

分类号 _____

密级 _____

UDC _____

编号 _____

中国科学院研究生院 博士学位论文

钙钛矿氧化物异质结光电效应的理论研究

廖 棱

指导教师

金奎娟 研究员

中国科学院物理研究所

申请学位级别 理学博士 学科专业名称 凝聚态物理

论文提交日期 2009 年 4 月 论文答辩日期 2009 年 5 月

培养单位 中国科学院物理研究所

学位授予单位 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 张国义

目 录

摘 要	I
ABSTRACT.....	III
第一章 绪 论.....	1
1.1 研究意义.....	1
1.2 钙钛矿氧化物中的光诱导效应.....	5
1.2.1 光致金属-绝缘体相变.....	5
1.2.2 光致的持续光电导效应	7
1.2.3 光生载流子注入效应	7
1.2.4 光生伏特效应	9
1.3 电输运理论与方法简介.....	11
1.3.1 玻尔兹曼方程	11
1.3.2 漂移-扩散模型	12
1.3.3 流体动力学模型	13
1.3.4 蒙特卡罗方法和路径变量法	14
1.3.5 本文工作所使用的理论模型和算法	15
1.4 本论文的主要研究内容和意义.....	17
本章参考文献	18
第二章 钙钛矿氧化物异质结纵向光电效应.....	25
2.1 引言	25
2.2 物理模型与方法.....	26
2.3 LSMO/SNTO 异质结制备与光伏效应测量介绍.....	29
2.4 LSMO/SNTO 异质结的纵向光伏信号随时间演化过程以及相 应的理论计算结果	29
2.5 LSMO/SNTO 异质结光电效应中的光掺杂效应以及其动态物 理过程	31
2.6 影响 LSMO/SNTO 异质结光电响应的几个因素	35
2.7 小结.....	39
本章参考文献	40
第三章 钙钛矿氧化物异质结的横向光电效应.....	43

3.1 引言	43
3.2 描述稳态横向光电效应的 Lucovsky 模型简介以及对其局限性的讨论	44
3.3 描述横向光电效应的二维含时漂移-扩散模型	49
3.4 含时二维漂移-扩散模型的求解困难以及解决方案	50
3.5 正常的横向光电效应和在钙钛矿氧化物异质结中发现的反常横向光电效应	52
3.6 Dember 效应	54
3.7 钙钛矿氧化物异质结中反常横向光电效应的理论解释和相应的数值计算结果	55
3.8 电栅现象	60
3.9 小结	61
本章参考文献	62
总结和展望	65
攻读博士学位期间完成的学术论文目录	67
A. 第一作者学术论文	67
B. 合作学术论文	67
C. 会议	68
致 谢	69

钙钛矿氧化物异质结光电效应的理论研究

摘要

在本论文中,我们以含时漂移-扩散模型为基础从理论出发研究了钙钛矿氧化物异质结的动态光电效应,通过自洽计算对钙钛矿氧化物异质结光电效应中出现的物理问题进行了分析和解释。本文的主要工作和取得的结论如下:

1. 在漂移-扩散模型和界面 Richardson 热电子发射模型的基础上发展了一套描述钙钛矿氧化物异质结光电效应动态物理过程的理论模型。并对此模型进行了自洽计算。理论计算所得到的结果同我们实验结果有着很好的符合,这说明我们建立的物理模型适用于描述钙钛矿氧化物异质结光电效应。

2. 在 Sr-doped LaMnO_3 /Nb-doped SrTiO_3 异质结的纵向光电效应的理论计算中,我们特别分析了其中载流子浓度分布随时间的演化过程,发现在光电过程中载流子浓度随时间的变化主要是集中在异质结的空间电荷区内。这说明,随着时间演化,光掺杂效应主要是集中在空间电荷区内,进而说明光对钙钛矿氧化物异质结材料的性质的调控主要集中在空间电荷区。

3. 通过理论计算,我们发现光伏效应的测量电路中并联的电阻越小光电响应的速度就会越快,但是响应的灵敏度又会被降低。我们还分析光子能量对光电响应的影响,发现光子能量越高,所导致的光电响应速度会越快而且灵敏度越高。

4. 分析了传统描述横向光电效应的 Lucovsky 模型的缺陷,解释了为什么这套模型不能描述脉冲强激光条件下产生的横向光电效应。进而我们又以二维含时漂移-扩散模型为基础,首次建立起了一套描述动态横向光电效应的物理模型,并且克服计算中出现的困难,设计出了此模型的数值算法。然后我们又将这套模型应用到了钙钛矿氧化物异质结横向光电效应的理论计算上。

5. 使用二维含时漂移-扩散模型,分析了在 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{MnO}_3/\text{Sr}_{0.99}\text{Nb}_{0.01}\text{TiO}_3$, $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{Si}$ 异质结中发现的反常横向光电效应。并从计算上证实这种反常效应是由强脉冲激光所造成的 Demer 效应产生的。同时我从计算上得到横向光

电效应随着激光强度增强从正常横向光电效应向反常横向光电效应转变的过程,进一步证实了我们对钙钛矿氧化物异质结反常横向光电效应的解释。

关键词: 钙钛矿氧化物, 异质结, 光电效应

Theoretical studies on the photoelectric properties of perovskite oxide heterojunctions

ABSTRACT

In this work, based on the drift-diffusion model, a theoretical model is developed for describing photoelectric effect in perovskite oxide heterojunctions. We solved the equations in this model with the self-consistent calculation. By the calculated results, some phenomena of photoelectric effect in this system are analyzed and explained. The obtained results are listed as follows:

