Study of the Effect of Photogenerated Carrier Complexes on the Spectral Response Characteristics of Detectors*

LI Qing[1*], DING Yijing[1], Fayemi Omolola E.[2], GU Yu[3],
BIAN Yadong[3], ZHOU Jianming[4], LEI Wei[1]

(1.Joint International Cooperation Research Laboratory of Information Displayand Visualization, School of Electronic Science and Engineering, Southeast University, Nanjing Jiangsu 210018, China; 2.Department of Chemistry, Faculty of Natural and Agricultural Sciences, North-West University (Mafikeng 5 Campus), Private Bag X2046, Mmabatho 2735, South Africa; 3.Nanjing Perlove Medical Equipment Co., Ltd., Nanjing Jiangsu 211111, China; 4.Suzhou Yi He Photoelectron Science and Technology Ltd., Suzhou Jiangsu 215100, China)

Abstract: In the context of broad-spectrum photodetection, the detection performance in terms of responsivity and detectivity has garnered significant attention. Consequently, the design of detectors emphasizes the investigation of physical processes such as photon absorption and photogenerated carrier drift. In broad-spectrum, narrow-band and other spectral detection, it is crucial for the detector to differentiate response signals from various wavelength channels. One effective approach to achieve this is through the composite of photogenerated carriers. This study employs numerical simulation to examine the energy band structure and electric field strength distribution of heterojunction detectors, followed by an analysis of the composite process of photogenerated carriers. By the design of the electron affinity potential of different semiconductor layers of the detector, the composite of photogenerated carriers is utilized to regulate the detection signals of different wavelength channels. As a result, a pronounced nonlinearity is observed in the spectral response characteristics of the detector under different bias voltages. Through the design of a four-layer sensor, bandgap distribution of 3.09 eV/2.51 eV/1.94 eV/1.36 eV and electron affinity potential of 3.09 eV/3.42 eV/3.71 eV/4.07 eV were obtained. Compared to a single-bandgap PIN photodiode, the optimized four-layer sensor demonstrated a notable reduction in the correlation coefficient of its spectral response curve, dropping from 0.99 to 0.56. The research findings presented in this paper provide a foundation for effectively acquiring detection signals in subsequent spectral information reconstruction.

Key words: photodetector; photogenerated carrier complex; numerical simulation; spectral response; incident light absorption
EEACC: 2560B **doi**: 10.3969/j.issn.1004-1699.2025.06.001

光生载流子复合对探测器光谱响应特性的影响研究*

李 青[1*], 丁奕婧[1], Fayemi Omolola E.[2], 谷 宇[3], 卞亚东[3], 周建明[4], 雷 威[1]

(1.东南大学电子科学与工程学院, 信息显示与可视化国际合作联合实验室, 江苏 南京 210018;
2.Department of Chemistry, Faculty of Natural and Agricultural Sciences, North-West University (Mafikeng 5 Campus), Private Bag X2046, Mmabatho 2735, South Africa;
3.南京普爱医疗设备股份有限公司, 江苏 南京 211111, 4.苏州奕赫光电子科技有限公司, 江苏 苏州 215100)

摘 要: 在宽谱光电探测过程中, 人们通常关注探测响应度和比探测度等性能, 因此在探测器的设计中重点研究入射光子的吸收和光生载流子的漂移等物理过程。在宽谱探测、窄带探测等光谱探测中需要探测器区分不同波长通道的响应信号, 光生载流子复合是调控不同光谱通道探测信号的重要手段。通过数值仿真的方法研究了异质结探测器的能带结构和电场强度分布, 进而分析了光生载流子的复合过程。通过对探测器不同半导体层电子亲和势的设计, 利用光生载流子复合调控不同波长通道的探测信号, 最终使得不同偏置电压下探测器光谱响应特性呈现出较大的非线性。通过对四层传感器的设计, 获得带隙分布为 3.09 eV/2.51 eV/1.94 eV/1.36 eV, 电子亲和势为 3.09 eV/3.42 eV/3.71 eV/4.07 eV。与单带隙的 PIN 光电二极管相比较, 优化后的四层传感器的光谱响应曲线的相关性系数从 0.99 降低到 0.56。该研究成果为后续光谱信息重构获得有效探测信号提供了保障。

关键词: 光电探测器; 光生载流子复合; 数值仿真; 光谱响应; 入射光吸收
中图分类号: TL816+.1 **文献标识码**: A **文章编号**: 1004-1699(2025)06-0955-08

项目来源: 国家重点研究计划国际合作专项项目(2021YFE0105900, 2022YFE0139100); 南非-中国国际合作项目(UID: 132796); 国家自然基金项目(62175028, 51879042, 61674029); 江苏省国际合作项目(BZ2022008); 国家 111-2.0 引智计划项目(BP0719013)
收稿日期: 2023-08-11 **修改日期**: 2023-10-12

