

УДК 535.015, 53.06

## ЗАРЯДОВЫЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ПЛЕНКИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА КРЕМНИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ УЛЬТРАФИОЛЕТОМ

Курапцова А.А., Данилюк А.Л.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [anku21qwerty@gmail.com](mailto:anku21qwerty@gmail.com)

Аннотация: В работе путем компьютерного моделирования с помощью программного пакета Comsol Multiphysics исследуются зарядовые свойства гетероструктуры пленка одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) на кремнии в условиях падающего на гетероструктуру излучения длиной волны 300 нм. В результате моделирования были обнаружены зависимости поверхностной плотности электрического заряда  $\sigma$  и потенциала  $V_s$  от энергии  $E_i$  ловушечных состояний на поверхности пленки, монотонное уменьшение данных значений с ростом  $E_i$ , а также отличие в значениях данных величин в условиях наличия падающего излучения и его отсутствия. Наибольшая разница в значениях  $\sigma$  при наличии излучения и его отсутствии была обнаружена при  $E_i=0$  эВ и составила  $10^{-6}$  мкКл/см<sup>2</sup>. Различие в значениях  $V_s$  слабо отличалось для каждого значение энергии  $E_i$  и составляло примерно 47 мВ.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, кремний, гетероструктура, пленка, ультрафиолетовое излучение.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Углеродные наноматериалы представляют широкий класс соединений: графен, фуллерены, нанотрубки, нановолокна и другие. Одна из таких макроструктур – пленки, составленные из углеродных нанотрубок, которые ориентированы в случайном порядке. Пленка 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].

Среди потенциальных применений гетероструктур на основе углеродных композитов в различных областях электроники следует особо отметить их перспективность в оптоэлектронике. Перспективной для оптоэлектроники является гетероструктура пленка ОУНТ/кремний, зарядовые свойства которой рассматриваются в данной работе. Это связано с рядом отличительных особенностей ОУНТ, 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 [1]. В работах последнего десятилетия продемонстрирована перспективность использования гетеропереходов ОУНТ/кремний в качестве солнечных элементов для преобразования энергии, а также эффективных сверхбыстрых широкополосных фотодетекторов [2]. Свойства и, в частности, электропроводность ОУНТ зависит от множества факторов их формирования [3], что позволяет создавать углеродные нанотрубки с заранее заданными свойствами.

Ультрафиолетовое излучение – электромагнитное излучение, занимающее спектральный диапазон между видимым и рентгеновским излучениями. Длины волн УФ-излучения лежат в интервале от 10 до 400 нм ( $7,5 \cdot 10^{14}$ – $3 \cdot 10^{16}$  Гц), что соответствует энергии излучения 124 – 3,1 эВ. Подавляющая часть УФ-излучения, испускаемого Солнцем, поглощается озоном, парами воды, кислородом и углекислым газом. Но благодаря созданию и совершенствованию искусственных источников УФ-излучения сейчас возможно получение излучения с длиной волны начиная от десятка нанометров, что находит применение в различных областях, таких как медицина, обеззараживание воздуха и поверхностей, косметология, криптография, хроматографический анализ, биотехнологии, масс-спектропия, сельское хозяйство и многих других [4].

### II. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

В данной работе рассматривается гетероструктура пленка одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) на кремнии. Целью данной работы является моделирование зарядовых свойств гетероструктуры пленка ОУНТ толщиной 50 нм на кремниевой подложке толщиной 2 мкм. В процессе формирования пленки ОУНТ на кремнии образуется тонкий слой оксида кремния SiO<sub>2</sub>, в исследуемой модели толщина слоя SiO<sub>2</sub> составляла 2 нм.

Моделирование было проведено с помощью программного пакета Comsol Multiphysics на основании решения модели Андерсона для полупроводниковых гетеропереходов, решения уравнения Пуассона,

уравнений непрерывности для электронов и дырок и уравнений Максвелла для электромагнитных волн. Моделирование проводилось на основании двумерной модели.