1. We develop a theoretical model to describe the dynamic photoelectric effect in the perovskite oxide heterojunction by drift-diffusion model and the Richardson thermal emission current on the interface and apply self-consistent calculation on these formulas. The obtained theoretical results agree well with the experimental results, which indicate the validness of this model applying on the perovskite oxide heterojunction.
2. The evolution of carriers' concentration in Sr-doped LaMnO_3 /Nb-doped SrTiO_3 heterojunction is analyzed by this model, and it is found that the carriers' variation mainly locates in the space-charge region of heterojunction and there is no pronounced variation in the other region. In other word, the photodoping effect in photoelectric process of perovskite oxide heterojunction is located in the space-charge region, or for a perovskite oxide heterojunction, the modulation of material properties by light is feasible merely in the space-charge region.
3. By theoretical calculation, it is found that, for a perovskite oxide heterojunction, the less is the parallel resistance in the circuit for photovoltage measurement, the faster is the photovoltaic response and the lower is the sensitivity of photovoltaic response. The more powerful energy of photon is irradiated on the

heterojunction, the faster and higher is the photovoltaic response.

4. We analyze the limitation in the classical theoretical model (Lucovsky model) for the lateral photovoltaic effect in *pn* junction and give an explanation why this classic model cannot describe the lateral photovoltaic effect with a pulse laser. Furthermore, based on the 2-dimensional time-dependent drift-diffusion model, we develop a general lateral photovoltaic model, which can describe not only the stable lateral photovoltaic effect but also the dynamic photovoltaic effect with pulse laser.

5. By applying this model, we analyze the novel lateral photovoltaic effect, which is experimentally found in the $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{MnO}_3/\text{Sr}_{0.99}\text{Nb}_{0.01}\text{TiO}_3$, $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{Si}$ heterojunctions. We theoretically prove the explanation that this novel lateral photovoltaic effect is induced by the enhancement of Dember effect in the heterojunction with a strong pulse laser. At same time, it is obtained that the process of the lateral photovoltaic effect evolving from the normal one to the novel one, which give a further confirmation for the explanation that the novel lateral photovoltaic effect is induced by the strong irradiation.

Keywords: Perovskite Oxide, Heterojunction, Photoelectric effect

第一章 绪论

1.1 研究意义

硅半导体的发现以及随后半导体电子学的飞速发展,极大地改变了人们的生产和生活,使整个世界的面貌焕然一新,它的出现是以信息产业为标志的第三次产业革命的基础。现在,半导体器件和技术已被非常广泛地应用于生产和生活的各个领域,满足着人们的各种需要。随着人类社会的发展和进步,特别是现在已经进入信息化时代,光电通信、信息高速公路、微电子技术和计算机技术等高科技产业得到了迅猛发展,同时也对半导体材料和器件,这一现代电子技术的基础,提出了越来越多新的要求。比如往往需要将具有电学、光学、磁学等完全不同物理性质的材料复合、集成在一起,从而开发出具有多功能性能的新型器件。但以锗、硅等为代表的传统半导体材料,由于物理性质较为单一,无法满足这种要求。如图1.1所示,氧化物材料比锗、硅具有更为丰富的物理性质,从而有望满足并促进新一代微电子技术的要求与发展。一门新兴的学科——“氧化物电子学”正



图 1.1, 氧化物材料的特异性质和若干应用领域

在迅速崛起[1-7]。

现代高科技产业的发展，除了要求多种物性的交叉与组合外，还需要电子器件更加微型化和集成化。这就使得薄膜材料逐渐成为现在研究的热点。也正是由于薄膜材料和薄膜技术的发展，才极大地促进了微电子技术、光电子技术、计算机技术、信息技术、传感器技术、航空航天技术和激光技术的发展，也为能源、机械、交通等工业部门和现代军事国防部门提供了一大批高技术新材料和器件。除了在微电子、光电子器件中的具体应用以外，薄膜材料的制备还为基础科学提供了更为丰富的研究对象和研究渠道。比如，由于尺寸效应的影响，薄膜材料往往具有不同于其体材料的性质。若将不同种类的薄膜耦合在一起，形成异质结，超晶格等复合结构，又有可能出现以前未曾认识的崭新的物理效应[8-17]。这就为发现新的物理效应、探索新型器件、丰富人类对于自然界的认识，提供了新的途径。

因此氧化物薄膜材料的研究在基础研究和工业应用研究两个方面都具有非常重要的意义，也正是因为如此，目前氧化物材料受到了越来越多的重视。

在各种氧化物体系中，钙钛矿结构（Perovskite）氧化物占据着非常特殊的地位。钙钛矿氧化物最早进入人们的视野中是在1945年，这一年Von Hippel在 BaTiO_3 发现了铁电性[18,19]。此后，钙钛矿氧化物越来越多地受到了人们的关注，特别是在钙钛矿氧化物体系中发现了高温超导特性，更是地掀起了人们对这个体系的研究的热潮[20-22]。近十几年来，越来越多的更为新奇的性质在钙钛矿氧化物结