利用半导体光电效应将入射光的能量转换为电信号,并通过读出电路将探测信号输出是人们实现光电探测的常用方法[1-3]。一般来说,当入射光的光子能量大于半导体带隙,入射光子能量被半导体材料所吸收,部分价带电子跃迁到导带,形成光生电子/空穴对[4-6]。如果探测器中有适当的偏置电场,光生电子/空穴对会在偏置电场作用下产生分离,并通过漂移和扩散运动形成探测电流[7-8]。因此,在设计宽谱光电探测器时主要关注选择合适的活性材料带隙,提高光电转换的内量子效率。同时,通过对 PN 结或者 PIN 结的设计,提高光电探测的外量子效率,并降低暗电流和噪声。

除了宽谱探测以外,窄带探测和光谱探测也有大量应用[9-11]。为了提高探测器的集成度,近年来大量的研究工作报道了不采用滤光片或者色散光学元件的窄带和光谱探测方案。一些研究团队提出通过缺陷设计,增加部分区域的缺陷密度,进而通过增加载流子复合抑制短波光子产生的响应信号,从而获得窄带探测性能[12-13]。还有文献报道通过不同带隙的半导体材料组合以及载流子复合调控,利用一系列非相关宽谱探测响应重构入射光谱信息,获得无色散光学原件的多光谱或者超光谱探测[14-15]。虽然这些研究工作展示了通过对光生载流子复合的调控可以一定程度上影响探测器的光谱响应特性,但是对光生载流子复合的调控机制和光谱响应曲线的影响规律尚无系统的研究及成果报道。

本文在前期利用能量带隙梯度分布活性材料吸收宽谱入射光子的研究基础上,通过数值仿真的方法研究了异质结势垒和电场强度分布等对光生载流子复合率的影响,进而获得了光生载流子复合对探测器光谱响应特性的影响规律。

1 计算模型和理论

1.1 器件模型

本文通过数值计算分析 PIN 光电二极管的光谱响应特性,其计算模型如图 1 所示。

在图 1 所示模型中,含有不同波长分量的入射光从探测器左端入射。探测器左端是一个 P 型层,它的带隙为 E_{g1};P 型层后面是两个本征层,其能量带隙分别为 E_{g2} 和 E_{g3};本征层后面是一个 N 型层,其能量带隙为 E_{g4}。上述半导体层带隙从大到小梯度变化,即 $E_{g1} \geqslant E_{g2} \geqslant E_{g3} \geqslant E_{g4}$。为了使探测器与入射端和出射端电极欧姆接触,我们在 P 型层和 N 型层两端还分别设置了厚度很薄的重掺杂 P^+ 和 N^+层。

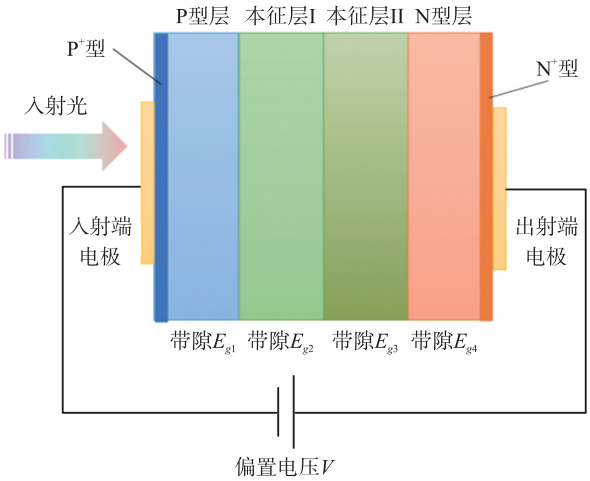


图 1 pin 光电二极管计算模型

由于量子点和纳米晶材料具有量子效应,通过调控纳米材料的尺度可以改变材料的带隙。因此,通过量子点/纳米晶叠层构建能量带隙梯度分布的活性材料层具有很好的技术和成本优势。人们一般通过溶液法制备胶体量子点和纳米晶,并采用旋涂和喷墨打印等方法沉积量子点和纳米晶薄膜。根据这些薄膜沉积方法的技术特点,本文在计算过程中不失一般性假设每一个半导体层的厚度为 10 μm,重掺杂层厚度为 0.1 μm。各个半导体层的能量带隙分别为 3.09 eV、2.51 eV、1.94 eV 和 1.36 eV。入射光波长范围 400 nm~900 nm。本文通过调控各个半导体层的电子亲和势改变半导体层之间的势垒,并分析探测器的光谱响应特性。

1.2 理论模型

本文研究主要涉及入射光吸收、光生载流子产生、载流子漂移和扩散,以及载流子复合等物理过程[16-17]。当能量为 $h\omega_0$ 的光子入射到半导体,光子能量被吸收导致价带电子从价带跃迁到导带的速率(1/m³/s)用式(1)计算:

$$G_{h\omega_0}^{1\to 2} = \iiint \frac{2\pi}{h} |H_{12}^{\mathrm{av}}|^2 g(k) f_v (1-f_c) \delta(E_{2c}-E_{1v}-h\bar{\omega}_0) \mathrm{d}^3 k \tag{1}$$