Длина волны падающего на структуру излучения  $\lambda=300$  нм. Плотность мощности излучения составляла  $1000$  Вт/м<sup>2</sup>. Для ОУНТ, кремния и оксида кремния задавался комплексный показатель преломления, его действительная  $n$  и мнимая  $k$  части [5,6,7].

Основные свойства использованных материалов представлены в табл. 1.

Таблица 1. Параметры материалов

	n-Si	SiO <sub>2</sub>	n-ОУНТ
Ширина запрещенной зоны, эВ	1,124	8	0,3
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 <sup>-3</sup>	10 <sup>16</sup>	-	10 <sup>18</sup>
Подвижность электронов, см <sup>2</sup> /(В·с)	1450	21	56
Подвижность дырок, см <sup>2</sup> /(В·с)	500	0,0001	56
Показатель преломления:			
- действительная часть $n$	4,976	1,46	1,51288
- мнимая часть $k$	4,234	0,0019	0,64472

В процессе формирования пленки ОУНТ на поверхности возникают различные ловушки носителей заряда. В основном они вызваны адсорбцией ионов кислорода O<sup>-</sup>, что обеспечивает n-тип проводимости ОУНТ [1]. Ловушечные состояния возникают также в оксиде кремния на поверхности кремниевой подложки. На поверхности ОУНТ были заданы ловушечные состояния донорного типа плотностью  $10^{12}$  см<sup>-2</sup> и с энергией  $E_t$  от 0 до 0,1 эВ считая от дна зоны проводимости [1], в объеме SiO<sub>2</sub> были заданы ловушки донорного типа плотностью  $10^{12}$  см<sup>-3</sup> и энергией 0,34 эВ считая от дна зоны проводимости [8].

В результате моделирования гетероструктуры была получена зависимость плотности электрического заряда  $\sigma$  на поверхности пленки ОУНТ от энергии ловушечных состояний  $E_t$  (рис. 1) при облучении светом длиной волны 300 нм.

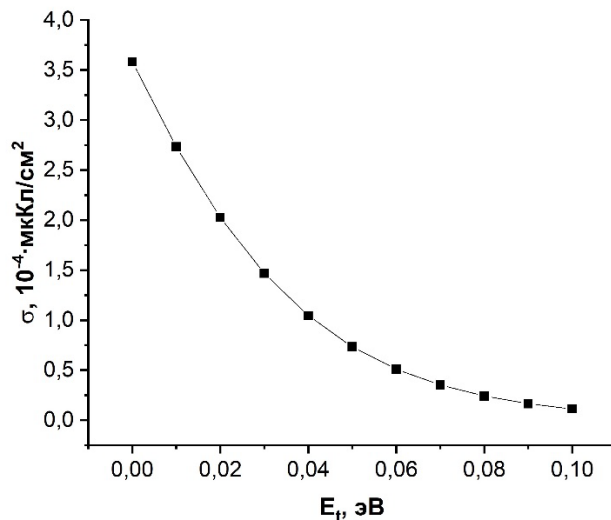


Рисунок 1. Зависимость поверхностной плотности заряда на поверхности ОУНТ от энергии  $E_t$

При наличии падающего на гетероструктуру излучения длиной волны 300 нм плотность заряда  $\sigma$  на поверхности пленки с увеличением значения  $E_t$  монотонно уменьшается от  $\sigma=3,6 \cdot 10^{-4}$  мкКл/см<sup>2</sup> при  $E_t=0$  эВ до  $\sigma=1,1 \cdot 10^{-5}$  мкКл/см<sup>2</sup> при  $E_t=0,1$  эВ. При отсутствии падающего излучения  $\sigma$  также монотонно уменьшается при росте  $E_t$  и незначительно превосходит значения  $\sigma$  в условиях наличия излучения, при  $E_t=0$  эВ на  $10^{-6}$  мкКл/см<sup>2</sup> и при  $E_t=0,1$  эВ на  $1,5 \cdot 10^{-9}$  мкКл/см<sup>2</sup>.