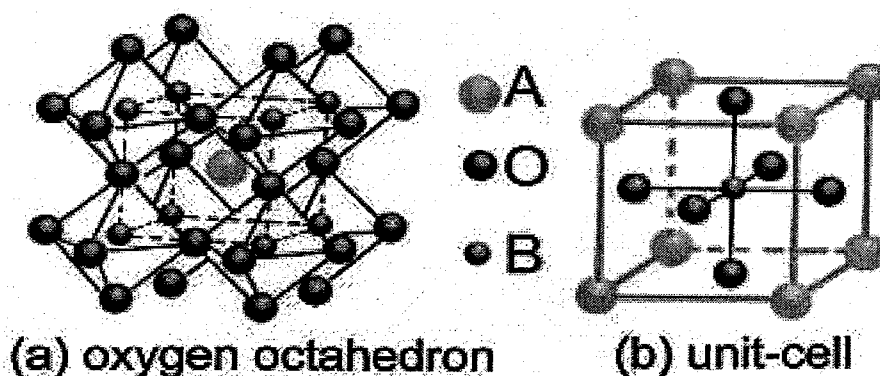


图 1.2，钙钛矿氧化物材料的晶体结构

构中逐渐被发现，比如新型的铁电性，高 k 介电性等，而其中的非常值得注意的是巨磁电阻、电荷有序、轨道有序、自旋玻璃态及相分离等许多有趣的现象的发

现,使得钙钛矿氧化物材料的研究进入到了一个全新的阶段[23-33]。

钙钛矿氧化物的理想配比的化学式可以表示为 ABO_3 [34],其中A和B为阳离子,O为氧离子。氧离子的化合价总和为-6,AB的价态相应地分为 $A^{2+}B^{4+}$, $A^{1+}B^{5+}$ 和 $A^{3+}B^{3+}$,其基本晶体结构构型是如图1.2所示的一个具有面心立方结构的晶胞。如果以A离子作为立方晶胞的顶点,则B离子和O离子分别处于体心和面心的位置。此外,这些氧离子将会形成以B离子为体心的氧八面体。整个晶体也可以看成是由氧八面体共顶点连接而成,各个氧八面体之间的空隙则由A离子占据[35]。A位和B位离子的配位数分别是12和6,此外 ABO_3 型的结构晶体还可以看成是由AO和BO层交迭构成的,如图2.1a。

需要指出的是,不是具有 ABO_3 化学式的所有材料都属于钙钛矿结构,这与A、B离子半径具有很大的关系。这里引入容限因子 t [35] (Tolerance factor) 的概念,定义为:

$$t = (r_A + r_O) / \sqrt{2}(r_B + r_O) \quad (1.1)$$

其中 r_A , r_B 和 r_O 分别代表A离子, B离子和氧离子的半径。Goldschmidt[36]发现 $0.8 \leq t < 1$ 时,钙钛矿型结构是稳定的,后来大量的实验证明,当 $0.77 \leq t < 1$ 的时候, ABO_3 结构为钙钛矿型结构, $t \leq 0.77$ 的时候一般为铷铁矿结构, $t > 1.1$ 的时候为方解石结构。

在钙钛矿氧化物中,处于B位的过渡金属离子外层的d电子一般表现出奇特的物理性质。由于过渡金属中d电子能带较窄,d电子轨道与周围氧八面体中氧离子的p电子轨道的交迭较小,由此产生出电子间很强的关联作用。此外,在很多的钙钛矿氧化物材料中,氧八面体中B位离子外层的d电子和氧八面体之间的相互作用会导致晶体结构发生畸变。这些使得钙钛矿氧化物表现出电荷、自旋、轨道以及晶格等之间很强的相互关联作用。而这些物理量之间的相互关联作用正是钙钛矿氧化物材料中奇特物理性质的来源[37-39]。

由于电荷、自旋、轨道以及晶格等之间的强关联作用,未掺杂的钙钛矿氧化物多数属于具有强关联特性的绝缘体。但是,如果在其中掺入施主、受主杂质或者引入氧空位后将使得钙钛矿氧化物材料的导电性质发生很大的改变。这时,原本绝缘的钙钛矿氧化物材料将会表现出电子(n型)或空穴(p型)半导体导电特性[40]。同时钙钛矿型氧化物又具有铁电、超导、介电、庞磁电阻、热释电、压

电、声光、以及非线性光学等十分丰富的物理性质[40-52]。而且，大部分钙钛矿氧化物在结构上都具有很好的相容性，因此它们之间完全有可能以不同组合形式形成各种新型结构和器件，并在发现新物理效应的基础研究和新型器件探索中发挥巨大的作用。如果把这些同一特性或者不同特性的钙钛矿氧化物材料交叉耦合在一起，很可能出现一些新奇的效应、现象和特性。把具有磁、铁电、超导等同一特性或不同特性的n型和p型钙钛矿氧化物叠层外延、交叉耦合在一起，理论和实验相结合，研究其pn异质结的微观结构和物理特性，从而探索新的功能材料和器件。随着激光分子束外延 (Laser molecular beam epitaxy, Laser-MBE) 技术的发展与完善，制备出具有原子尺度级光滑表面和界面的钙钛矿氧化物薄膜已经成为可能[53,54]。近年来，具有良好整流特性的钙钛矿氧化物-硅异质结如 STO_3/Si , $\text{LaSrMnO}_3/\text{Si}$ ，全氧化物异质结如 $\text{p-La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3/\text{n-SrTiO}_3$ / $\text{n-La}_{0.05}\text{Sr}_{0.95}\text{TiO}_3$ 异质结， $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{Nb-SrTiO}_3$ Schottky结，以及氧化物场效应管和钙钛矿氧化物超晶格等[55-61]已经被国内外多个实验小组成功制备。但目前作为电子学基础元件的高温超导结和巨磁阻等钙钛矿氧化物pn结基本上还处于探索阶段，特别是理论方面的工作还未很好地开展起来。

