

ТОКОПЕРЕНОС ПО ЛОВУШЕЧНЫМ СОСТОЯНИЯМ В ОКСИДЕ МОЛИБДЕНА

Курапцова А.А.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Данилюк А.Л. – канд. физ.-мат. наук, доцент

В данной работе рассмотрен токоперенос по ловушечным состояниям в оксиде молибдена. Приведены результаты моделирования протекания туннельного тока посредством туннелирования между ловушками в оксиде молибдена в зависимости от концентрации ловушек, их энергии и напряженности электрического поля.

В настоящее время возрастает интерес к гетероструктурной фотовольтаике. Оксид молибдена MoO_3 с широкой запрещенной зоной и относительно высокой работой выхода, 3,0-3,3 эВ и 6,2-6,7 эВ соответственно [1], благодаря своей невысокой стоимости и химической стабильности является перспективным полупроводником для применения в перезаряжаемых батареях, конденсаторах, газовых сенсорах, а также в солнечных элементах и устройствах фотокатализа благодаря слабому поглощению электромагнитного излучения и способностью выступать в качестве селективного контакта для дырок, эффективно разделяя генерированные солнечным излучением носители заряда [2].

Оксид молибдена обладает относительно высокой проводимостью благодаря неглубокому залеганию ловушечных состояний и их высокой концентрации.

Вакансии кислорода в оксиде молибдена выступают в роли ловушек, ответственных за транспорт носителей заряда [3]. Наиболее стабильным ловушечным состоянием в оксиде молибдена являются кислородные вакансии. Глубина залегания ловушечных состояний в оксиде молибдена составляет 0,3 эВ ниже дна зоны проводимости и определяет его n-тип проводимости [1]. Концентрация ловушек определяется стехиометрическим составом соединения MoO_3 и составляет порядка 10^{19} см^{-3} .

Моделирование токопереноса по ловушкам проводилось с использованием модели фонон-облегченного туннелирования [4]:

$$J = eN^{2/3}\nu \quad (1),$$

где J – плотность туннельного тока; e – заряд электрона; N – концентрация ловушек; ν – частотный фактор.

Частотный фактор ν определяется как

$$\nu = \frac{\sqrt{2\pi\hbar}W_t}{m^*s^2\sqrt{(W_{opt}-W_t)kT}} \sinh\left(\frac{eFs}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{W_{opt}-W_t}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{2s\sqrt{2m^*W_t}}{\hbar}\right) \quad (2),$$

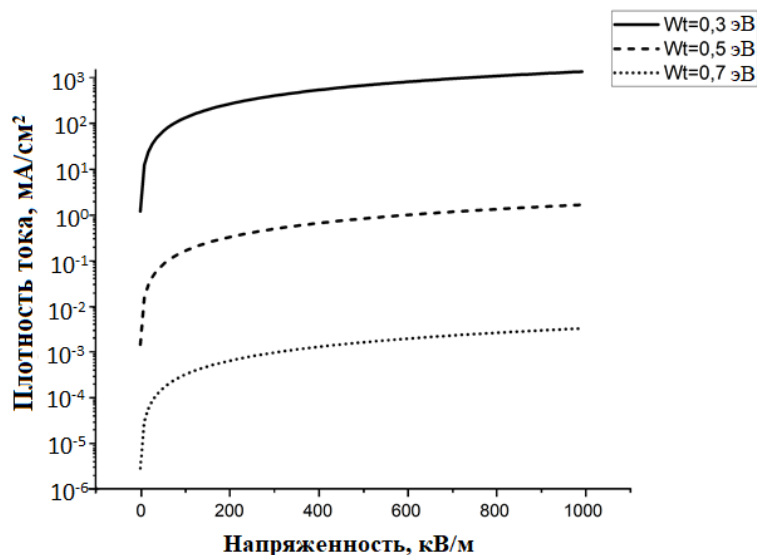
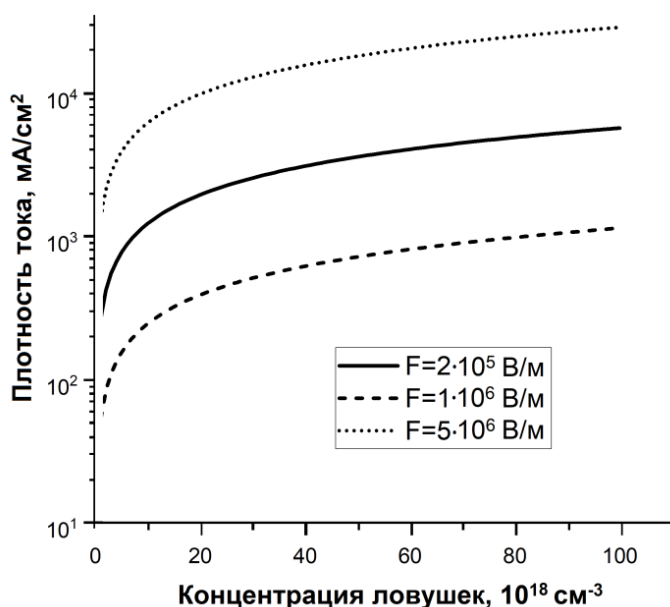
$$s = \left(\frac{3\pi N}{4}\right)^{1/3} \quad (3),$$

