

DOI:10.3969/j.issn.1003-5060.2026.08.008

基于泄漏模式的 SiNW array/MAPbI₃ 核壳结构 异质结宽波段光电探测器

肖宇天¹, 罗林保², 张翠芸², 付 灿², 李中军¹

(1. 合肥工业大学 物理学院, 安徽 合肥 230601; 2. 合肥工业大学 微电子学院, 安徽 合肥 230601)

摘 要:文章提出一种基于泄漏模式的核壳结构硅基 p-n 异质结宽波段光电探测器,该探测器在可见光到近红外光的宽波段范围内均具有良好的光响应,且在 430 nm 和 970 nm 波长处分别测得光电流峰值。研究发现,核壳结构的异质结与阶跃型折射率光纤的结构相似,高折射率的硅纳米线和涂覆的钙钛矿层分别充当了光纤中的纤芯和包层;当入射光的引导模式在核壳结构中转变为泄漏模式时,能量将从纤芯泄漏到包层中,从而增强了该波段的光学吸收。通过光学仿真软件 COMSOL 对器件的电场分布进行仿真,证实了异质结中存在泄漏模式。器件的性能分析结果表明,0 V 偏压下,探测器在 430 nm 和 970 nm 波长处的最大响应度分别达到 87 mA/W 和 694 mA/W。该研究表明,核壳结构中的泄漏模式可以增强入射光的吸收,基于泄漏模式制备的光电器件在未来具有较大的应用潜力。

关键词:宽光谱响应;泄漏模式;核壳结构;p-n 异质结;光电探测器

中图分类号:O469;TB383

文献标志码:A

文章编号:1003-5060(2026)08-1053-06

A SiNW array/MAPbI₃ core-shell heterojunction broadband photodetector based on leaky mode

XIAO Yutian¹, LUO Linbao², ZHANG Cuiyun², FU Can², LI Zhongjun¹

(1. School of Physics, Hefei University of Technology, Hefei 230601, China; 2. School of Microelectronics, Hefei University of Technology, Hefei 230601, China)

Abstract: This paper proposes a silicon based p-n heterojunction broadband photodetector with a core-shell structure induced by leaky mode. The detector is sensitive to a wide wavelength range from the visible light to near-infrared region. Remarkably, the photocurrent of the device exhibits two peaks at the wavelengths of 430 nm and 970 nm. It is found that the core-shell heterojunction has a similar structure to step-index fiber, with silicon nanowire(SiNW) serving as the core and perovskite thin films serving as the cladding. In the core-shell structure, when the guided mode of incident light changes to the leaky mode, energy will leak from the core to the cladding, resulting in enhanced optical absorption at that wavelength. The electric field distribution of the device was simulated using optical simulation software COMSOL, confirming the presence of leaky modes in the heterojunction. The device performance analysis shows that the peak responsivities of the detector under 430 nm and 970 nm wavelength can reach 87 mA/W and 694 mA/W, respectively, at zero bias voltage. This study demonstrates that the leaky mode present in core-shell structures can enhance the absorption of incident light, and optoelectronic devices based on leaky modes have great potential for future applications.

Key words: wide spectral response; leaky mode; core-shell structure; p-n heterojunction; photodetector

收稿日期:2024-04-12;修回日期:2024-05-13

基金项目:国家自然科学基金资助项目(12174080)

作者简介:肖宇天(1997—),男,安徽合肥人,合肥工业大学硕士生;

罗林保(1981—),男,安徽肥东人,博士,合肥工业大学教授,博士生导师;

李中军(1976—),男,安徽霍邱人,博士,合肥工业大学教授,博士生导师,通信作者,E-mail:zjli@hfut.edu.cn.