为了加深理解钙钛矿型氧化物的物理机制，并期望真正实现这类材料的实际应用，近年来国内外学者进行了大量相关的物理性质研究，其中光诱导效应的研究也引起了人们的关注。其中特别值得注意的是光激发是一种在改变材料性质方面颇具吸引力的手段，它不需要繁杂地改变材料的化学组分和晶体结构就可以改变材料的载流子浓度，被称作“光掺杂”(Photodoping)方法。这使得通过光诱导的方式控制钙钛矿氧化物的材料特性成为一种可能，同时钙钛矿氧化物异质结又将不同的钙钛矿氧化物异质结的特性耦合在一起产生新的特性，光的作用又同这些新的复合特性耦合在一起，因此可以期望光诱导的方法也会在钙钛矿氧化物异质结中激发出更为奇特的现象，进而得到光诱导下的新型光电、光磁电等多功能器件。因此开展钙钛矿结构氧化物异质结光诱导效应研究不仅对理解电子强关联体系中的凝聚态物理基本问题具有重要意义，还有可能发现在技术上有重要应用价值的新型物理效应。

1.2 钙钛矿氧化物中的光诱导效应

钙钛矿氧化物材料是一种电子关联体系，它们的电荷、自旋、轨道、晶格等自由度之间相互耦合，竞争的关系很容易受到外场的破坏。光辐射作为一种外场，相应地也会产生对钙钛矿氧化物体系的有序态的改变。研究光照对钙钛矿氧化物特性的影响，可以加深我们对这种材料内在电子关联特性的理解，同时这部分工作也会对人们研究钙钛矿氧化物材料的多功能特性大有帮助，下面将简单介绍一下目前光对钙钛矿氧化物光诱导效应的一些研究结果和发现的新现象。

1.2.1 光致金属-绝缘体相变

钙钛矿氧化物 $R_{1-x}A_xMnO_3$ (R 为过渡稀土元素, A 为二价碱土元素) 是一种典型的钙钛矿氧化物构型。在这种钙钛矿氧化物中具有强的电荷、自旋、轨道耦合。其中化学式中的 x 控制着体系的掺杂状态, 通过双交换机制, x 的增大同时也在增强了 $R_{1-x}A_xMnO_3$ 中的电荷退局域化, 也就是调制了 Mn 位上的局域电子密度。如果 $R=Pr$, $A=Ca$ 这种调制在 $x=0.5$ 的时候这种电荷有序态是稳定的, 当再减小 x , 大概在 $x=0.3$ 的时候, 这个体系的电荷有序态就不再稳定, 极容易被外场破坏, 产生从电荷有序绝缘相 (COI) 转变为铁磁金属相的转变 (FM)。当这种外场为磁

场的地时候后, 这种转变便产生庞磁电阻 (CMR) 效应[62]。相应地使用光场也

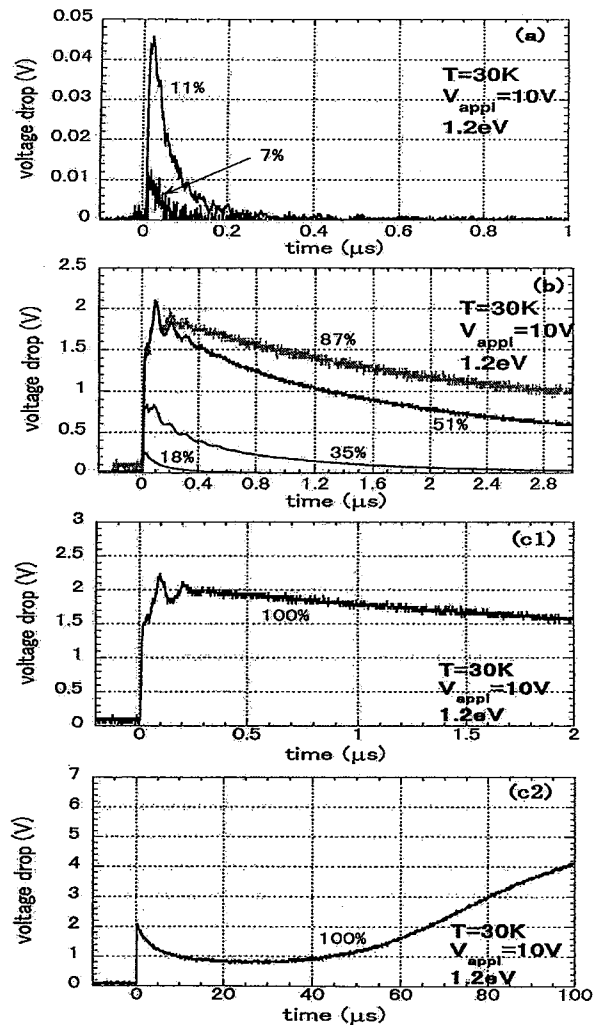


图 1.3, $Pr_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ 中的光导致的绝缘体-金属相变过程。

可以导致这种相变。1997 年日本的 Y. Tokura 小组便在 $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ 中发现了这种光导致的绝缘体-金属相变[63]。他们通过脉冲激光激发下体系的光电导的转变研究 $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ 中的绝缘体-金属相变。

用一个脉宽为 5ns, 光子能量为 0.6-3.5 eV 的激光照射到 $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ 上, 他们发现随着光强的提高, 测量到的电压下降曲线边开始迅速增长, 曲线尾上翘开始变得越来越明显(图 1.3), 这个过程完全是非线性的在没有光照前样品的电阻约为 1 G Ω , 光照后体系电阻变为 5 Ω (图 1.3c2), 样品在激光强度增强到一定程度后的确开始出现绝缘体-金属相变。

同时他们还观察到了激光光子能量对 $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ 绝缘体-金属相变的影响(如图 1.4)。发现光子能量才是产生 $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ 绝缘体-金属相变的关键因素而不是光强。

