

УДК 539.21

СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЯХ ДИОКСИДА
ТИТАНА В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ Si/ФМ/TiO₂ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ СОЛНЕЧНЫМ СВЕТОМ

Сидорова Т.Н., Данилюк А.Л.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Республика Беларусь, sharsu_antea@bk.ru

Аннотация: Рассмотрены процессы спиновой инжекции при спин-зависимом туннелировании электронов на поверхностные состояния диоксида титана, образованные адсорбированными органическими соединениями. Доказано, что чем выше величина спиновой поляризации, тем больше значение обменной длины, а зависимость от концентрации электронов характеризуется наличием максимума. Данные взаимосвязи позволяют конструировать фотокаталитические покрытия на основе Si/ферромагнетик (ФМ)/TiO₂ гетероструктур, что может способствовать реализации процессов спинового катализа для увеличения эффективности разложения органических соединений на поверхности диоксида титана.

Ключевые слова: диоксид титана, гетероструктура, солнечное излучение, спиновая поляризация, обменная длина.

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время активно изучаются процессы создания структур на основе TiO₂, обладающих фотокаталитической активностью в видимой части спектра солнечного излучения. Одним из них является использование гетероструктур, состоящих из чередующихся слоёв TiO₂ и кремния (Si). Для возникновения спинового фотокатализа, эффективность которого определяется обменной длиной L_{ex} , на поверхности TiO₂ необходимо обеспечить спиновую инжекцию электронов, генерированных в кремнии. В данной работе такая спиновая инжекция рассматривается в гетероструктуре кремний/ферромагнетик/диоксид титана.

II. МОДЕЛЬ

Рассмотрим процессы, происходящие в гетероструктуре TiO₂/ферромагнетик (ФМ)/Si. Поскольку в гетероструктуре Si/TiO₂, облучаемой поляризованным солнечным светом, степень спиновой поляризации носителей заряда не высока, то нами в качестве источника спин-поляризованных электронов между Si и TiO₂ используется металлический спиновый инжектор (CoFe, Co и т.п.), который может обеспечить необходимую величину спиновой поляризации. Потенциальная диаграмма такой структуры представлена на рисунке 1 [1]. 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 TiO₂ и далее туннелируют на его поверхностные состояния.

Потенциальный рельеф поверхности TiO₂, обусловленный поверхностными состояниями, образованными адсорбированными на поверхности TiO₂ химическими компонентами в общем случае имеет достаточно сложную форму. Потенциальный рельеф включает локальные энергетические максимумы и минимумы, отражающие определенные поверхностные состояния и возможные переходы электронов между ними. Прохождение электронов на поверхностные состояния происходит путем их туннелирования из объема TiO₂.

В соответствии с предложенной моделью на основе метода фазовых функций [1,2] рассчитаны параметры двух возможных потенциальных рельефов в TiO₂ и коэффициенты их туннельной прозрачности для электронов, генерируемых солнечным светом в Si и туннелирующих на поверхностные состояния TiO₂, образованные адсорбированными органическими соединениями.

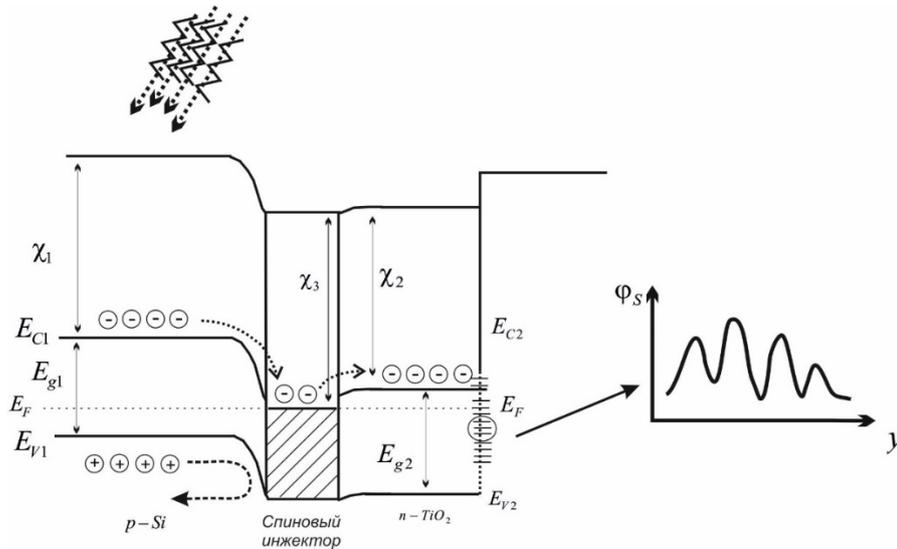


Рисунок 1. Потенциальная диаграмма структуры TiO₂/спиновый инжектор/Si с учетом поверхностных состояний на TiO₂ [1]