式中:$H_{12}^{\mathrm{av}} = \int \psi_2^* H' \psi_1 \mathrm{d}^3 x$,$\psi$ 是波函数,H'是 Hamiltonian 算子的导数,$g(k)$是 k 空间态密度,f_c 和 f_v 是导带和价带的电子填充因子,E_{2c}是状态 2 的导带底,E_{1v} 是状态 1 的价带顶,$\delta(E_{2c}-E_{1v}-h\bar{\omega}_0)$是一个 delta 函数,$d^3k$ 表示一个三维体积分。入射光所产生的部分光生载流子还有可能在探测器中重新复合,光生载流子的复合速率通过式(2)计算:

$$R_{h\omega_0}^{2\to 1} = \iiint \frac{2\pi}{h} |H_{12}^{\mathrm{av}}|^2 g(k) f_c (1-f_v) g_{\mathrm{red}}(h\bar{\omega}_0) \mathrm{d}^3 k \tag{2}$$

式中:函数 g_{red} 由式(3)计算:

$$g_{red}(E)=\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_r}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{(E-E_g)} \tag{3}$$

探测器的电位分布通过 Poisson 式(4)获得:

$$\nabla\cdot(-\varepsilon_r\nabla V)=\rho \tag{4}$$

式中:ε_r 是相对介电常数,ρ 是空间电荷密度。电场强度则可以表示为电位的梯度 $\boldsymbol{E}=-\nabla V$。电子电流密度 J_n 和空穴电流密度 J_p 则可以表示为:

$$J_n=qn\mu_n\nabla E_c+\mu_n k_B TG(n/N_c)\nabla n+qnD_{n,th}\nabla\ln(T)$$
$$J_p=qp\mu_p\nabla E_v-\mu_p k_B TG(p/N_v)\nabla p-qpD_{p,th}\nabla\ln(T) \tag{5}$$

式中:n、p 分别是电子和空穴浓度,μ_n 和 μ_p 是电子和空穴的迁移率,E_c 和 E_v 是导带底和价带顶能量,N_c 和 N_v 是导带和价带态密度。

根据前面所讨论的理论模型,本文采用 MATLAB 编制程序分析探测器光子吸收物理过程,并结合 Comsol 软件对光生载流子的复合和输运进行分析,最后获得不同类型的光电探测器的光谱响应性能。

2　探测器光谱响应特性分析

2.1　异质结的内建电场

如前所述,为了获得更多的光谱响应信息,在图 1 所示的探测器结构中,采用 4 层带隙梯度分布的半导体材料作为光子吸收体。在实际探测器制备过程中,可以通过改变多元半导体材料的元素占比调控带隙。例如,通过调控铅卤钙钛矿中卤素元素占比,可以使得钙钛矿晶体的能量带隙从 2.89 eV 减小到 1.49 eV[18]。为了分析带隙梯度分布的 4 层半导体层中光生载流子的复合过程,本文首先研究 2 层材料构成的异质结的内建电场。图 2 所示是零偏置电压计算得到的平衡状态下异质结的能带结构和空间电荷密度分布。从图中可以看出,为了维持异质结的载流子动态平衡,在结区也存在和 PN 结类似的空间电荷分布,如图 3 所示。

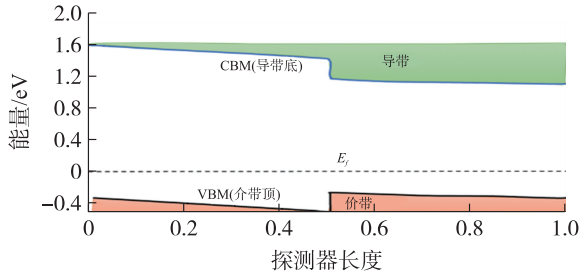
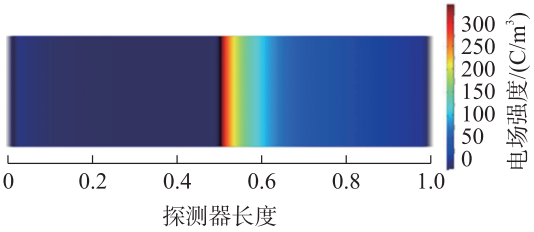
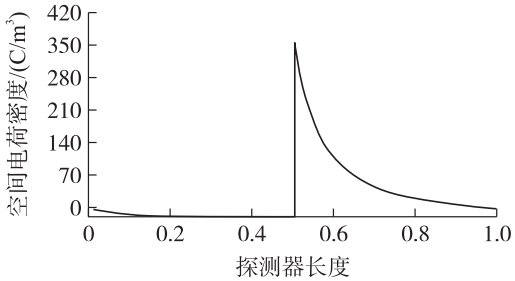