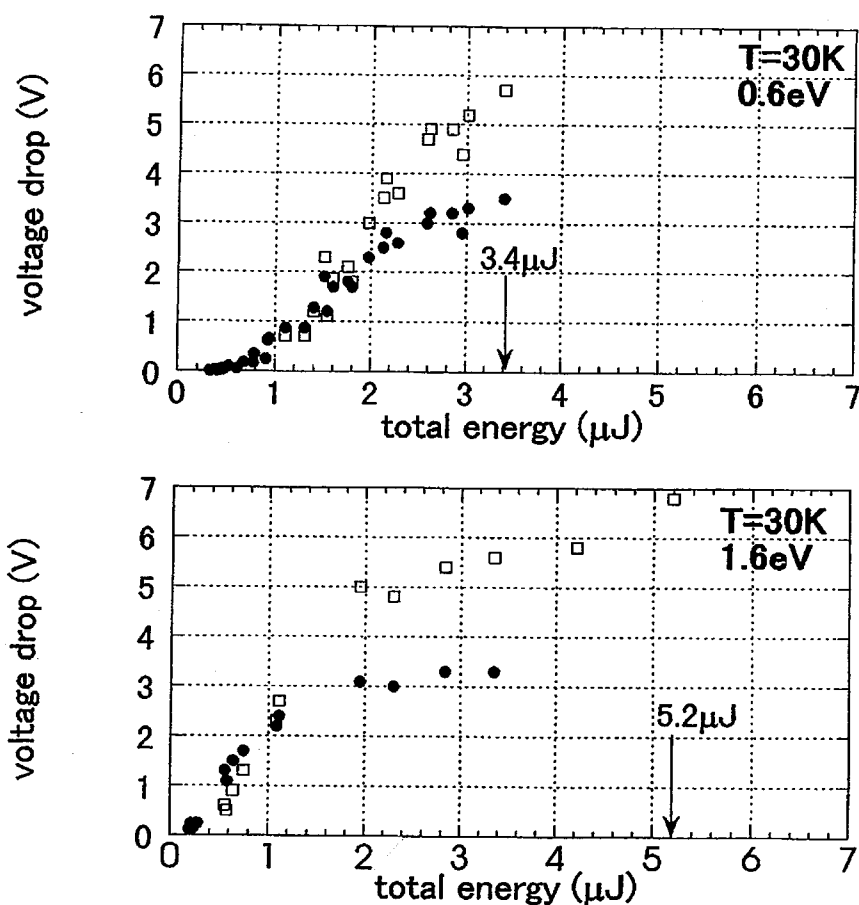


图 1.4, $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的光电导同光子能量的关系

1.2.2 光致的持续光电导效应

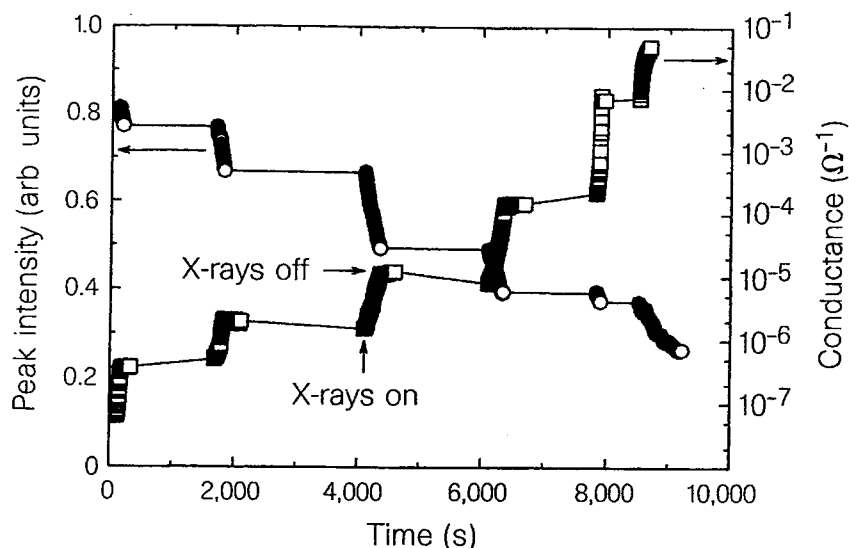


图 1.4 $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ 中的持续光电导效应

持续光电导效应 (PPC)，也就是光导致的光电导效应在光照结束后仍保持一段时间的存在的一种效应，这种效应已经在很多传统半导体中被发现。PPC 效应常常是与电子空穴被光分离后被某种宏观或者微观机制压制住而不能有效复合而产生的。

1997 年 V. Klryukhln[64] 在 Nature 杂志上报道了在小于 40K 的低温下，由 X 射线导致 $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的 PPC 效应。在图 1.5 中可以看出，在 X 射线的照射后 $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻的确下降了，但是当光照结束之后，体系的并不回到初始的状态而是继续保持着低的电阻状态，这种状态甚至保持数个小时不变。此后在 $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ [65] 和 $\text{Pr}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ [66] 等钙钛矿氧化物体系中也发现了 PPC 效应。一般认为 PPC 效应是由体系中的氧空位所造成的，但这并没有确切的证实，其内在物理机制还非常不清楚。