На основании полученных результатов отметим, что степень спиновой поляризации электронов на поверхности всегда ниже их спиновой поляризации в инжекторе, что в данном случае связано с наличием отражения части электронов от потенциального барьера. На основе полученных результатов можно заключить, что чем уже барьер, тем больше вероятность туннелирования и повышения когерентности (уменьшение фазовых сдвигов). Кроме этого, передняя часть профиля при увеличении потенциала попадает в область сильного снижения части барьера. Указанные два фактора приводят как к существенному росту степени поляризации, так и к насыщению ее. В случае узкой потенциальной ямы наблюдается первоначальный порог и дальнейший резкий рост степени поляризации до 25% [1]. При увеличении ширины потенциальной ямы наблюдается иной характер зависимостей – появляется область насыщения. Поляризованные электроны на поверхности TiO₂ способствуют протеканию реакции окисления. Ее ускорение влияет на протекание спинового катализа.

Спиновый катализ – это стимулирование химических реакций за счёт изменения электронного углового момента (спина) реагентов. Его источником является фундаментальный закон сохранения спина: разрешены только те направления реакции, в которых спин продуктов идентичен спину реагентов; все остальные реакционные каналы строго запрещены.

Физический смысл и назначение спинового катализа состоит в том, чтобы снимать спиновый запрет, изменять спин реагентов и открывать каналы реакции, закрытые по спину. Эти функции выполняет спиновый катализатор – частица, несущая собственный электронный спин (атом, радикал или ион). Взаимодействуя с реагирующей системой, спиновый катализатор обобществляет свой спин со спином реагирующей системы; в такой обобщённой спиновой системе ранее закрытые реакционные каналы становятся открытыми, т.е. разрешенными по спину. Одним из основных параметров, определяющих протекание спинового катализа, является обменная длина.

III. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОБМЕННОЙ ДЛИНЫ

Обменная длина определяется выражением [3]

$$L_{ex} = \sqrt{D_{ex} \tau_s}, \quad (1)$$

где D_{ex} – коэффициент спиновой диффузии, τ_s - время корреляции электронного спина. Величина коэффициента спиновой диффузии равна:

$$D_{ex} = \frac{1}{3} r_s^2 \frac{J(n_s)}{\hbar}, \quad (2)$$

где среднее расстояние между электронами на поверхности $r_s = (1/\pi n_s)^{1/2}$, n_s – концентрация электронов на поверхности диоксида титана, энергия обменного взаимодействия [3]

$$J(n_s) = 0.82 \frac{f(p)}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 a_B} \left(\frac{r_s}{a_B}\right)^{5/2} \exp\left(-\frac{r_s}{a_B}\right). \quad (3)$$

Здесь функция $f(p) = (1+p)^{3/2} + (1-p)^{3/2}$, a_B - боровский радиус электрона на доноре, p – спиновая поляризация.

С помощью выражений (1)–(3) можно рассчитать обменную длину в зависимости от концентрации электронов, времени корреляции электронного спина и степени поляризации. На основе полученных выражений была рассчитана обменная длина в зависимости от концентрации n_s при различных значениях борковского радиуса электрона на доноре (рис. 2a), времени корреляции электронного спина (рис.2b), степени поляризации (рис. 3).

На рисунке 2a представлена зависимость обменной длины от концентрации n_s при различных значениях борковского радиуса электрона на доноре. Видно, что значение обменной длины увеличивается при увеличении значения концентрации. Когда значение концентрации достигает величины (1-5) 10^6 м^{-2} , значение обменной длины начинает постепенно уменьшаться. Поведение зависимости качественно совпадает для всех рассматриваемых значений борковского радиуса электрона на доноре.

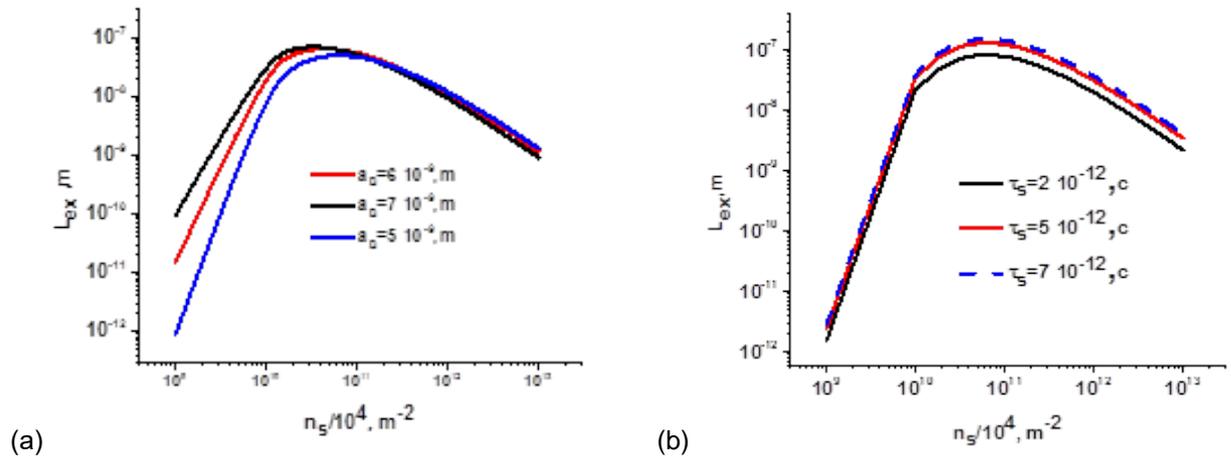


Рисунок 2. Обменная длина в зависимости от концентрации n_s при различных значениях борковского радиуса электрона на доноре (a) и при различных значениях времени корреляции электронного спина (b)