где W_t – термическая энергия ловушки, W_{opt} – оптическая энергия ловушки, \hbar - редуцированная постоянная Планка, m^* – эффективная масса носителя заряда (электрона или дырки), F – электрическое поле; s – среднее расстояние между ловушками.

Моделирование туннельного тока было проведено с использованием параметров: $T=300 \text{ K}$.

В результате моделирования были получены зависимости плотности туннельного тока от прикладываемого внешнего поля F при концентрации ловушек $N=10^{19} \text{ см}^{-3}$ для различных значений W_t (рисунок 1) и плотность туннельного тока от концентрации ловушек N (рисунок 2) для различных значений F .

Как можно видеть из полученных зависимостей увеличение глубины залегания ловушек в диапазоне от 0,3 эВ до 0,7 эВ приводит к значительному уменьшению плотности тока как показано на рисунке 1. Увеличение концентрации ловушек ведет к уменьшению расстояния между ними и, следовательно, нелинейному возрастанию тока, что можно видеть из рисунка 2. Также изменение напряженности поля в диапазоне от $2 \cdot 10^5 \text{ В/м}$ до $5 \cdot 10^6 \text{ В/м}$ ведет к нелинейному росту тока, не меняя характер его зависимости от концентрации ловушек.

Рисунок 1 –Зависимость плотности тока J от напряженности поля F Рисунок 2 –Зависимость плотности тока J от концентрации ловушек N

Полученные зависимости определяются высотой и шириной туннельного барьера между ловушками. Рост концентрации ловушек ведет к уменьшению ширины потенциального барьера, а увеличение их энергии – к росту высоты барьера. Данные параметры оказывают противоположное влияние на ток, что может быть использовано для осуществления выбора режима токопереноса.

Таким образом, благодаря возможности достижения высоких значений туннельного тока в оксиде молибдена, он может быть перспективным материалом для применения в устройствах фотокатализа и солнечных элементах за счет высокой концентрации ловушечных состояний и относительно небольшой глубине их залегания.

Список использованных источников:

1. Guo Yu. Origin of the high work function and high conductivity of MoO_3 / Yu. Guo and J. Robertson // *Applied Physics Letters*. – 2014. – Vol. 105, iss. 22. – P. 1-5.
2. Formation of intrinsic and silicon defects in MoO_3 under varied oxygen partial pressure and temperature conditions: an ab initio DFT investigation. / D. S. Lambert [et al.] // *RSC Advances*. – 2017. – Vol. 7, iss. 85. – P. 53810-53821.
3. Role of oxygen vacancy defects in the electrocatalytic activity of substoichiometric molybdenum oxide. / R. Kashfi-Sadabad [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry*. – 2018. – Vol. 122, iss. 32. – P. 18212-18222.
4. Механизм транспорта заряда в тонких пленках аморфного и сегнетоэлектрического $\text{Hf}_0.5\text{Zr}_0.5\text{O}_2$ / Д.Р.Исламов [и др.]. // *Письма в ЖЭТФ*. – 2015. – Т. 102, № 8. – С. 610–614.