1.2.3 光生载流子注入效应

通常改变材料中载流子浓度的方法是通过化学掺杂，即通过化学元素替代，来改变载流子的数目。但采用化学掺杂的材料其掺杂在制备以后，其掺杂浓度便

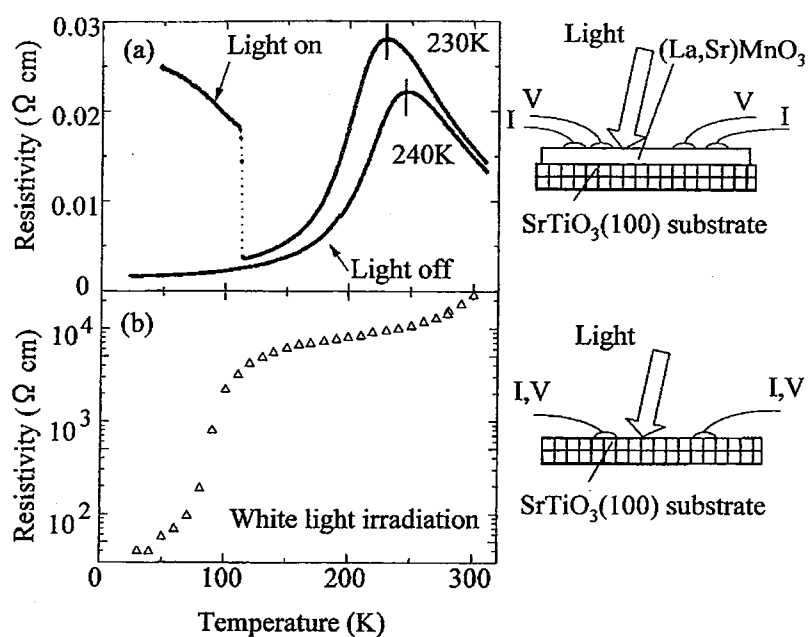


图 1.5, 光照前后(a) $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3/\text{SrTiO}_3$ 异质结和 (b) SrTiO_3 基底中的 $R-T$ 曲线。

是固定的, 无法灵活地调控。而采用光生载流子注入的方法, 却没有这样的缺点。而且采用光生载流注入的方法, 非常干净, 因为化学引入新的掺杂元素, 同时也在材料中带入的干扰的因素[67-74]。

日本的 H. Katsu 小组报道了在 $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3/\text{SrTiO}_3$ 异质结中, 光生载流子注入对 $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ 薄膜的电性质和磁性质的影响[67], 他们发现在波长小于

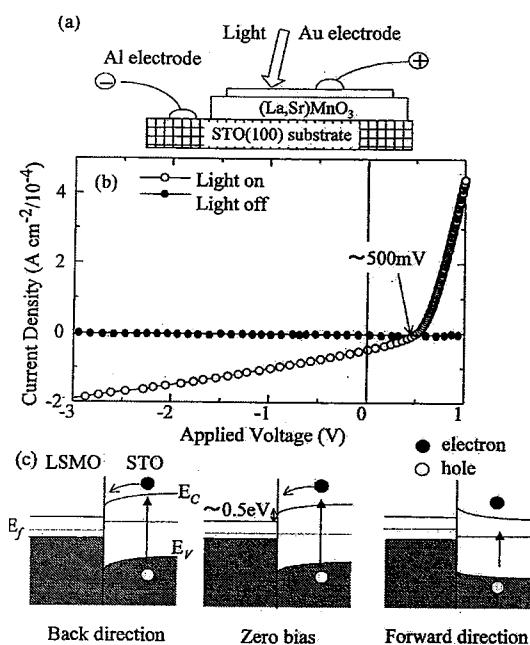


图 1.6, a) 异质结的结构图; b) 温度为 30K 的时候光照前后的 $I-V$ 曲线; c) 界面附近的能带示意图。

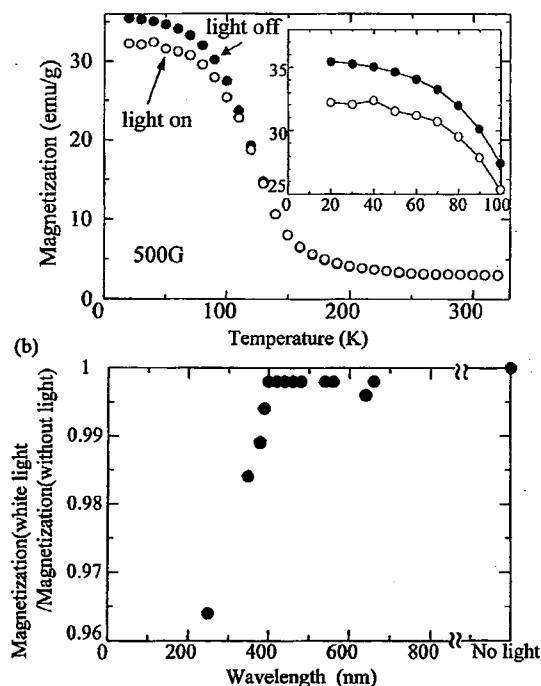


图 1.7, a) 500Oe 磁场下 LSMO 薄膜的磁化强度曲线; 线 b) 不同光波长对 LSMO 薄膜的磁化的影响。

400nm 的光照下, 从 SrTiO_3 中激发出的光生载流子被注入到 $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ 后, $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ 薄膜的电阻被增大, 金属-绝缘体相变的地转变温度 T_c 也被降低了近 10K, 并且由于光照的作用, 在 100K 附近出现了一个新的光诱导的金属-半导体相变, 如图 1.5 所示。图 1.6 显示的是光照前后的 $I-V$ 曲线和能带图解释了这些现象: 400nm 波长的光子能量对应着 SrTiO_3 的能隙 3.2eV, 光照后 SrTiO_3 衬底内产生的光生电子被注入到 $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ 薄膜层中, 中和了其中的空穴, 使得 $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ 中的双交换机制被减弱, 导致电阻率的上升和 T_c 的下降。在双交换铁磁体系中, 自旋和电荷紧密地联系在一起, 随着空穴浓度的减小, 磁性也在减弱, 图 1.7 即是实验中观测到的 $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ 薄膜磁化强度在光照前后的变化