0 引言

硅纳米线(silicon nanowire, SiNW)作为一种新型一维半导体材料,已被应用于太阳能电池和光电探测器等领域^[1]。与传统的 Si 材料相比, SiNW 的优势^[2]如下:① 更大的表面积和体积比,有助于提高器件的有效区域占比;② 更短的载流子传输路径,有助于降低载流子的复合概率;③ 更强的光学吸收能力,有助于显著减少材料的光学吸收损失。一系列研究表明, SiNW 除上述优点外,还可充当光波导^[3-6]。当入射光在光波导中传播时,会分解为不同的引导模式。而在阶跃型折射率光纤中,满足条件的高阶引导模式会转变为泄漏模式,将入射光能量泄漏到包层中。核壳结构的异质结与阶跃型折射率光纤结构相似,通过构建核壳结构的异质结可以进一步增强材料的光学吸收。

近年来,有机金属三卤化物钙钛矿材料因其出色的光电性能和低成本的制备方法而受到广泛关注。钙钛矿材料的载流子迁移率较高,光谱吸收范围可调谐^[7],最重要的是,使用溶液法制备的钙钛矿前驱体可以旋涂在 SiNW 上,并通过进一步退火在 SiNW 表面形成致密的钙钛矿晶膜,这为构建核壳结构 SiNW 异质结结构^[8-9]带来了可能。

本文提出一种制造简单、成本较低的核壳结构 SiNW array/MAPbI₃(垂直硅纳米线阵列/甲基氨铅碘钙钛矿)晶膜 p-n 异质结的宽波段光电探测器。首先,用金属辅助的化学刻蚀法制备垂直排列的 SiNW 阵列;然后采用旋涂法将制备好的 MAPbI₃ 前驱体溶液旋涂在垂直 SiNW 阵列表面,使 MAPbI₃ 晶体包覆在 SiNW 上,从而构建出核壳结构 SiNW array/MAPbI₃ 异质结。器件在 430 nm 和 970 nm 波长处测得了光响应峰值。良好的器件性能以及简单的全溶液制造工艺,使这些卤化物钙钛矿薄膜和 SiNW 异质结器件在光学成像和传感等方面具有潜在的应用前景。

1 器件的制备与形貌表征

SiNW array/MAPbI₃ 异质结光电探测器的结构如图 1a 所示。首先刻蚀出垂直的 SiNW 阵列,之后将制备好的 MAPbI₃ 前驱体溶液旋涂在垂直的 SiNW 阵列表面,使 MAPbI₃ 晶体包覆在 SiNW 上,制备出 SiNW array/MAPbI₃ 的异质结。