Также была получена зависимость электрического напряжения  $V_s$  от энергии ловушечных состояний  $E_t$ . Как при наличии излучения, так и при его отсутствии значение  $V_s$  монотонно уменьшалось при росте  $E_t$  на величину 0,5 мВ и 0,17 мВ, соответственно. Но в условиях падающего излучения значения  $V_s$  были существенно выше, чем при его отсутствии, при  $E_t=0$  эВ 119,7 и 72,4 мВ, соответственно. Для всех значений  $E_t$  различие  $V_s$  оставалось приблизительно одинаковым, 47,4 мВ для  $E_t=0$  эВ и 47,04 мВ для  $E_t=0,1$  эВ.

Для объяснения полученных результатов была построена энергетическая диаграмма структуры по оси перпендикулярной поверхности пленки (рис. 2). Разрыв между зонами проводимости кремния и пленки ОУНТ, препятствующий току электронов из пленки ОУНТ в кремний, составил 0,22 эВ. Разрыв между валентной зоной кремния и пленки ОУНТ составил 0,6 эВ, и также блокировал протекание дырок из пленки ОУНТ в кремний.

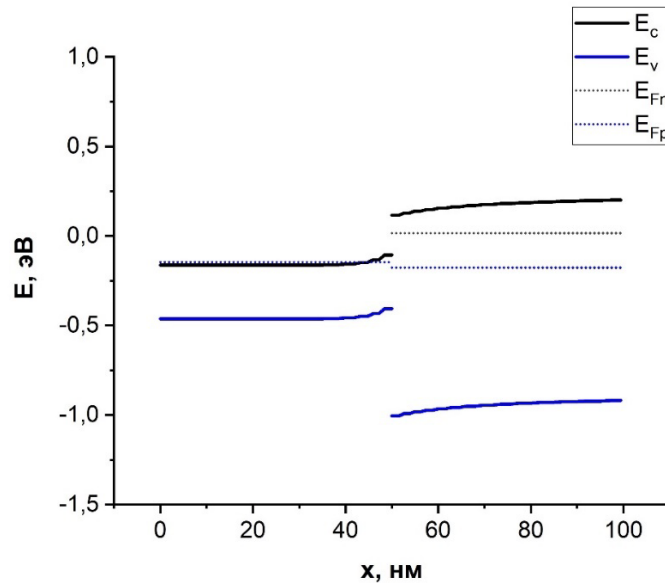


Рисунок 2. Энергетическая диаграмма гетероструктуры Si/ОУНТ

Плотность тока электронов через границу раздела кремний/ОУНТ при облучении структуры излучением длиной волны 300 нм составила приблизительно 47 А/см<sup>2</sup> в направлении из кремния в пленку ОУНТ, в то же время при отсутствии облучения плотность тока электронов составляла 527 А/см<sup>2</sup>. Плотность тока дырок через границу кремний/ОУНТ составила приблизительно 0,006 мкА/см<sup>2</sup> при отсутствии излучения, а при его наличии показала зависимость от энергии  $E_t$ , монотонно снижаясь от 2,9 мкА/см<sup>2</sup> при  $E_t=0$  эВ до 0,55 мкА/см<sup>2</sup> при  $E_t=0,1$  эВ.

Скорость генерации носителей заряда у поверхности пленки ОУНТ равняется  $2,72 \cdot 10^{16}$  см<sup>-2</sup>с<sup>-1</sup>, а в кремнии около границы раздела кремний/ОУНТ  $1,37 \cdot 10^{15}$  см<sup>-2</sup>с<sup>-1</sup>. Концентрация дырок в кремнии около границы раздела равна 740 см<sup>-3</sup> при отсутствии падающего излучения и  $1,3 \cdot 10^5$  см<sup>-3</sup> при его наличии. Концентрация дырок в пленке ОУНТ около границы раздела кремний/ОУНТ достигала  $5,4 \cdot 10^{12}$  см<sup>-3</sup> при отсутствии падающего излучения и  $3,4 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup> при его наличии.