1.2.4 光生伏特效应

当用适当波长的光照射非均匀半导体比如 pn 结，光会在半导体中激发出电子空穴对，这些电子空穴对扩散进入到空间电荷区内的，会被内建电场分离，电子会进入 N 区，空穴会进入 P 区。形成电荷的重新分布，这样 P 区和 N 区之间的费米电势差就会形成，在电极开路的情形下就会有电压输入[75]，在电路闭路的情形下就会有电流输出。这种效应称为光生伏特效应。钙钛矿氧化物在经过掺杂以后也可能会形成具有 p 型或者 n 型半导体性质的材料，通过一定的制备方法也可以生长出 pn 结。在钙钛矿氧化物 pn 结中，国内外很多研究小组都报道了它的光生伏特效应。比如在 $\text{La}_{0.29}\text{Pr}_{0.38}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3/\text{SrNb}_{0.005}\text{TiO}_3$ ， $\text{CaMnO}_3/\text{SrNb}_{0.005}\text{TiO}_3$ 和 $\text{La}_{0.7}\text{Ce}_{0.3}\text{MnO}_{3-\delta}/\text{SrNb}_{0.005}\text{TiO}_3$ 等 pn 异质结中发现了光伏效应[76-78]。我们研究组在 $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{Si}$ 、 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{MnO}_3/\text{SrNb}_{0.01}\text{Ti}_{0.99}\text{O}_3$ 、 $\text{SrTiO}_{3-\delta}/\text{Si}$ 、 $\text{LaAlO}_{3-\delta}/\text{Si}$ 、 $\text{BaNbTiO}_3/\text{Si}$ 和 $\text{BaTiO}_{3-\delta}/\text{Si}$ 等异质结中不仅发现了大的光生伏特效应[79-82]，还观测到了超快的 ps 量级的光电响应。如图 1.8。

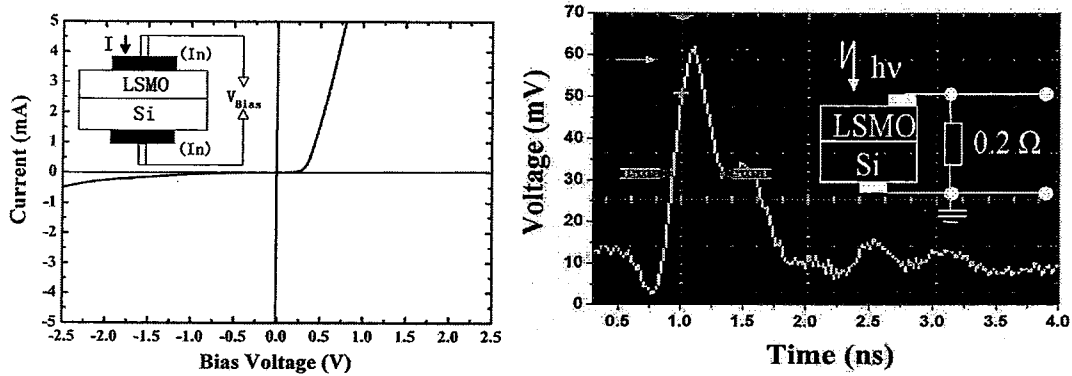


图 1.8, $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{Si}$ 异质结的整流特性 (左图), 和超快光伏脉冲 (右图)。

1.3 电输运理论与方法简介

在本文中,我们将传统输运模型迁移到钙钛矿氧化物异质结光电效应的计算中来,因此有必要对目前在输运理论研究中被广泛使用的一些方法进行介绍。材料的输运计算方法大多可以归结为:在一定的器件几何条件和物理条件(比如材料特性、掺杂浓度、温度、各电极施加的电压和边界情况等)下,得到材料内的电流电压关系以及描述器件特性的其他参数,就计算内容而言,则可以归为:在上述条件下,采用适当的输运方法,得到器件内部的电流密度分布 $j(x)$,或者更一般 $j(x,t)$ [83].

1.3.1 玻尔兹曼方程

首先介绍在电输运中非常重要的方程:玻尔兹曼方程[84],这是后面将介绍的几个电输运模型的根本出发点,这些模型都是为了保证某种可算性,在玻尔兹曼方程基础上的某种程度的近似。

在对电子运动做准经典近似时,最终决定电流和各种输运性质的是分布函数 $f(k,x,t)$ 。 k 和 x 分别为波矢和位矢。分布函数代表电子占据以 k 表征的能态的几率。它通过下式决定电流密度。

$$j(x,t) = \mp \frac{2e}{(2\pi)^3} \int v(x,t) f(k,x,t) dk \quad (1.1)$$

其中“ $-$ ”和“ $+$ ”分别对应于电子和空穴。波矢为 k 的电子的速度又下式给出

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) \quad (1.2)$$

其中 $E(k)$ 代表电子能量。

在存在力场 $F(x,t)$ 及载流子梯度的一般情形下,分布函数 $f(k,x,t)$ 将偏离其平衡值,支配分布函数的便是玻尔兹曼方程:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\nabla_x f \cdot v - \nabla_k f \cdot \frac{F}{\hbar} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c \quad (1.3)$$

∇_x, ∇_k 分别是对坐标 x 和波矢 k 求梯度。第一项由载流子在空间中的运动引起,当载流子在空间中均匀分布的时候,该项为 0; 第二项是由载流子在力 F 的作用下在 k 空间的运动引起的,电子在 k 空间的分布通常是不均匀的,外场总会导致

