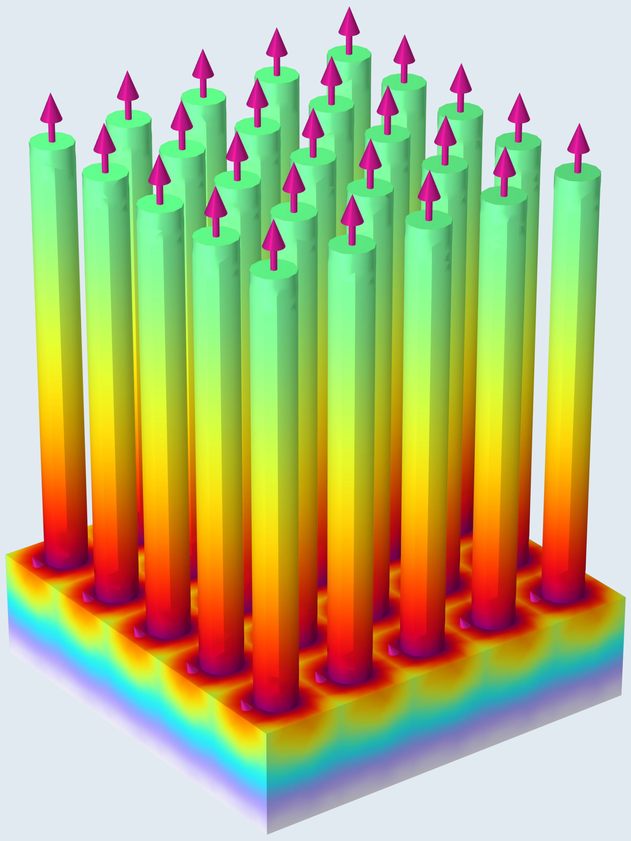


利用 COMSOL 多物理场仿真揭示高性能异质结光电探测器的增强机制

The enhancement mechanism of high-performance heterojunction photodetectors is revealed by COMSOL Multiphysics simulation

原靖淞[1, 2, 3]

1. 集成光电子全国重点实验室，长春，吉林，中国
2. 紫外光发射材料与技术教育部重点实验室，长春，吉林，中国
3. 东北师范大学物理学院，长春，吉林，中国

摘要

光电化学（PEC）型日盲紫外探测器凭借自驱动运行的优势备受关注，但其性能长期面临表面反应动力学缓慢和体相载流子复合严重的瓶颈。为克服这些缺陷，我们构建了 $TiO_2/Ga_2O_3/Pd$ 异质结光电探测器，实现了257 mA/W 的极高零偏压响应度和 4.83ms 的超快响应速度，展现出重要应用前景。为了深入验证并解释该结构实现卓越性能的内在物理机制，本研究利用 COMSOL Multiphysics（6.4版）对 $TiO_2/Ga_2O_3/Pd$ 异质结进行了多物理场仿真，旨在验证并解释该高性能光电探测器背后的物理增强机制。