При увеличении значения борковского радиуса электрона на доноре значение обменной длины также увеличивается. Численное значение L_{ex} меняется незначительно в зависимости от значения времени корреляции электронного спина. Когда значение концентрации достигает величины $1 \cdot 10^7 \text{ м}^{-2}$, значение обменной длины начинает постепенно уменьшаться. При увеличении времени корреляции электронного спина значение обменной длины также увеличивается.

Также была рассчитана обменная длина в зависимости от концентрации при различных значениях степени поляризации (Рисунок 3). Показано, что чем выше величина степени поляризации p , тем больше значение обменной длины.

Расчёт обменной длины показал, что ее величина немонотонно меняется с увеличением концентрации электронов на поверхности диоксида титана, рисунок 2b. С ростом концентрации в диапазоне 10^{10} - 10^{12} см^{-2} при данных параметрах ($a_B=5 \text{ нм}$, $\tau_s=1 \text{ пс}$) обменная длина достигает максимума 50-60 нм в области концентраций электронов $(6-8) \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$.

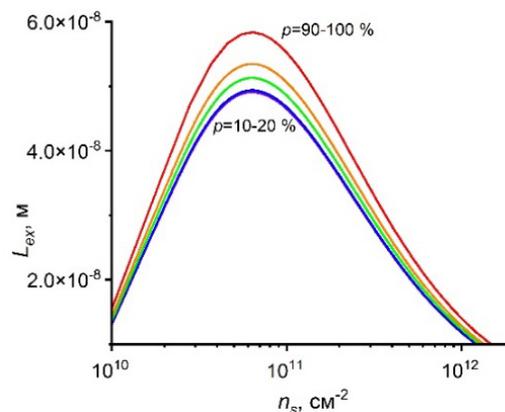


Рисунок 3. Обменная длина в зависимости от концентрации n_s при различных значениях степени поляризации

Таким образом, значение обменной длины увеличивается при увеличении времени корреляции пропорционально $\tau_s^{1/2}$ и уменьшается со снижением a_B . Рост обменной длины в зависимости от увеличения степени спиновой поляризации составляет при $p=50\%$ в 1,05 раза, а при $p=90-100\%$ в 1,2 раза. Поэтому для увеличения обменной длины необходимо применять спиновые инжекторы с высокой степенью спиновой поляризации, например, сплавы Гейслера, а также управлять концентрацией электронов на поверхности диоксида титана.

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было установлено, что зависимость обменной длины от концентрации электронов имеет немонотонный характер. При увеличении степени поляризации, времени корреляции электронного спина, боровского радиуса электрона на поверхностных состояниях диоксида титана величина обменной длины в максимуме растет. Данные взаимосвязи позволяют конструировать фотокаталитические покрытия на основе Si/ферромагнетик(ФМ)/TiO₂ гетероструктур для повышения эффективности процесса спинового фотокатализа.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Сидорова, Т. Н. Спин-зависимое туннелирование на поверхностные состояния диоксида титана / Т.Н.Сидорова, А.Л.Данилюк, В.Е.Борисенко // М.: Доклады НАН РБ, – 2020.
- [2] Метод фазовых функций в квантовой механике / В.В.Бабинов // М.: Наука, 1976. – 224 с.
- [3] С. Herring [и др.] Phys. Rev. 34 (1964) 362.

SPIN POLARISATION ON THE SURFACE STATES OF THE TITANIUM DIOXIDE IN THE Si/FM/TiO₂ HETEROSTRUCTURE AT THE SUN EXPOSURE

T. Sidorova, A. Danilyuk

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,
sharsu_antea@bk.ru

Abstract: Processes of the spin injection at the spin –dependent tunneling of the electrons to the titanium dioxide surface states, created by the organic compounds, were observed. It was proved that the higher is spin polarization, then more is exchange length. Dependence from the electron concentration is characterized by the Maximum availability. Current interconnections permit to create photocatalytic covers based on Si/ferromagnetic(FM)/TiO₂ heterostructures. It can assist to the realization of the spin catalysis processes for the increasing of the efficiency of the decomposition of organic compounds on the TiO₂ surface states.

Keywords: titanium dioxide, heterostructure, sun exposure, spin polarization, exchange length.