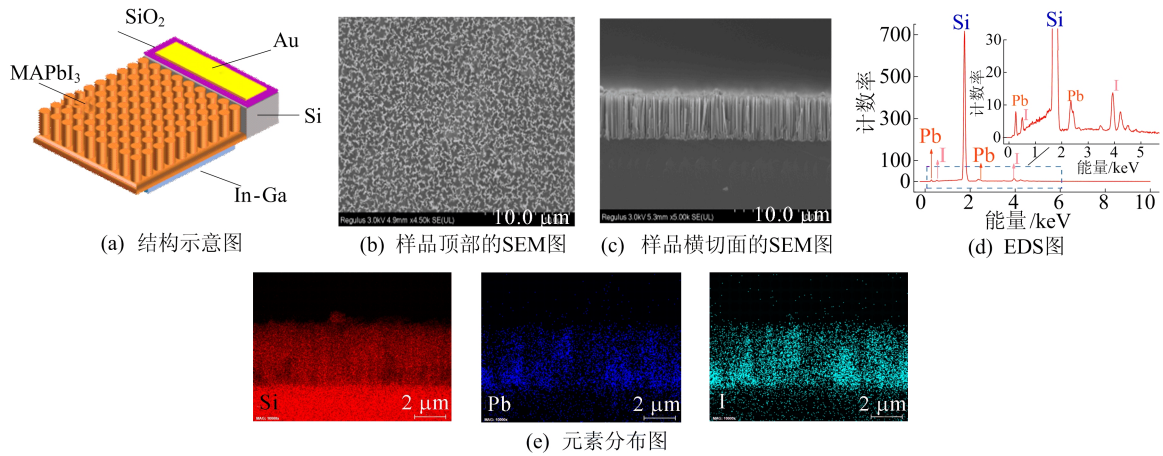
SiNW 阵列的制备采用银离子辅助的化学刻蚀方法^[10-11]。首先,将表面覆盖有 300 nm 厚 SiO₂ 层的轻掺 n 型 Si 衬底切割成面积为 1 cm×1 cm 的大小;随后,使用胶带选择性覆盖部分 SiO₂ 层以起保护作用,未被胶带覆盖的区域经缓冲氧化剂刻蚀液(BOE)刻蚀,形成了约 0.5 cm×0.5 cm 大小的窗口;将上述处理过的衬底浸入含 0.005 mol AgNO₃ 和 4.8 mol HF 的混合溶液中浸泡 1 min 左右,待银离子完全覆盖住衬底表面后,再将其浸入含 4.8 mol HF 和 0.4 mol H₂O₂ 的混合液中刻蚀 20 min,得到垂直的 SiNW 阵列。MAPbI₃ 前驱体溶液的制备是将 1 mmol PbI₂ 和 1 mmol MAI 的溶质溶入 0.5 mL 二甲亚砜(DMSO)和 0.5 mL N,N-二甲基甲酰胺(DMF)的混合溶剂中,随后在加热台上将溶液在 60 °C 下搅拌约 60 min,待溶质充分溶解后,即得 MAPbI₃ 前驱体溶液。将得到的钙钛矿前驱体溶液分别在 600 r/min 和 3 000 r/min 的转速下旋涂 10 s 和 30 s,并在 120 °C 的温度下退火 15 min,制得 SiNW array/MAPbI₃ 异质结结构;然后分别在 SiO₂ 保护层表面的钙钛矿晶膜上蒸镀厚度约 50 nm 的 Au 作为顶部电极;最后在衬底的底部均匀地涂覆 In-Ga 合金,待其完全凝固后作为底部电极,进而完成器件的制备。

利用场发射扫描电子显微镜(scanning electron microscope, SEM)和 X 射线能谱仪(energy dispersive spectrometer, EDS)分别对 SiNW array/MAPbI₃ 异质结结构的形貌和化学组分进行分析,如图 1 所示。

图 1b、图 1c 分别为 SiNW array/MAPbI₃ 异质结的顶部和横切面 SEM 图。从图 1b 可以看出,用旋涂法制备的钙钛矿薄膜并没有在 SiNW 阵列顶部聚集;从图 1c 可以看出,由于 SiNW 为 MAPbI₃ 晶体薄膜提供了高表面积附着点,旋涂法制备的钙钛矿薄膜紧紧吸附在纳米线上, SiNW 与 MAPbI₃ 薄膜形成了类似核壳的结构。

图 1d 为 SiNW array/MAPbI₃ 异质结的能谱图,通过将测试过程中获得的不同元素跃迁释放的能量与标准值对比发现, Pb、I 元素的信号强度比值接近 1 : 3,符合 MAPbI₃ 的元素比。

为了进一步研究 SiNW 与钙钛矿薄膜形成的结构,图 1e 分别显示了 Si、Pb、I 元素在异质结中的分布情况,进一步证实了 MAPbI₃ 钙钛矿薄膜与 SiNW 阵列形成了紧密的核壳结构。