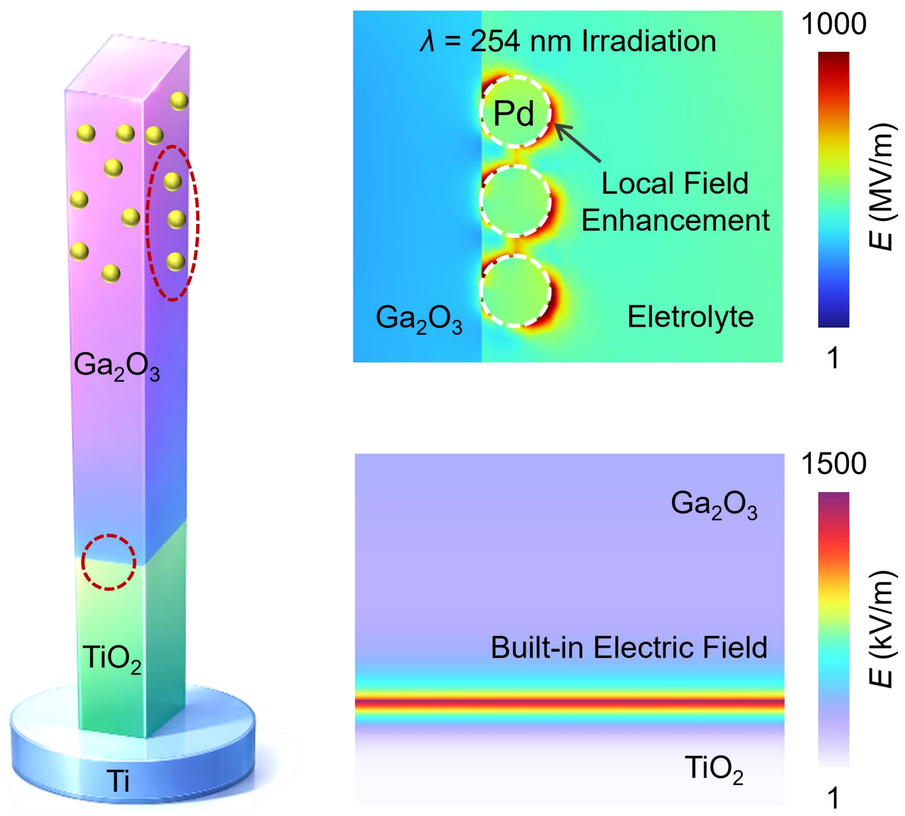


图1. 异质结构的几何模型及光场、电场分布

方法

仿真工作主要涵盖两个核心方面：首先，利用波动光学模块构建三维周期性单元模型，模拟附着于 Ga_2O_3 表面的 Pd纳米颗粒在 254 nm光照下的局域表面等离激元共振（LSPR）效应；其次，利用半导体模块构建二维模型，计算 TiO_2/Ga_2O_3 界面的静电势与电场分布。仿真结果清晰地展现了两种关键的物理效应：Pd纳米颗粒的LSPR效应在纳米颗粒与半导体交界处产生了强烈的近场电磁限制；静电势分布模拟揭示，在 TiO_2/Ga_2O_3 异质结边界处形成了强大的内建电场。

计算近场增强的核心是求解基于麦克斯韦方程组的频域波动方程：

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times E) - k_0^2 \left(\varepsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega \varepsilon_0} \right) E = 0$$

内建电场的分布是通过耦合求解泊松方程和漂移-扩散方程得到的。决定空间电荷区电势分布的核心是泊松方程：

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla V) = -q\left(p - n + N_D^{+} - N_A^{-}\right)$$

结论

如摘要缩略图（电场分布）及图1-3所示，波动光学与半导体物理场仿真完美揭示了该器件优异性能的协同增强机制：Pd诱导的LSPR效应从源头上大幅增加了光生载流子的产生浓度；而界面处极强的内建电场则为载流子提供了强大的矢量驱动力，促使电子高效定向分离，有效抑制了体相复合。“光吸收增强”与“电荷高效分离”的物理场协同，为该探测器实现超高响应度和超快响应速度提供了坚实的理论解释。

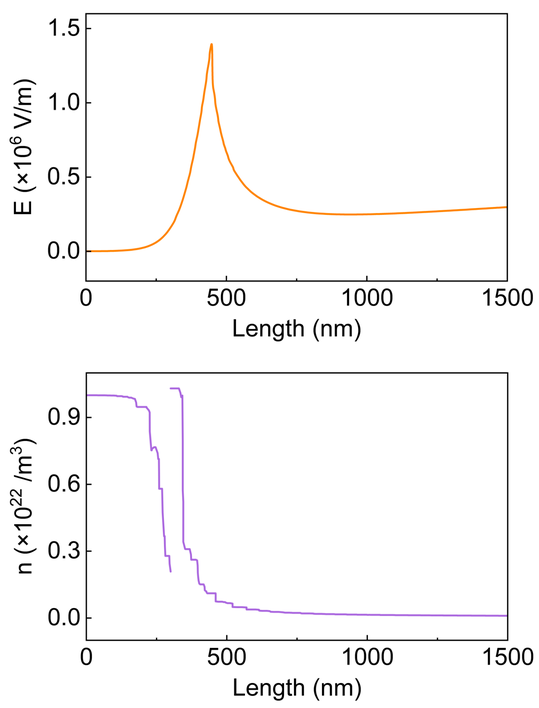


图2. 异质界面处的电场和载流子分布

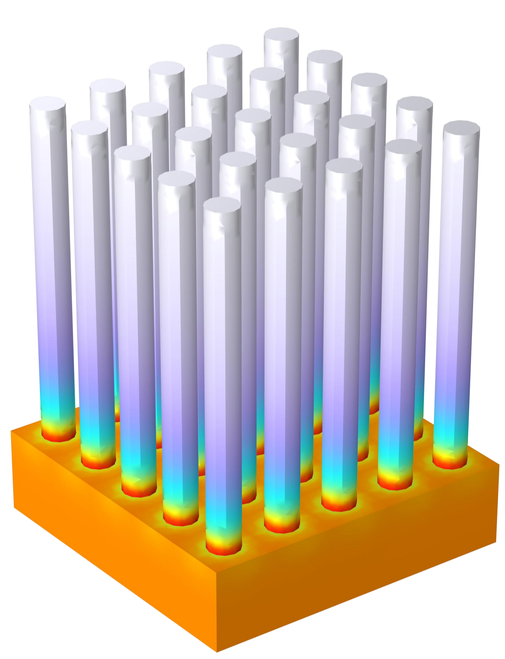


图3. 异质结构的载流子分布

参考文献

1. Linic, S., Christopher, P. & Ingram, D. B. Plasmonic-metal nanostructures for efficient conversion of solar to chemical energy. *Nat. Mater.* 10, 911–921.
2. Brongersma, M. L., Halas, N. J. & Nordlander, P. Plasmon-induced hot carrier science and technology. *Nat. Nanotechnol.* 10, 25–34.
3. Hong, X. *et al.* Ultrafast charge transfer in atomically thin MoS_2/WS_2 heterostructures. *Nat. Nanotechnol.* 9, 682–686.