

ИНДУЦИРОВАННАЯ ИЗЛУЧЕНИЕМ СПИНОВАЯ ИНЖЕКЦИЯ НА ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ДИОКСИДА ТИТАНА

Т.Н. Сидорова

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. П. Бровка 6, 220013 Минск, Беларусь, sharsu_antea@bk.ru

Представлены результаты моделирования спиновой инжекции при спин-зависимом туннелировании электронов на поверхностные состояния диоксида титана, образованные адсорбированными органическими соединениями. 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. Были рассмотрены два вида потенциального рельефа: одиночный потенциальный барьер и два потенциальных барьера, разделенных квантовой ямой. Показано, что величина спиновой поляризации электронов на поверхностных состояниях составляет 10-20 %, что может способствовать реализации процессов спинового катализа для увеличения эффективности разложения органических соединений на поверхности диоксида титана.

Ключевые слова: спин-зависимое туннелирование; коэффициент туннельной прозрачности; диоксид титана; поверхностные состояния.

SPIN INJECTION TO THE SURFACE STATES OF THE TITANIUM DIOXIDE INDUCED BY THE RADIATION

Tatyana Sidorova

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,
6 P. Brouki Str., 220013 Minsk, Belarus, sharsu_antea@bk.ru

Results of the simulation of the spin-injection at the spin-dependant tunneling of electrons to the surface states of the titanium dioxide, which are created by adsorbed organic impurities are performed. Tunneling transparency for sunlight generated electrons is calculated by the model created based on the Phase function method. A ferromagnetic film is considered to be an injector of spin-dependent electrons to the titanium dioxide. Two forms of the potential relief were taken into account. It is shown that electron spin polarization at the surface states for the barrier of the first type reaches up to 5 %. For the relief of the second type for the narrow potential well dependence of the degree of electron polarization from the applied potential has the linear character. The quantity in this case can reach 20%. For the wide potential well a saturation area in such dependences is found. It can contribute to the spin enhanced catalysis for the growth of the decomposition efficiency organic impurities on the surface of the titanium dioxide.

Keywords: spin-dependent tunneling; the tunneling transparency; titanium dioxide; surface states.

Введение

Последнее время комбинированные структуры, имеющие в своем составе диоксид титана (TiO_2), вызывают широкий интерес для фотокаталитических применений [1]. Фотокаталитические свойства TiO_2 [2, 3] обусловлены эффективной генерацией на его поверхности химических радикалов в процессе взаимодействия адсорбированных молекул воды и кислорода с фотовозбужденными электронами и дырками, которые участвуют в окислительно-восстановительных реакциях [4] и способствуют разложению органических загрязнений. В спектре солнечного света

доля излучения, способствующая генерации электронно-дырочных пар в TiO_2 не превышает 7 % [5]. В настоящее время ведется активный поиск путей создания структур на основе TiO_2 , обладающих фотокаталитической активностью в видимой части спектра солнечного излучения. Одним из них является использование гетероструктур из TiO_2 и полупроводника с меньшей шириной запрещенной зоны, в частности кремния (Si). Наряду с этим перспективным направлением является спиновый катализ [6], использующий стимулирование химических реакций за счет изменения спина реагирующих хи-

мических компонентов. В процессах спинового катализа снимаются спиновые запреты и открываются каналы химической реакции, закрытые по спине. В рассматриваемом случае для возникновения спинового фотокатализа на поверхности TiO_2 необходимо обеспечить спиновую инжекцию электронов, генерированных в кремнии. В данной работе такая спиновая инжекция рассматривается в гетероструктуре оксид титана /ферромагнетик /кремний.

Модель

Рассмотрим процессы, происходящие в гетероструктуре TiO_2 /ферромагнетик (ФМ)/Si. Поскольку в гетероструктуре Si/ TiO_2 , облучаемой поляризованным солнечным светом, степень спиновой поляризации носителей заряда не высока, то нами в качестве источника спин-поляризованных электронов между Si и TiO_2 применяется металлический спиновый инжектор (CoFe или Co), который может обеспечить необходимую величину спиновой поляризации. Потенциальная диаграмма такой структуры приведена в работе [7]. Дырки, сгенерированные в кремнии, отталкиваются от потенциального барьера на границе со спиновым инжектором и рекомбинируют с электронами в кремнии. Электроны, генерируемые в кремнии, ввиду отсутствия потенциального барьера на границе со спиновым инжектором переходят в него. Далее электроны, приобретая определенную спиновую поляризацию, переходят в TiO_2 и далее туннелируют на его поверхностные состояния. Потенциальный рельеф поверхности TiO_2 , обусловленный поверхностными состояниями, образованными адсорбированными на поверхности TiO_2 химическими компонентами, имеет достаточно сложную форму. Потенциальный рельеф включает локальные энергетические максимумы и минимумы, обусловленные поверхностными состояниями. Прохождение электронов на поверхностные состояния происходит путем их туннелирования из объема TiO_2 . Спиновая