图1 SiNW array/MAPbI₃ 异质结的形貌及元素表征图

2 器件性能表征与分析

2.1 器件的光响应特性表征

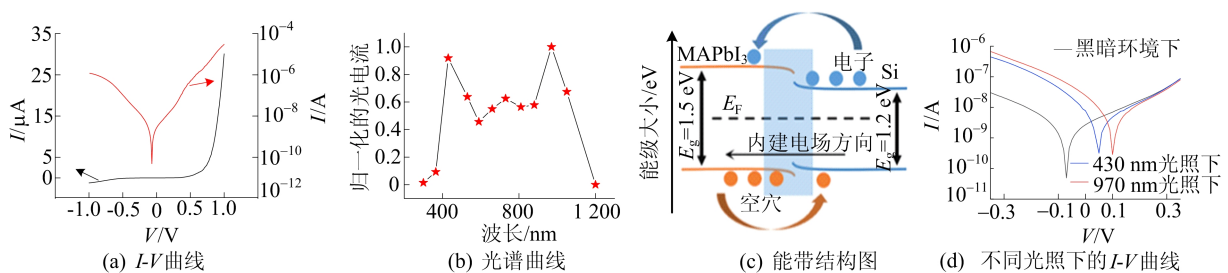
SiNW array/MAPbI₃ 异质结在黑暗环境下的 I - V 曲线图如图 2a 所示。从图 2a 可以明显看出,异质结在 $-1.0 \sim 1.0$ V 范围内具有典型的整流行为。

为研究器件在不同波长光照下的 I - V 特性,在保持相同光照强度的情况下,分别使用不同波长的激光器对器件的有效区域进行照射,在 0 V 偏压下测得波长与光电流的关系曲线,如图 2b 所示。从图 2b 可以看出,器件在 430~1 050 nm 下具有宽光谱的响应,另外相较于纯硅的光电探测器,本文器件的光响应在 430 nm 和 970 nm 处具有 2 个明显的峰值。产生宽光谱响应的原因得益于构成异质结的 SiNW 阵列和 MAPbI₃ 材料光的吸收覆盖了可见光到近红外光的范围,当材料吸收了光子的能量在异质结中产生电子空穴对后,可以被内建电场迅速分离,并且纳米线结构充当了载流子的运输通道,进一步提高了载流子的运输效率^[12-13]。器件在 430 nm 和 970 nm 处具有光响应峰值的原因是入射光在 SiNW array/MAPbI₃ 异质结中传播时,其高阶引导模式向泄漏模式转变引起光场增强,进而产生了峰值光响

应,在下一节中将结合器件的光学仿真情况,进一步说明本文器件中泄漏模式产生的原因。

SiNW array/MAPbI₃ 异质结的结构示意图如图 2c 所示。由于 n 型的 SiNW 阵列多子为电子,p 型的 MAPbI₃ 多子为空穴,当它们相互接触时,由于浓度差产生了多子的扩散运动,进而在交界处形成耗尽区。耗尽区的出现意味着内建电场的产生,这促进了少子的漂移运动。当漂移运动与扩散运动达到动态平衡时,在耗尽区会产生一个从 SiNW 指向 MAPbI₃ 稳定的内建电场。当光子在耗尽区被吸收产生电子空穴对时,由于内建电场的作用^[14],电子迅速地从耗尽区传输到 SiNW 中,同时空穴也迅速地从耗尽区传输到 MAPbI₃ 中,最终电子和空穴分别被 In-Ga 合金和 Au 收集,产生光电流信号。

接着研究了器件在两个光响应峰值处波长光照下的光伏行为,分别使用 430 nm 和 970 nm 的激光器,测量在光照强度相同的情况下,偏压从 $-0.3 \sim 0.3$ V 的 I - V 特性曲线,并与暗电流进行比较,结果如图 2d 所示。从图 2d 可以看出,在反向偏置电压范围内器件具有极小的暗电流。在 970 nm 波长处的光电流比 430 nm 波长处的略大,两波长处都有着较强的光响应,并且在 0 V 偏压下均具有良好的自驱动能力。

