 В.

Зависимости электрического потенциала V_s на поверхности пленки от энергии ловушечных состояний и от толщины d пленки в условиях наличия падающего излучения и при его отсутствии представлены на рис. 1, a и b , соответственно.

Из рис. 1, a видно, что потенциал V_s монотонно убывает с ростом энергии ловушек E_t при всех толщинах d пленки ОУНТ. Из рис. 1, b видно, что максимум электрического потенциала V_s приходится на толщину пленки $d=20$ нм. Максимальное различие электрического потенциала V_s при отсутствии падающего излучения и при его наличии равно 33,5 мВ выявлено для толщины пленки $d=20$ нм и для энергии $E_t=0,1$ эВ. При наличии излучения $V_s=52,2$ мВ, а при его отсутствии $V_s=85,7$ мВ.

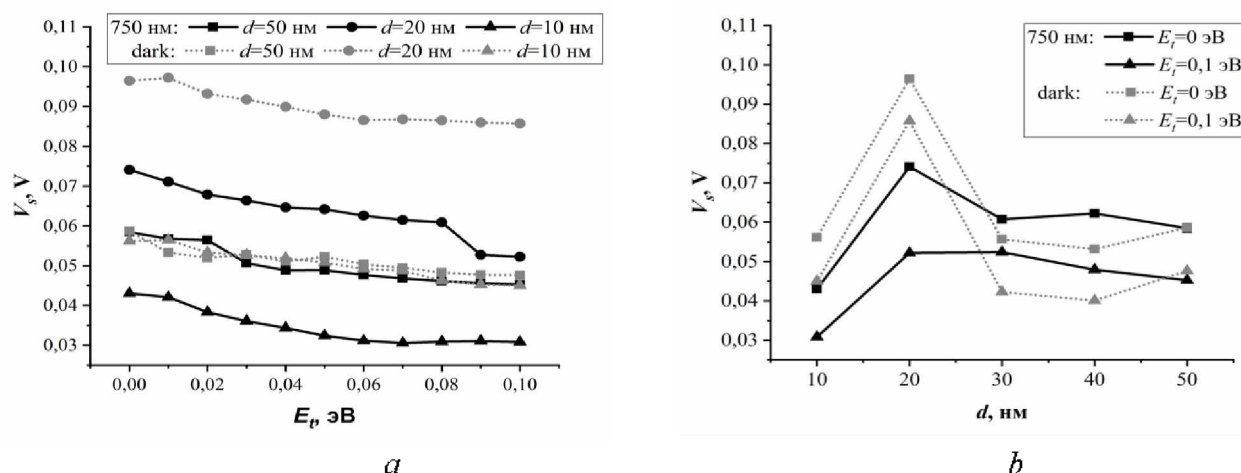


Рис. 1. Электрический потенциал V_s на поверхности пленки ОУНТ при наличии излучения и при его отсутствии (dark): а – от энергии E_i для различных толщин пленки d ; б – от толщины пленки d для различных значений энергии E_i

Fig. 1. Electric potential V_s on the surface of the SWCNT film in the presence and absence of radiation (dark): а – from energy E_i for different film thicknesses d ; б – from film thickness d for different values of energy E_i

Для объяснения полученных результатов были построены энергетические диаграммы гетероструктур по оси перпендикулярной поверхности пленки ОУНТ. При энергии ловушек $E_t=0,1$ эВ максимальное значение разрыва дна зоны проводимости в кремнии и пленке ОУНТ приходится на толщину пленки $d=20$ нм и равняется 0,16047 эВ в условиях наличия излучения и 0,169 эВ в условиях его отсутствия. При других толщинах пленки d данный разрыв составил 0,15578–0,16042 эВ и 0,158–0,167 эВ при наличии и отсутствии излучения. Плотность пространственного заряда в пленке ОУНТ вблизи границы раздела Si/ОУНТ также оказалась максимальной при $d=20$ нм и составляла 47 и 26,2 мКл/см³, соответственно.

Заключение

Результаты проведенного моделирования гетероструктуры продемонстрировали, что уменьшение толщины пленки d до 20 нм и использование пленки ОУНТ с высокой энергией ловушечных состояний на поверхности дает возможность выявить наличие падающего на гетероструктуру пленка ОУНТ/кремний излучения длиной волны 750 нм за счет различия в значении электрического потенциала на поверхности пленки ОУНТ, что может быть использовано при разработке детекторов ИК излучения с контролируемой концентрацией ловушек.