图 2　异质结能带结构



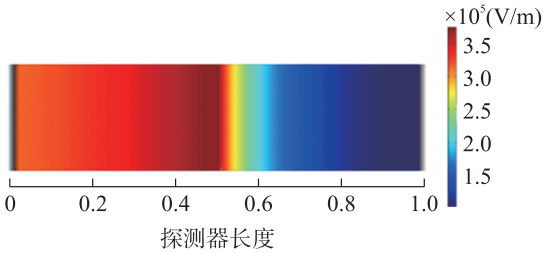
(a) 空间电荷密度二维空间分布



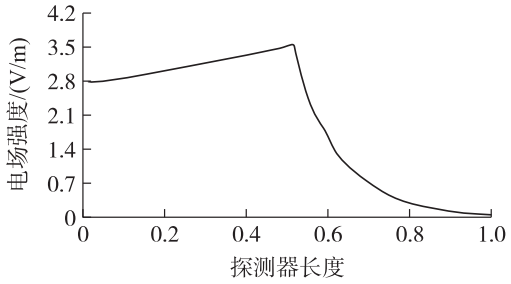
(b) 空间电荷密度沿探测器深度分布

图 3　异质结空间电荷密度分布

由于异质结中存在空间电荷密度分布,根据式(4),异质结中也存在内建电场。图 4 是计算得到的异质结内建电场分布。从该内建电场分布图可以看出来,在宽带隙区域异质结内建电场比较高,窄带隙区域内建电场较低。在 PN 型二极管中内建电场主要集中在结区,它与异质结内建电场分布存在很大不同。



(a) 异质结内建电场二维空间分布



(b) 异质结内建电场沿探测器深度分布

图 4　零偏置电压下异质结内建电场分布

2.2　四层异质结的光谱响应特性

本文针对图 1 所示的四层结构光电二极管计算其光谱响应特性。计算过程中主要使用的能带结构参数如图 5 所示。

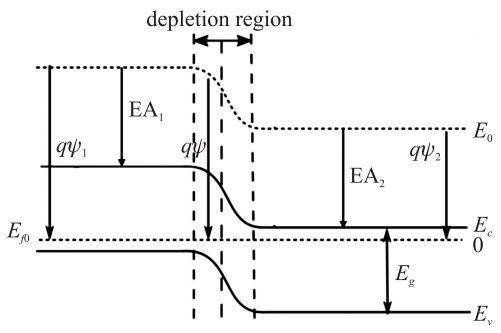


图 5　数值计算中使用的能带结构参数

在图 5 所示的能带结构参数中，E_0，E_c，E_v 分别是真空能级、导带底能级（CBM）、价带顶能级（VBM），E_{f0}是费米能级；E_g 是能量带隙，$q\psi$ 是功函数，EA 是电子亲和势。在本文的数值计算中，结合前期实验制备钙钛矿单晶的能带表征结果，四层半导体层的能量带隙分别为 3.09 eV、2.51 eV、1.94 eV 和 1.36 eV。其中 P 型层和 N 型层的掺杂浓度为 $10^{15}/cm^3$，P^+和 N^+层掺杂浓度为 $10^{18}/cm^3$。在计算中改变偏置电压 V_{bias}和电子亲和势 EA 的值，计算探测器光谱响应特性的变化。

入射光从左向右照射到探测器后，首先是入射光子通过光电效应被半导体材料所吸收，并产生光生载流子。从式（1）可以看出，光生载流子的产生率决定于能量带隙 E_g 和导带/价带的态密度，与电子亲和势和偏置电压无关。图 6 所示是计算得到的不同波长入射光形成的光生载流子产生率。

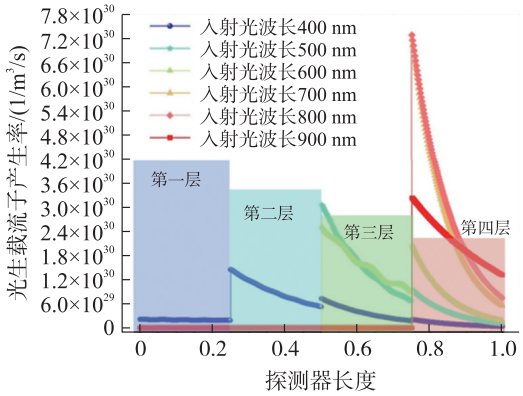


图 6　四层异质结的光生载流子产生率

从图 6 所示的光生载流子产生率曲线可以看出，波长 400 nm 的短波入射光穿透深度比较强，光生载流子主要产生在第二层、第三层和第四层半导体；随着入射光波长的增加，宽带隙半导体对入射光几乎透明，长波入射光主要被第三层和第四层半导体所吸收。从图中还可以看出，虽然波长 700 nm、800 nm 和 900 nm 的入射光所产生的光生载流子都集中在第四层区域，但是波长 900 nm 入射光所产生的光生载流子明显少于波长 700 nm 和 800 nm 的入射光，这是因为 900 nm 入射光的光子能量和第四层半导体带隙不是最好的匹配。

本文计算了四种不同电子亲和势的探测器结构，第一种结构中不同半导体层电子亲和势分别为 3.26 eV/3.54 eV/3.83 eV/4.07 eV，第二种结构中电子亲和势为 3.21 eV/3.49 eV/3.78 eV/4.07 eV，第三种结构中电子亲和势为 3.16 eV/3.44 eV/3.73 eV/4.07 eV，第四种结构中电子亲和势为 3.09 eV/3.42 eV/3.71 eV/4.07 eV。图 7 所示是计算得到的四种探测器结构下光谱响应曲线，为了便于比较，我们将只有一个能量带隙的探测器作为参考器件，其光谱响应特性也在图 7（a）中给出。表 1 给出了图 7 中不同探测器结构的光谱响应曲线相关性系数。