图2 SiNW array/MAPbI₃ 异质结各特性曲线和能带结构图

2.2 器件的光学仿真

使用旋涂法制备的 SiNW array/MAPbI₃ 异质结中, SiNW 与 MAPbI₃ 薄膜形成了紧密的核壳结构, 这与阶跃型折射率光纤的结构非常相似, 高折射率的 SiNW 充当了纤芯, 而涂覆的钙钛矿层则充当了包层。不同的引导模式在阶跃指数光纤径向传播时的振幅大小示意图如图 3a 所示。从图 3a 可以看出, 3 种引导模式 LP₀₁、LP₁₁、LP₂₁ 在传播到纤芯与包层边界处时, 由于折射率迅速下降, 导致 3 种模式在包层中迅速衰减。若此时略微提高光纤在直径 20 μm 处的折射率, LP₀₁ 模式在包层中的衰减略微变慢, 对该模式总体影响不大; 而对于 LP₁₁、LP₂₁ 模式, 由于折射率提高, 导致其在包层中不但没有衰减反而增加, 此时 LP₁₁、LP₂₁ 模式转变为泄漏模式^[15], 使得能量从纤芯泄漏到包层中。

为了验证泄漏模式是否存在于本器件中, 使用 COMSOL 光学仿真软件对 SiNW 阵列与

MAPbI₃ 钙钛矿薄膜形成的核壳纳米线结构进行光学仿真。

图 3b~图 3f 所示分别为核壳结构纳米线在 430、590、730、880、970 nm 光照激发的 x - y 平面总功率损耗密度分布图。从仿真结果可以看出, SiNW array/MAPbI₃ 异质结充当了光学纤维, 调谐钙钛矿层对入射光的吸收。当器件处于 590 nm 和 880 nm 这两个波长的光照下时, 在核壳结构中只有材料的本征吸收引起的功率损耗, 并没有发现引导模式向泄漏模式转变; 而当器件处于 430、730、970 nm 的光照下时, 发现了类似泄漏模式的传播模式, 此时高阶引导模式在 SiNW 上转变为泄漏模式, 入射光能量在纳米线的轴向上迅速衰减, 而在纳米线的径向上大量积累并泄漏到钙钛矿包层之中, 极大地增强了钙钛矿层的光学吸收。

