

补充材料:

具有快响应速度和低暗电流的垂直 MSM 型 CsPbBr₃

薄膜光电探测器

程学明¹⁾ 崔文字¹⁾ 祝鲁平¹⁾ 王霞¹⁾ 刘宗明¹⁾ 曹丙强^{1,2)†}

1) (济南大学材料科学与工程学院, 山东济南 250022)

2) (核芯光电科技有限公司, 山东枣庄 277299)

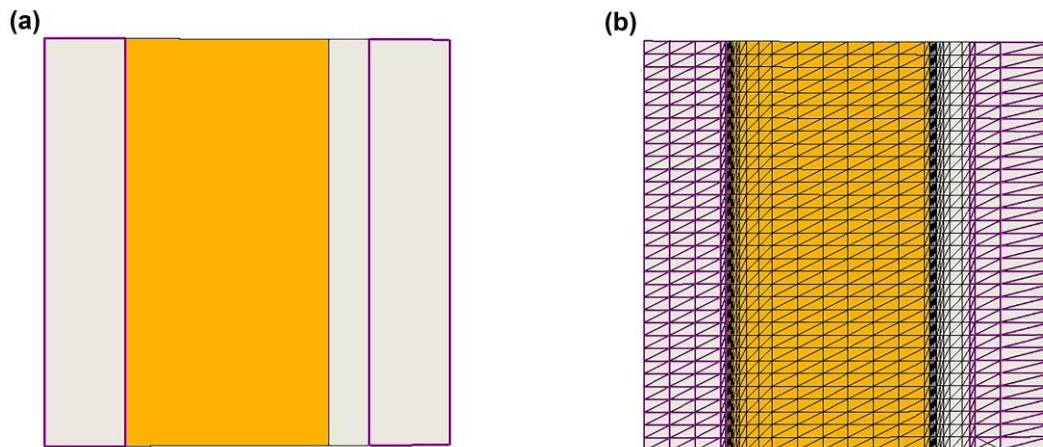
S1 使用 Sentaurus TCAD 模拟光电探测器的流程

1.1 搭建器件几何结构

按照实验中 CsPbBr₃ 光电探测器的制作工艺尺寸, 使用 Sentaurus Device edite(SDE)工具构筑器件三维结构, 同时规定器件各部分的材料.

1.2 网格划分

在 Sentaurus TCAD 仿真中, 网格是有限元分析计算的基本单元, 网格是否合理规划会严重影响仿真结果, 如果网格划分太大, 仿真结果误差会很大, 但如果网格划分十分密集, 仿真会十分耗时, 降低了仿真效率. 因此, 设置合理的网格是仿真成功的关键一步, 建模如下图所示.



(a) 使用 Sentaurus TCAD 的建立的垂直 MSM 型 CsPbBr₃ 薄膜探测器的几何模型图;

(b) 网格划分图.

(a) Geometric model diagram of the vertical MSM-type CsPbBr₃ thin-film detector constructed using Sentaurus TCAD; (b) Mesh partitioning diagram.

1.3 材料参数

由于在 Sentaurus TCAD 材料库中没有 CsPbBr₃、TiO₂ 和 NiO_x 材料参数, 所以在仿真之前需要在 Parameter 中手动输入材料参数用于物理计算.

表 1 CsPbBr₃ 薄膜的材料参数.

Table 1 Material parameters of CsPbBr₃ thin films.

Parameter	CsPbBr ₃
Relative permittivity	22
Energy gap(eV)	2.37
Electron affinity(eV)	3.71
CB effective density of states(cm ⁻³)	1.77×10 ¹⁸
VB effective density of states(cm ⁻³)	1.79×10 ¹⁸
Electron/Hole mobility(cm ² /Vs)	50/50
SRH life time(e/h) (s ⁻¹)	3×10 ⁻⁹ /3×10 ⁻⁹
Radiative recombination coefficient	2×10 ⁻¹⁰
Auger recombination coefficient(e/h)	1×10 ⁻²⁸ /1×10 ⁻²⁸

表 2 TiO₂ 薄膜的材料参数.

Table 2 Material parameters of TiO₂ thin films.

Parameter	TiO ₂
Relative permittivity	46
Energy gap(eV)	3.2
Electron affinity(eV)	4.0
CB effective density of states(cm ⁻³)	2.2×10 ¹⁸
VB effective density of states(cm ⁻³)	1.8×10 ¹⁸
Electron/Hole mobility(cm ² /Vs)	20/10
SRH life time(e/h) (s ⁻¹)	1×10 ⁻⁵ /1×10 ⁻⁶

表 3 NiO_x 薄膜的材料参数.Table 3 Material parameters of NiO_x thin films.

Parameter	NiO _x
Relative permittivity	11
Energy gap(eV)	3.8
Electron affinity(eV)	1.7
CB effective density of states(cm ⁻³)	2.5×10 ¹⁸
VB effective density of states(cm ⁻³)	2.8×10 ¹⁸
Electron/Hole mobility(cm ² /Vs)	2.8/12
SRH life time(e/h) (s ⁻¹)	1×10 ⁻⁶ /1×10 ⁻⁶

1.4 建立物理模型和数值求解

在 Sentaurus device(Sdevice) 中我们需要引入 Fermi 模型, Nibandgapnarrowing 模型, Constant 迁移率模型, 缺陷模型, SRH 复合模型, 辐射复合模型, Auger 复合模型以及电极边界条件的定义. 在确定边界条件以后, 使用牛顿迭代计算的方法求解泊松方程、连续性方程, 完成模拟.