инжекция осуществляется за счет их поляризации в ФМ. Для расчетов коэффициента туннельной прозрачности потенциальных барьеров нами разработана модель на основе метода фазовых функций (МФФ) [8].

Согласно методу фазовых функций [8], уравнение для функции отражения $B(x)$ от потенциального барьера имеет вид:

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

с граничным условием $B_{\uparrow\downarrow}(x \rightarrow +\infty) = 0$,

где $k_{\uparrow\downarrow} = \sqrt{2m_{\uparrow\downarrow}^*(E \pm h_0\sigma)/\hbar^2}$ - волновой вектор туннелирующих электронов, σ - индекс спина (спин-вверх и спин-вниз); h_0 - молекулярное поле в ферромагнетике, 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:

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

Коэффициент туннельного прохождения через барьер равен:

$$D_{\uparrow\downarrow} = \exp\left[\frac{1}{k_{\uparrow\downarrow}} \int_a^b U_{eff}(x) [b_{\uparrow\downarrow}(x)\cos(2k_{\uparrow\downarrow}x) - a_{\uparrow\downarrow}(x)\sin(2k_{\uparrow\downarrow}x)] dx\right] \quad (4)$$

В уравнениях (1)-(4) d - ширина туннельного барьера, x - координата направления туннелирования, m^* и E - эффективная масса и энергия туннелирующего электрона, \hbar - постоянная Планка.

Система уравнений (2)-(4) 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:

$$\chi = \frac{|D_{\uparrow} - D_{\downarrow}|}{D_{\uparrow} + D_{\downarrow}} \quad (5)$$

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

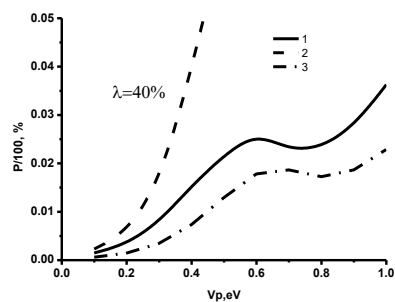
Результаты и их обсуждение

В соответствии с предложенной моделью рассчитаны коэффициенты туннельной прозрачности для электронов, генерируемых солнечным светом в Si и туннелирующих на поверхностные состояния TiO_2 , образованные адсорбированными органическими соединениями. Рассмотрены потенциальные барьеры различного вида, в том числе содержащие квантовые ямы [7].

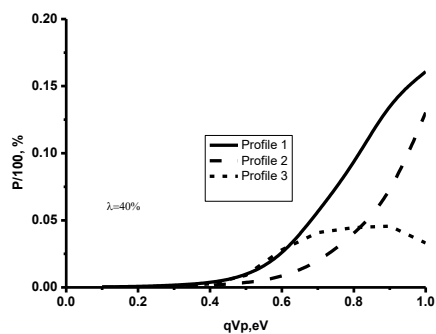
На рис. 1а приведены результаты расчетов зависимости степени спиновой поляризации электронов на поверхностных состояниях от потенциала, создаваемого внешним полем на поверхности диоксида титана V_p для уровня спиновой поляризации электронов $\lambda=40\%$, инжектированных в диоксид титана из ферромагнетика, для потенциальных рельефов не содержащих квантовых ям. Из полученных результатов следует, что чем меньше ширина барьера и соответственно больше вероятность туннелирования, то и выше степень спиновой поляризации на поверхностных состояниях. Для более широких барьеров, характеризующихся пологим передним фронтом, степень спиновой поляризации меньше и выходит на насыщение.

Расчет спиновой поляризации для потенциального рельефа, содержащего квантовую яму, рис. 1б, при изменении ширины ямы, показал следующее. В случае узкой квантовой ямы наблюдается первоначальный порог и дальнейший резкий рост степени поляризации до 20 %, рис. 1б (кривые 1, 2).