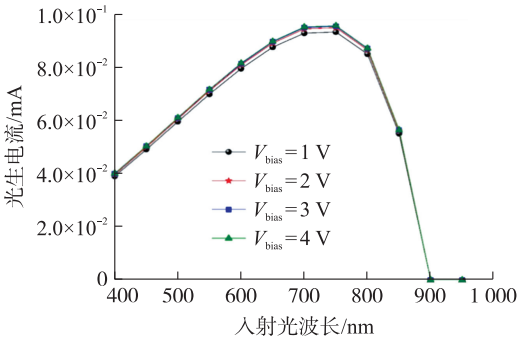
表 1　探测器偏置电压与光谱响应曲线相关性系数

	参考探测器	第一种探测器结构	第二种探测器结构	第三种探测器结构	第四种探测器结构
光谱响应曲线相关性系数	0.99	0.86	0.79	0.65	0.56

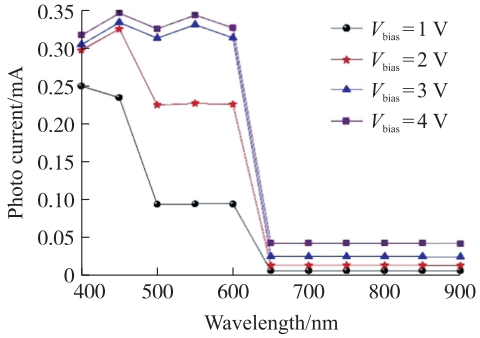
从图 7（b）~图 7（e）中可以看出，探测器结构 1~探测器结构 4 的光谱响应曲线有很大的变化。如表 1 所示，这四种探测器的光谱响应曲线相关性系数从 0.86 下降到 0.56。根据光生载流子产生率的计算式（1）以及图 6 所示的光生载流子产生率曲线，可以看出入射光的吸收和光生载流子的产生与半导体层的电子亲和势没有直接关系。因此，图 7 所示的不同探测器结构中光谱响应曲线的变化可能由于光生载流子的复合存在差异。

光电探测器中光生载流子的漂移和复合决定于探测器能带结构和电场分布，为了分析不同探测器结构中光生载流子的复合情况，本文首先分析改变半导体层电子亲和势后探测器能带结构和电场分布。为了简化讨论和分析，这里将探测器结构 1 和探测器结构 4 的能带、电场和光生载流子复合率进行对比。图 8 给出了入射光波长为 400 nm、偏置电压为 1 V 情况下，探测器结构 1 和探测器结构 4 的能带分布。

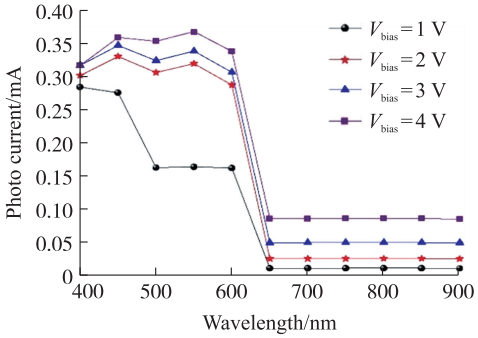
从图 8 可以看出，因为电子亲和势变化量很小，所以探测器结构 1 和探测器结构 4 的导带、价带以及费米能级等变化不大。为了分析光生载流子复合情况，图 9 和图 10 进一步给出了短波入射光（波长为 400 nm）和长波入射光（波长为 900 nm）照射下探测器的电场强度分布。



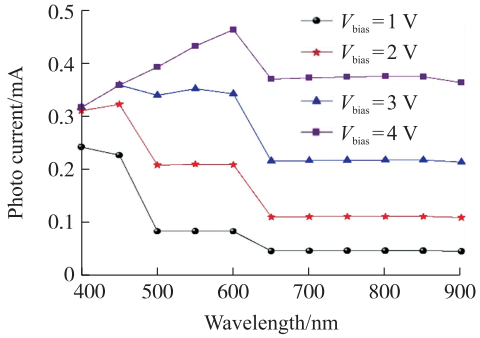
(a) 参考探测器, 只有单一的能量带隙



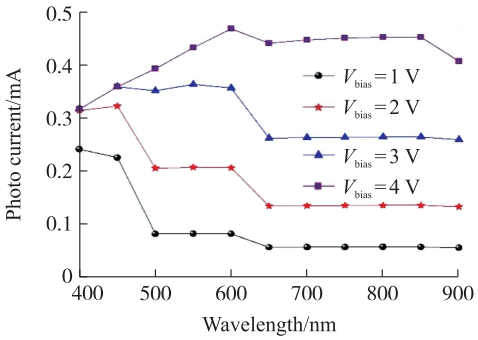
(b) 第一种探测器结构, 半导体层的电子亲和势为3.26 eV/3.54 eV/3.83 eV/4.07 eV