上述光学仿真结果对应了器件的光谱响应特性, 解释了器件的峰值响应特性。

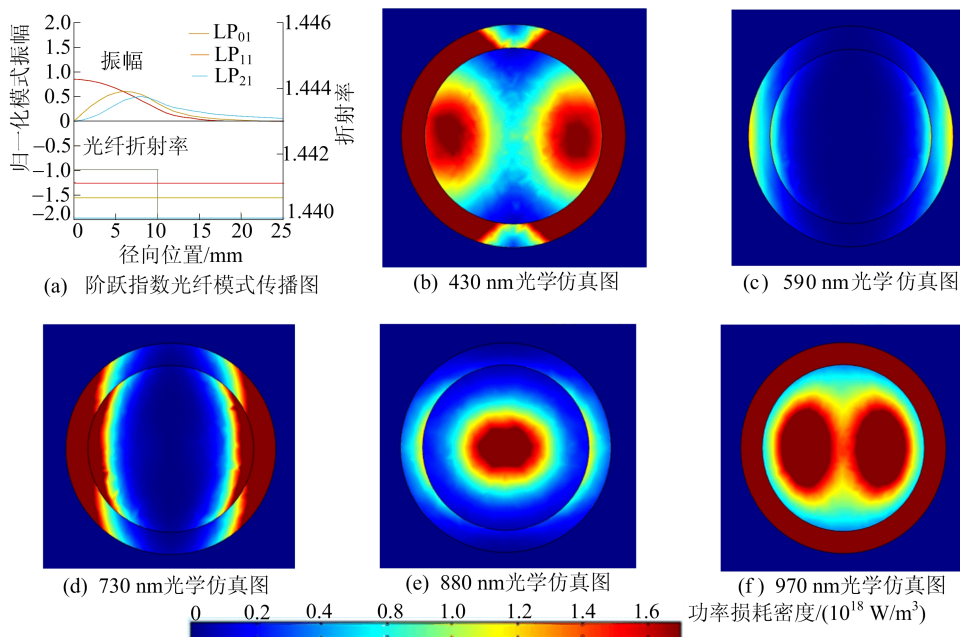


图 3 阶跃指数光纤的光纤模式传播图及不同波长光照激发的 x - y 平面总功率损耗密度分布图

2.3 器件的光电转换效率表征

为进一步研究该器件在 430 nm 和 970 nm 波长处的探测能力, 测量不同入射光功率的 I - V 曲线, 如图 4a、图 4b 所示。图 4a 中, 图例 2 至 10 分别表示入射光功率为 1.38、4.41、7.49、10.58、15.17、30.20、37.60、44.90、52.00 $\mu\text{W}/\text{cm}^2$; 图 4b 中, 图例 2 至 10 分别表示入射光功率为 0.19、0.65、1.13、1.62、2.36、3.61、4.87、6.13、7.39 $\mu\text{W}/\text{cm}^2$; 图 4a 和图 4b 中, 图例 1 均表示黑

暗环境。

从图 4a、图 4b 可以看出, 随着入射光功率不断增大, 两种波长的光电流也在逐渐增大。随后分析器件在自供电状态下的光响应效率特性, 计算在不同光功率照射下峰值光响应波长处的响应度 R , 计算公式如下:

$$R = (I_p - I_d) / (P_{\text{in}} S) \quad (1)$$

其中: I_p 、 I_d 分别为器件产生的光电流和自身暗电流; P_{in} 为不同波长入射光的光功率密度; S 为

器件的有效区域面积(本文中 S 约为 0.016 cm^2)。

计算结果如图 4c、图 4d 所示,可以看出,随着光功率不断增大,光响应效率不断降低。0 V 偏压 430 nm 光照条件下,在 $7.49 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ 处测得响应度为 $87 \text{ mA}/\text{W}$;0 V 偏压 970 nm 光照条

件下,在 $0.189 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ 处测得的响应度为 $694 \text{ mA}/\text{W}$ 。这表明由于入射光发生了引导模式向泄漏模式的转变,使得这两个波长的光吸收得到了增强,从而器件在这两个波长下均具有良好的光响应效率。

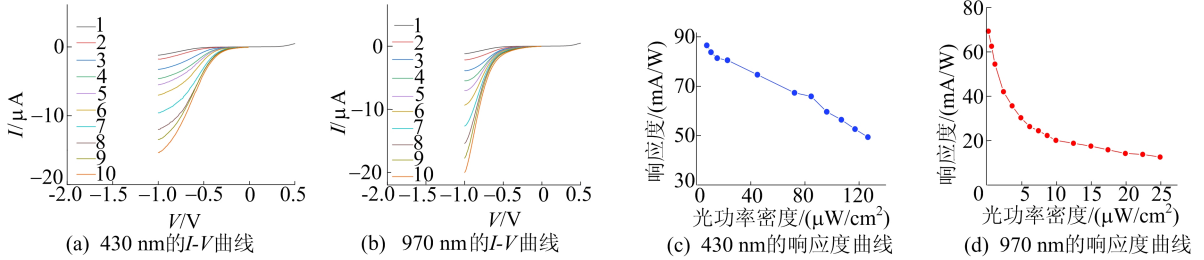


图 4 430 nm 和 970 nm 下的 I - V 曲线图和响应度曲线

SiNW array/MAPbI₃ 异质结各光响应特性曲线如图 5 所示。

图 5a、图 5b 所示分别为 430 nm 和 970 nm 波长处,不同的光照强度与光电流大小关系的曲线。使用经验拟合公式 $I = \alpha P^\theta$ 描述光电器件的净光电流大小随光照强度的变化趋势,其中: I 为器件产生的净光电流大小; P 为入射光功率; α 和 θ 为常数,在器件的载流子没有复合损耗的理想情况下 θ 值为 1。从图 5a、图 5b 可以看出,在 430 nm 和 970 nm 处 θ 值分别为 0.79 和 0.71,与理想值有一定的差距。这可能是由于旋涂法制备的钙钛矿薄膜引入了缺陷,当载流子经过这些缺陷时发生复合,进而影响了载流子的运输。