При увеличении ширины потенциальной ямы возникает область насыщения спиновой поляризации (рис. 1б, кривая 3): при росте qV_p до 0.7эВ степень поляризации возрастает, после чего остается неиз-



а(а)



б(б)

Рис. 1. Степень спиновой поляризации электронов P на поверхности TiO_2 в зависимости от потенциала V_p для начальной спиновой поляризации $\lambda=40\%$ для потенциального рельефа, не содержащего (а) и содержащего квантовую яму (б)

Fig. 1. Degree of spin-polarization P at the TiO_2 surface depending on the potential V_p and initial spin polarization equal to $\lambda=40\%$ for the potential relief without (a) and with (b) potential well

менной. Когда $qV_p = 0.9$ эВ степень поляризации начинает постепенно снижаться.

Закключение

Была рассмотрена взаимосвязь степени спиновой поляризации электронов на поверхностных состояниях в гетероструктуре TiO_2 /ферромагнетик (ФМ)/Si при облучении солнечным светом от потенциала, обусловленного внешним электрическим полем на поверхности TiO_2 для потенциальных рельефов, представляющих собой один потенциальный барьер и два потенциальных барьера, разделенных квантовой ямой. В первом случае с увеличением внешнего потенциала степень спиновой поляризации изменяется почти линейно. Во втором случае для относительно узкой ямы зависимость степени поляризации электронов от приложенного потенциала имеет сверхлинейный характер, а ее вели-

чина достигает 20 %. Однако для широкой потенциальной ямы меняется характер зависимостей и возникает область насыщения. При этом величина степени спиновой поляризации не превышает 7.5 %. Такое поведение объясняется селективностью резонансного прохождения спин-зависимых электронов через дискретные уровни в квантовой яме и интерференцией электронных волн, отраженных от второго барьера. Установленные взаимосвязи позволяют конструировать фотокаталитические покрытия на основе Si/ФМ/TiO₂ гетероструктур с высокой эффективностью.

Библиографические ссылки

1. Константинова Е. А. Наноматериалы на основе диоксида титана с высокой фотокаталитической активностью. *Российские нанотехнологии* 2019; 14: 3-10.
2. Barrera M. Antireflecting – passivating dielectric films on crystalline silicon solar cells for space applications. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* 2008; 92(9): 1115-1122.
3. Soga T. Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion. Amsterdam, 2006. P. 200-216.
4. Linsebigler A.T. Photocatalysis on TiO₂ Surfaces: Principles, Mechanisms, and Selected Results. *Chemical Reviews* 1995; 95(3): 735-758.
5. Sharma B.L. Semiconductor Heterojunctions. Oxford, 1974. 224 p.
6. Buchachenko A.L., Berdinsky V.L. Spin catalysis as a new type of catalysis in chemistry. *Russian Chemical Reviews* 2004; 73(11): 1033-1039.
7. Сидорова Т.Н., Данилюк А.Л., Борисенко В.Е. Спин-зависимое туннелирование на поверхностные состояния диоксида титана. *Доклады Национальной академии наук Беларуси*, 2020; 64(4): 391–398.
8. Бабилов В.В., Метод фазовых функций в квантовой механике. Москва; 1976. 224 с.

References

1. Konstantinova E.A. Nanomaterialy na osnove dioksida titana s vysokoy fotokataliticheskoy aktivnost'yu. *Rossiyskie nanotekhnologii* 2019; 14: 3-10. (In Russian)
2. Barrera M. Antireflecting – passivating dielectric films on crystalline silicon solar cells for space applications. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* 2008; 92(9): 1115-1122.
3. Soga T. Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion. Amsterdam, 2006. P. 200-216.
4. Linsebigler A.T. Photocatalysis on TiO₂ Surfaces: Principles, Mechanisms, and Selected Results. *Chemical Reviews* 1995; 95(3): 735-758.
5. Sharma B.L. Semiconductor Heterojunctions. Oxford, 1974. 224 p.
6. Buchachenko A.L., Berdinsky V.L. Spin catalysis as a new type of catalysis in chemistry. *Russian Chemical Reviews* 2004; 73(11): 1033-1039.
7. Sidorova T.N., Danilyuk A.L., Borisenko V.E. Spin-zavisimoe tunnelirovanie na poverkhnostnye sostoyaniya dioksida titana. *Doklady Natsional'noy akademii nauk Belarusi*, 2020; 64(4): 391-398. (In Russian)
8. Babikov V.V., Metod fazovykh funktsiy v kvantovoy mekhanike. Moskva; 1976. 224 p. (In Russian)