(c) 第二种探测器结构, 半导体层的电子亲和势为3.21 eV/3.49 eV/3.78 eV/4.07 eV

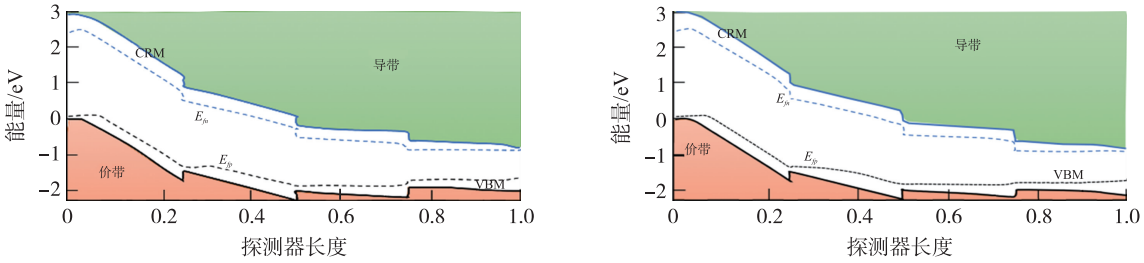


(d) 第三种探测器结构, 半导体层的电子亲和势为3.16e V/3.44 eV/3.73 eV/4.07 eV



(e) 第四种探测器结构, 半导体层的电子亲和势为3.09 eV/3.42 eV/3.71 eV/4.07 eV

图 7　不同探测器结构的光谱响应特性



(a) 探测器结构1　　(b) 探测器结构4

图 8　偏置电压为 1 V、入射光波长为 400 nm 时探测器能带结构

从图 9 可以看出,400 nm 的短波入射光照射时,探测器结构 1 和探测器结构 4 的电场分布很相近。只是在探测器结构 4 中第二个半导体层的电场强度有所降低,这是因为探测器结构 4 中电子亲和势的变化引起第二半导体层空间电荷密度改变造成的。但是当 900 nm 的长波入射光照射时,探测器结构 1 和探测器结构 4 的电场强度分布则有明显变化,如图 10 所示。首先,在探测器结构 1 中,波长 900 nm 入射光照射后电场强度幅值明显降低,而且第一半导体层、第二半导体层和第三半导体层的电

场强度很接近(如图 10(a)所示),这是因为波长 900 nm 的入射光主要被第四层半导体所吸收。波长 900 nm 的入射光照射到探测器结构 4,虽然其电场强度比 400 nm 短波入射光照射时有所降低,但是仍然明显高于探测器结构 1,而且第一、二、三层半导体存在较大的电场强度差(如图 10(b)所示)。这是因为探测器结构 4 中由于电子亲和势的影响,空间电荷密度分布比探测器结构 1 更加集中,导致电场强度变化更大,这种变化有利于长波入射光产生的光生载流子的收集。图 11 和图 12 给出了不同偏置电压下探测器结构 1 和探测器结构 4 的光生载流子复合率。