分别计算 430 nm 和 970 nm 光照下的比探测率和外量子效率。比探测率 D^* 的表达式如下:

$$D^* = \sqrt{S \Delta f} / I_n \quad (2)$$

其中: Δf 为器件的工作带宽; I_n 为噪声电流。

因为在测试时已尽量避免外界环境的干扰,所以本文只考虑器件内部噪声。器件内部噪声主要包括热噪声和散粒噪声。当暗电流被粒子噪声主导时,比探测率可以简化为如下形式:

$$D^* = \sqrt{SR} / \sqrt{2eI_d} \quad (3)$$

外量子效率 η_{EQE} 的表达式如下:

$$\eta_{\text{EQE}} = \frac{hcR}{\lambda e} \quad (4)$$

其中, λ 为 430 nm 或 970 nm 入射光的波长大小。

从图 5c、图 5d 可以看出:0 V 偏压、430 nm 的光照条件下, $7.490 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ 处测得的比探测率和外量子效率分别为 $3.75 \times 10^{11} \text{ Jones}$ 和 25%;0 V 偏压、970 nm 的光照条件下, $0.189 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ 处测得的比探测率和外量子效率分别为 $3.00 \times 10^{12} \text{ Jones}$ 和 89%。

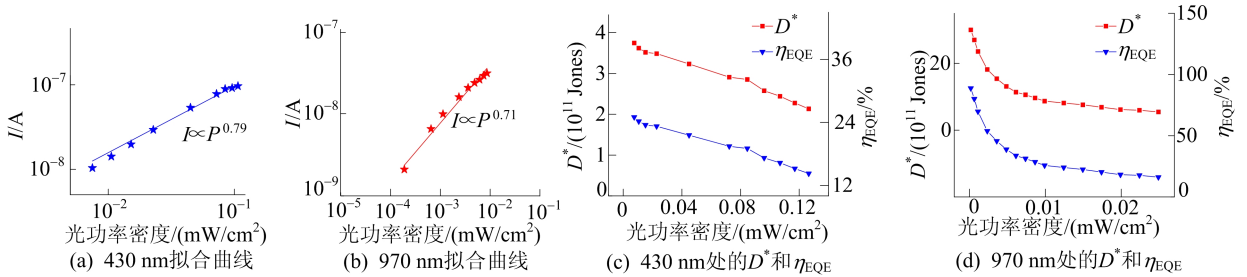


图 5 SiNW array/MAPbI₃ 异质结各光响应特性曲线

500 Hz 光脉冲下器件的开关特性曲线如图 6 所示。

从图 6a 可以看出,电流的上升和下降较为陡峭,表明器件具有快速的光响应能力。将单个周

期放大得到图 6b,可以看出,其上升时间 τ_r 和下降时间 τ_f 分别为 $620 \mu\text{s}$ 和 $490 \mu\text{s}$ 。快速的瞬态响应时间表明,器件中产生的载流子在 SiNW array/MAPbI₃ 异质结里被迅速分离,且载流子在