Плотность тока дырок, в отличие от плотности тока электронов, через пленку ОУНТ показала зависимость от энергии  $E_t$ , около поверхности пленки 0,19 мА/см<sup>2</sup> при  $E_t=0$  эВ и 2,7 мкА/см<sup>2</sup> при  $E_t=0,1$  эВ. При n-типе легирования кремниевой подложки уменьшение толщины пленки ОУНТ вероятно позволит увеличить концентрацию дырок на границе раздела кремний/ОУНТ за счет увеличения скорости генерации носителей заряда в кремнии.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты моделирования зарядовых процессов в гетероструктуре кремний/пленка ОУНТ при облучении электромагнитными волнами с длиной волны 300 нм показали зависимость зарядовых свойств гетероструктуры от параметров ловушечных состояний на поверхности пленки ОУНТ.

Полученные результаты продемонстрировали возможность управления работой фотоэлектрических устройств в ультрафиолетовой области электромагнитного излучения, а также необходимость разработки методов формирования пленок ОУНТ с гибким контролем их свойств, в частности параметров ловушечных состояний.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Infrared photodetectors based on multiwalled carbon nanotubes: Insights into the effect of nitrogen doping / R. Kumar [et al.] // *Applied Surface Science*. – 2021. – Vol. 538. – P. 148187-148197
- [2] Hu, X. Carbon nanotube/silicon heterojunctions for photovoltaic applications / X. Hu, P. Hou, C. Liu, H. Cheng // *Nano Materials Science*. 2019. Vol. 1. P. 156–172.
- [3] Шандаков, С. Д. Допирование углеродных нанотрубок и графена / С. Д. Шандаков, А. И. Вершинина, М. В. Ломакин, А. В. Кособуцкий, А. Г. Насибулин // *Вестник Кемеровского государственного университета*. – 2015. - № 2 (62) Т. 5. – С. 127-131.
- [4] Evaluation of the Degradation of Materials by Exposure to Germicide UV-C Light Through Colorimetry, Tensile Strength and Surface Microstructure Analyses / O. Mitxelena-Iribarren [et al.] // *Materials Today Communications*. Elsevier. 2022. Vol. 31. P. 103690.
- [5] Green, M. A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300K including temperature coefficients / M. A. Green // *Solar Energy Materials & Solar Cells*. 2008. Vol. 92. P. 1305-1310.
- [6] Express determination of thickness and dielectric function of single-walled carbon nanotube films / G. A. Ermolaev [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* 2020. Vol. 116. P. 231103.
- [7] Rodríguez-de Marcos, L. V. Self-consistent optical constants of SiO<sub>2</sub> and Ta<sub>15</sub> films / L. V. Rodríguez-de Marcos, J. I. Larruquert, J. A. Méndez, J. A. Aznárez // *Opt. Mater. Express*. 2016. Vol. 6, No. 11. P. 3622-3637.
- [8] Дементьев, П.А. Ловушки в нанокompозитном слое кремний-диоксид кремния и их влияние на люминесцентные свойства / П. А. Дементьев, Е. В. Иванова, М. В. Загорянская // *ФТТ*. 2019. № 61(8). С. 1448-1454.

CHARGE PROPERTIES OF A HETEROSTRUCTURE OF CARBON NANOTUBES FILM ON SILICON  
UNDER ULTRAVIOLET IRRADIATION

A. Kuraptsova, A. Danilyuk

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[anku21qwerty@gmail.com](mailto:anku21qwerty@gmail.com)

Abstract: In this work, the charge properties of a heterostructure of a single-wall carbon nanotubes (SWCNT) film on silicon under irradiation of 300 nm wavelength are investigated by using computer modeling with the Comsol Multiphysics software package. As a result of modeling, the dependences of the surface electric charge density  $\sigma$  and the potential  $V_s$  on the energy  $E_t$  of trap states on the film surface, a monotonic decrease in these values with increasing  $E_t$ , as well as a difference in these values under conditions of the presence of incident irradiation and its absence were found. The greatest difference in the  $\sigma$  values in the presence and absence of irradiation was found at  $E_t=0$  eV and was  $10^{-6}$   $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ . The difference in the  $V_s$  values was slightly different for each value of the energy  $E_t$  and was approximately 47 mV.

Key words: carbon nanotubes, silicon, heterostructure, film, ultraviolet radiation.