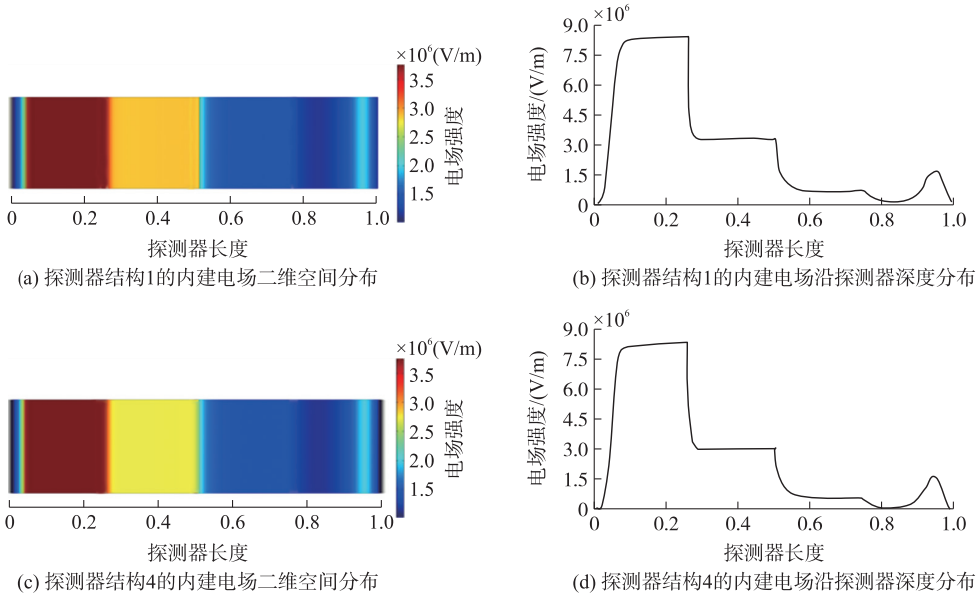


图 9 偏置电压为 1 V、入射光波长为 400 nm 时探测器的电场分布

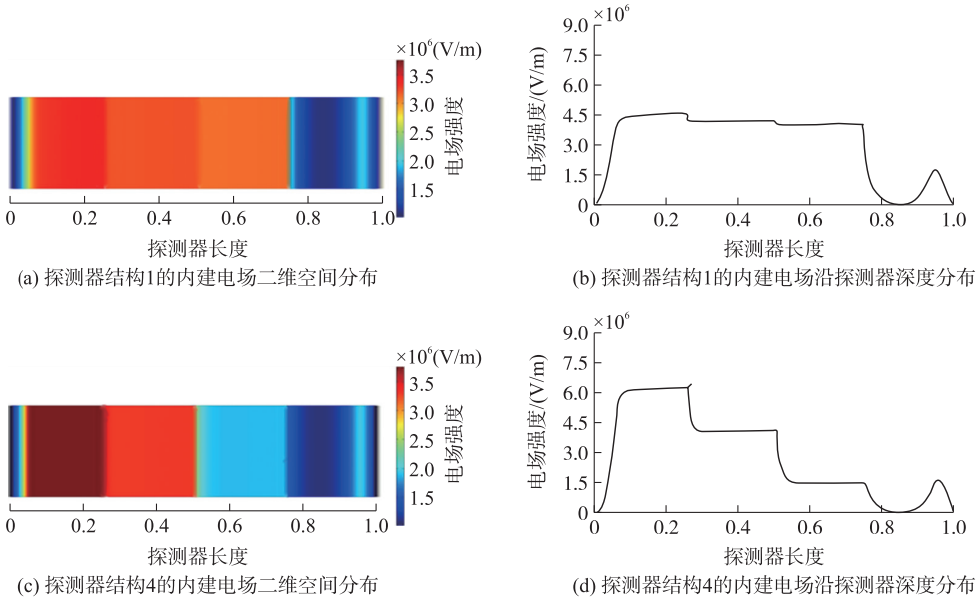
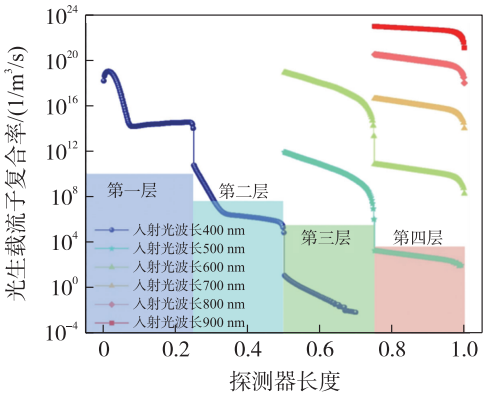
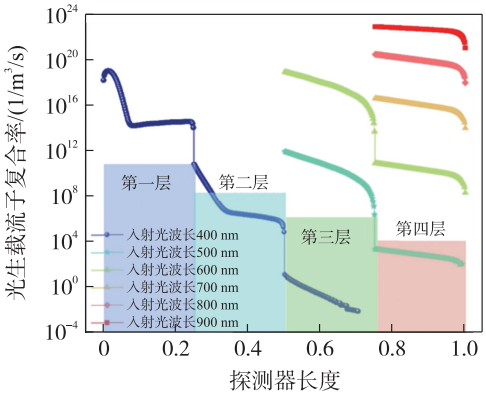


图 10 偏置电压为 1 V、入射光波长为 900 nm 时探测器的电场分布

从图 11 和图 12 所示的光生载流子复合率曲线可以看出,光生载流子的复合区域与图 6 所示的光生载流子产生区域存在对应关系,短波 400 nm 入射光产生的光生载流子主要复合区域在第一、二、三层半导体,长波 700 nm、800 nm、900 nm 入射光的光生载流子复合则在第四层半导体。如图 11 所示,当偏置电压比较低(1 V)时,探测器结构 1 和结构 4 各个半导体层光生载流子的复合率几乎相等。但是当偏置电压升高到 4 V 时,不同探测器对于波长 700 nm、800 nm、900 nm 入射光的光生载流子复合则存在明显差异。在探测器结构 4 中长波入射光所产生的光生载流子复合率明显降低,对应到图 7(e)中高偏置电压下长波入射光产生的光电响应明显增大。

