

ПРИПОВЕРХНОСТНЫЕ ЦЕНТРЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ДИОКСИДЕ ТИТАНА

Ботов М. А.¹, Кузнецов А. Ю.¹, Соколов А. Б.¹

¹) Уральский Федеральный Университет

E-mail: scibma@gmail.com

NEAR-SURFACE CENTERS OF LUMINESCENCE IN TITANIUM DIOXIDE

Botov M. A.¹, Kuznetsov A. Y.¹, Sobolev A. B.¹

¹) Ural Federal University

Luminescence in anatase thin films caused by processes of electronic excitations were investigated using first-principles approaches. The energy of luminescence as to intrinsic defects and self-trapped exciton in particular were calculated by Hartree-Fock and B3LYP methods.

Анатаз является наиболее перспективной из всех полиморфных модификаций оксида титана для целей применения в солнечной энергетике благодаря своей более высокой подвижности электронов, низкой диэлектрической постоянной и более низкой плотности.

В данной работе методами из первых принципов были исследованы процессы релаксации электронных возбуждений в тонких пленках монокристалла оксида титана (анатаз), сопровождаемые люминесценцией.

В частности, были смоделированы такие нейтральные собственные дефекты как автолокализованные экситоны. Работы выполнялись с помощью квантово-механических методов Хартри-Фока и гибридного функционала B3LYP. Расчеты выполнялись в рамках периодических граничных условий с полной релаксацией суперячейки.

Для рассмотренных конфигураций дефектов были получены данные по энергии люминесценции, изменениям в распределении электронной плотности, плотности состояний и характере геометрических искажений кристаллической решетки, вызванных возникновением дефекта и процессами релаксации.

1. Dovesi R, Saunders V.R, Roetti C et al //CRYSTAL09 User's Manual (University of Torino) (2013)
2. O, Huisman C. L. and Reller A. Photoinduced reactivity of titanium dioxide //Prog. in Solid State Chem. 32, pp. 33-117 (2004)