SiNW 的一维传输通道中可以被电极快速收集,从而实现快速的光响应特性。

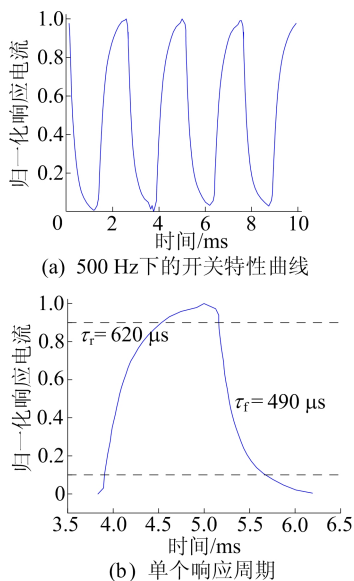


图 6 500 Hz 光脉冲下器件的开关特性曲线

3 结 论

本文采用一种简单低成本的方法,制备了具有核壳结构的 SiNW array/MAPbI₃ 晶膜 p-n 异质结的宽波段光电探测器。该器件具有从可见光到近红外光的宽光谱响应,并且在 430 nm 和 970 nm 波长处分别测得了光响应峰值。在 0 V 偏压、430 nm 和 970 nm 光照下的最大响应度可达 87 mA/W 和 694 mA/W,最大比探测率可达 3.75×10^{11} Jones 和 3.00×10^{12} Jones。这两个峰值产生的原因是在核壳结构异质结中,高折射率的 SiNW 与涂覆的钙钛矿层组成了类似阶跃型折射率光纤结构,当满足条件的入射光高阶引导模式转变为泄漏模式时,光场能量将从纤芯泄漏到包层中,从而增强了光吸收。

该研究证实了核壳结构异质结中存在的泄漏模式,并可调谐入射光的吸收。这一研究成果为提升硅基器件的光学吸收提供了新思路,在未来的光电器件中具有较大的应用潜力。

【参 考 文 献】

[1] 李忠,唐安江,唐石云,等. 硅纳米线太阳能电池研究进展[J]. 化工新型材料,2022,50(3):64-68.

[2] 刘晓轩,孙飞扬,吴颖,等. 硅纳米线阵列光电探测器研究进展[J]. 物理学报,2023,72(6):52-66.

[3] Mokkapati S, Saxena D, Tan H H, et al. Optical design of nanowire absorbers for wavelength selective photodetectors[J]. Scientific Reports, 2015, 5:15339.

[4] Fountaine K T, Whitney W S, Atwater H A. Resonant absorption in semiconductor nanowires and nanowire arrays: relating leaky waveguide modes to Bloch photonic crystal modes[J]. Journal of Applied Physics, 2014, 116:153106.

[5] Cao L Y, White J S, Park J S, et al. Engineering light absorption in semiconductor nanowire devices[J]. Nature Materials, 2009, 8:643-647.

[6] Wang B, Leu P W. Tunable and selective resonant absorption in vertical nanowires[J]. Optics Letters, 2012, 37: 3756-3758.

[7] Grancini G, Marras S, Prato M, et al. The impact of the crystallization processes on the structural and optical properties of hybrid perovskite films for photovoltaics[J]. Journal of Physical Chemistry Letters, 2014, 5(21):3836-3842.

[8] Fang Y J, Dong Q F, Shao Y C, et al. Highly narrowband perovskite single-crystal photodetectors enabled by surface-charge recombination[J]. Nature Photonics, 2015, 9(10): 679-686.

[9] Guo X C, Hao N H, Guo D Y, et al. β -Ga₂O₃/p-Si heterojunction solar-blind ultraviolet photodetector with enhanced photoelectric responsivity[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2016, 660:136-140.

[10] Song Z, Liu Y, Wang Q, et al. Self-powered photodetectors based on a ZnTe-TeO₂ composite/Si heterojunction with ultrabroadband and high responsivity[J]. Journal of Materials Science, 2018, 53:7562-7570.

[11] Huang Z, Fang H, Zhu J. Fabrication of silicon nanowire arrays with controlled diameter, length and density[J]. Advanced Materials, 2007, 19:744-748.

[12] Yu J, Yan Q, Shen D. Co-self-assembly of binary colloidal crystals at the air-water interface[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2010, 2(7):1922-1926.

[13] Wang Y, Ding K, Sun B, et al. Two-dimensional layered material/silicon heterojunctions for energy and optoelectronic applications[J]. Nano Research, 2016, 9:72-93.

[14] Xie C, Wang Y, Zhang Z X, et al. Graphene/semiconductor hybrid heterostructures for optoelectronic device applications[J]. Nano Today, 2018, 19:41-83.

[15] Xue L L, Timoteo M S B, Qiu W W, et al. Ultra-broadband optical filter based on chirped long-period fiber grating using leaky mode coupling[J]. Optoelectronics Letters, 2022, 18:577-582.

(责任编辑 胡亚敏)