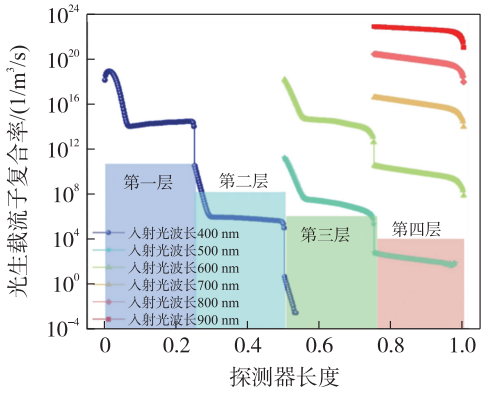


(a) 探测器结构1

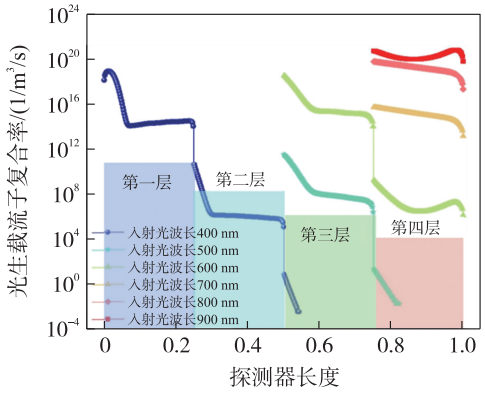


(b) 探测器结构4

图 11　偏置电压为 1 V 时光生载流子复合率



(a) 探测器结构1



(b) 探测器结构4

图 12　偏置电压为 4 V 时光生载流子复合率

3　结论

本文通过数值模拟研究了具有带隙梯度分布的四层半导体异质结构的光电探测器的能带结构、电场分布,以及光生载流子产生和复合。从仿真结果可以看出不同波长入射光所产生的光生载流子区域和速率与半导体层的电子亲和势无关,而是决定于半导体层的能量带隙。但是各个半导体层的电子亲和势会影响异质结区的空间电荷密度分布,进而影响探测器的电场强度分布。因此,调控半导体层的电子亲和势可以控制光生载流子的复合速率,最终改变探测器的光谱响应曲线。本文通过对四层异质结探测器电子亲和势的调控,将探测器不同偏置电压下的光谱响应曲线相关性系数从 0.99 下降到 0.56,为波分复用重构光谱探测探索了新的技术道路。

参考文献:

[1] Liu T H, Lin Q J, Ma Y, et al. Multifunctional Organic Vertical Photodiodes for Photo -Detection and Photo-Synapse Enabled by Modulation of the Interface Energy Barrier[J]. Advanced Optical Materials, 2022, 10(21): 2201104.

[2] Li T, Wang J, Gao Z Y, et al. Local Stress Enhanced Photocurrent of Visible Light Photo -Detection in Cs2AgBiBr6 Single Crystal[J]. Applied Physics Letters, 2019, 115(13): 131103.

[3] Mikhelashvili V, Shneider Y, Sherman A, et al. Highly Sensitive Photo -Detectors for the Ultra-Violet Wavelength Range Based on a Dielectric Stack and a Silicon on Insulator Substrate[J]. Applied Physics Letters, 2019, 114(7): 073504.

[4] Islam M M, Dev D, Krishnaprasad A, et al. Optoelectronic Synapse Using Monolayer MoS2 Field Effect Transistors[J]. Scientific Reports, 2021, 10(1): 21870.

[5] Moger S N, Mahesha M G. Effect of Indium Doping on the Optoelectronic Properties of ZnSe Films[J]. Thin Solid Films, 2022, 760(1): 139492.

[6] Fraih A J, Alzubaidy M H J. The Effect of Graphene Layers on the Optoelectronic Properties of Graphene-Silicon Photodetector[J]. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 2023, 34(19): 1481.

[7] Chang C, Xie X P, Li T T, et al. Configuration of the Active Region for the Ge-on-Si Photodetector Based on Carrier Mobility[J]. Frontiers in Physics, 2023, 11(1): 1150684.

[8] Chaudhuri S K, Nag R, Mandal K C. Self-Biased Mo/n-4H-SiC Schottky Barriers as High-Performance Ultraviolet

Photodetectors[J]. IEEE Electron Device Letters,2023,44(5):733-736.

[9] 桂裕华,李津宁,王梅竹,等. 月球及火星探测任务中光谱技术研究与应用[J]. 红外与毫米波学报,2022,41(1):74-84.

[10] 薛庆生,白皓轩,李辉,等. 水下高光谱成像探测技术研究进展[J]. 光子学报,2021,50(12):9-34.

[11] 谈小超,易飞. 基于光学天线的多光谱窄带热探测器及其应用[J]. 飞控与探测,2021,4(2):36-50.

[12] Wang J, Xiao S, Qian W, et al. Self-Driven Perovskite Narrowband Photodetectors with Tunable Spectral Responses[J]. Advanced Materials,2021,33(3):2005557.

[13] Li J Z,Wang J,Ma J Q,et al. Self-Trapped State Enabled Filterless Narrowband Photodetections in 2D Layered Perovskite Single Crystals [J]. Nature Communications, 2019,10(1):806.

[14] Yang Z Y, Albrow-Owen T, Cui H X, et al. Single-Nanowire Spectrometers[J]. Science,2019,365(6457):1017-1020.

[15] Wang Z,Yi S,Chen A,et al. Single-Shot on-Chip Spectral Sensors Based on Photonic Crystal Slabs [J]. Nature Communications,2019,10(1):1020.

[16] Chuang S L. Physics of Photonic Devices[M]. 2nd Edition. Hoboken,NJ,USA:John Wiley and Sons Inc,2009:323-334.

[17] Yariv A. Optical Electronics in Modern Communication [M]. 5th Ed. Oxford,UK:Oxford University Press,1997,128-135.

[18] Wang X, Li Y W, Xu Y B, et al. Solution-Processed Halide Perovskite Single Crystals with Intrinsic Compositional Gradients for Xray Detection[J]. Chemistry of Materials,2020,32(12):4973-4983

李 青(1964—),女,教授,博导,现就职于东南大学信息显示与可视化国际联合实验室,主要从事物理电子学及显示电子学领域研究,liqing@ seu.edu.cn。