Список использованных источников

1. Kumar R., Khan M.A., Anupama A.V., Krupanidhi S.B., Sahoo B. (2021) Infrared photodetectors based on multiwalled carbon nanotubes: Insights into the effect of nitrogen doping. *Applied Surface Science*. 538. 148187-148197.
2. Hu X., Hou P., Liu C., Cheng H. (2019) Carbon nanotube/silicon heterojunctions for photovoltaic applications. *Nano Materials Science*. 1(3), 156–172.
3. Algharagholy L.A. (2019) Defects in carbon nanotubes and their impact on the electronic transport properties. *Journal of Electronic Materials*. 48(4), 2301–2306.
4. Green M. A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300K including temperature coefficients. (2008) *Solar Energy Materials & Solar Cells*. 92. 1305-1310.
5. Ermolaev G.A., Tsapenko A.P., Volkov V.S., Anisimov A.S., Gladush Y.G., Nasibulin A.G. (2020) Express determination of thickness and dielectric function of single-walled carbon nanotube films. *Applied Physics Letters*. 116. 231103-231107.

6. Rodriguez-de Marcos L. V., Larruquert J. I., Méndez J. A., Aznárez J. A. (2016) Self-consistent optical constants of SiO₂ and Ta₁₅ films. *Optical Materials Express*. 6(11), 3622-3637.
7. Дементьев П. А., Иванова Е. В., Заморянская М. В. (2019) Ловушки в нанокompозитном слое кремний-диоксид кремния и их влияние на люминесцентные свойства. *Физика твердого тела*. 61(8). 1448-1454.
8. Поклонский Н. А., Горбачук Н. И., Сягло А. И., Шпаковский С. В. (2009) *Исследование переходных процессов в полупроводниковых структурах : пособие*. Минск. БГУ.

References

1. Kumar R., Khan M.A., Anupama A.V., Krupanidhi S.B., Sahoo B. (2021) Infrared photodetectors based on multiwalled carbon nanotubes: Insights into the effect of nitrogen doping. *Applied Surface Science*. 538. 148187-148197.
2. Hu X., Hou P., Liu C., Cheng H. (2019) Carbon nanotube/silicon heterojunctions for photovoltaic applications. *Nano Materials Science*. 1(3). 156-172.
3. Algharagholy L.A. (2019) Defects in carbon nanotubes and their impact on the electronic transport properties. *Journal of Electronic Materials*. 48(4), 2301-2306.
4. Green M. A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300K including temperature coefficients. (2008) *Solar Energy Materials & Solar Cells*. 92. 1305-1310.
5. Ermolaev G.A., Tsapenko A.P., Volkov V.S., Anisimov A.S., Gladush Y.G., Nasibulin A.G. (2020) Express determination of thickness and dielectric function of single-walled carbon nanotube films. *Applied Physics Letters*. 116. 231103-231107.
6. Rodriguez-de Marcos L. V., Larruquert J. I., Méndez J. A., Aznárez J. A. (2008) Self-consistent optical constants of SiO₂ and Ta₁₅ films. *Optical Materials Express*. 6(11), 3622-3637.
7. Dement'ev, P. A.; Ivanova, E. V., Zamoryanskaya, M. V. (2019) Traps in the Nanocomposite Layer of Silicon-Silicon Dioxide and Their Effect on the Luminescent Properties. *Physics of the Solid State*. 61(8), 1394-1400.
8. Poklonskij N. A., Gorbachuk N. I., Sjaglo A. I., Shpakovskij S. V. (2009) *Study of transient processes in semiconductor structures: manual*. Minsk. BSU (in Russian).

Сведения об авторах

Кураптова А.А., младший научный сотрудник, учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники». anku21qwerty@gmail.com.
Данилюк А.Л., кандидат физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник, учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники». danilyuk@bsuir.by.

Information about the authors

Kuraptova A.A., junior researcher, Educational Institution "Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics". anku21qwerty@gmail.com.
Danilyuk A.L., PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor, Leading Researcher, Educational Institution "Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics". danilyuk@bsuir.by.