分布的改变,从而引起电流;第三项代表由散射引起的分布函数的变化速率(称为碰撞或者散射积分),作为 k 的函数由下式给出:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = \frac{V}{(2\pi)^3} \int [W(k',k)f(k')(1-f(k)) - W'(k,k')f(k)(1-f(k'))]dk' \quad (1.4)$$

$W(k',k)$ 代表由 k 态到 k' 态跃迁率,方括号中的第一和第二项分别对应于向 k 跃迁导致的分布增加和由 k 向外的跃迁所导致的分布减小, V 为计算跃迁率 $W(k',k)$ 所涉及的晶体体积, k 空间的态密度取为 $V/(2\pi)^3$, 因为散射通常不改变自旋。

式(2.4)就是玻尔兹曼积分微分方程,玻尔兹曼方程是半经典的输运理论和方法的基础,说它是半经典的是因为一方面方程把电子看成是准经典的,可以同时具有确定的坐标 x 和动量 $\hbar k$, 另一方面跃迁率又通常是由量子力学得到的。这里散射被认为是瞬时发生的,并且加速场 F 的存在不致影响散射过程。

但是由于(2.4)中的碰撞项中的 $W(k,k')$ 和 k, k' 之间的函数关系相当复杂,特别是它又是一个积分-微分方程,除了少数简单情况以外,一般不能得到解析解。

1.3.2 漂移-扩散模型

材料中的电流归根结底是由外加电压驱动,外加电压通过改变材料内部的电场分布 $E(x,t)$ 和载流子分布 $n(x,t), p(x,t)$ 而引起一定电流 $j(x,t)$ 。但它们之间又是密切相关的,载流子分布和电流分布由连续性方程制约:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot j_n + (G - R) \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \nabla \cdot j_p + (G - R) \quad (1.6)$$

G 和 R 分别代表电子-空穴对的产生率和复合率, j_n 和 j_p 分别代表电子电流密度和空穴电流密度,而 n 和 p 又通过Poisson方程影响电势分布:

$$\nabla^2 \phi(x,t) = -\frac{\rho}{\epsilon} = -\frac{\rho}{\epsilon} (N_D - N_A + p - n) \quad (1.7)$$

N_D 和 N_A 分别代表电离的施主和受主的浓度。在不同情形下以上诸式总是成立的。但对分布 $E(x,t)$, $n(x,t)$ 和 $p(x,t)$ 如何引起电流密度 $j(x,t)$, 即输运性质确有不同的描述方法、

一种最简单的情形是：电流密度可以由作为常量的迁移率 μ 和扩散系数 D 描述：

$$j_n = e\mu_n n(x,t)E(x,t) + eD_n \nabla n(x,t) \quad (1.8)$$

$$j_p = e\mu_p p(x,t)E(x,t) - eD_p \nabla p(x,t) \quad (1.9)$$

通常把以上的方程的集合称为半导体方程，将以上两式带入式 (1.5) 和 (1.6) 后可以得到一组三个关于 Φ , n , p 相互耦合的微分方程。材料中的输运计算可以在此基础上进行[85-87];

通常把以上对于电荷输运所作的描述称为漂移-扩散模型，这种方法简单，计算速度快，是在进行常规半导体器件计算中应用得非常广泛的方法。在此文中我们所应用的方法，正是以漂移-扩散模型为基础。但是漂移-扩散模型也并不是一个能完全描述半导体输运性质的模型，在某些情形下漂移-扩散模型将不能有效地描述，比如涉及强电场，异质结界面等。下面我将简要介绍更为精细描述半导体中输运行为的物理模型。但是这些模型相对于漂移-扩散模型，牺牲了模型的简单性和易算性，并不能很好地处理我们后文中的一些物理问题，特别是会产生无法承受的计算量，同时我们也并未涉及强电场问题和复杂的界面问题，因此在后文中，我们采用一套以漂移-扩散模型为基础的方法来研究钙钛矿氧化物异质结的光电效应。

1.3.3 流体动力学模型

在强电场的亚微米半导体器件中，比如在场效应器件的长度小于微米量级的沟道中，载流子在通过强场区时，常常不能在其各点建立起和各点电场相对应的稳态分布和相应的平均能量。这时，载流子的输运性质不仅和本地的电场有关，还和它们的历史有关，这类问题称为非本地输运。非本地输运问题，漂移-扩散模型不再适用，能描述非本地输运的模型必须至少能合理地描述平均能量，平均速度和载流子浓度的时间和空间演化。这就导致了所谓的流体动力学模型（HD

模型)或能量输运模型[88-91](或电子温度模型),它由关于载流子浓度(n),动量密度(P)和能量密度(W)的演化的三个方程组成。假设可存在谷间转移,关于第 v 个能谷,这三个方程可以写为:

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} + \nabla \cdot (n_v v_v) = \left(\frac{\partial n_v}{\partial t}\right)_c \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial P_v}{\partial t} + \nabla \cdot (P_v v_v) = en_v E - \nabla \cdot (n_v k_B T) + \left(\frac{\partial P_v}{\partial t}\right)_v \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial W_v}{\partial t} + \nabla \cdot (W_v v_v) = en_v \kappa_v \cdot E - \nabla \cdot (n_v \kappa_v k_B T_v) + \left(\frac{\partial W_v}{\partial t}\right)_c - \nabla \cdot (\kappa_v \nabla T) \quad (1.12)$$

其中 v_v 代表平均速度。这些方程可以在热麦克斯韦分布的假设下,由玻尔兹曼方程得到。

第一个方程就是连续性方程,这里略去了产生和复合项,但计入了谷间转移。

$(\partial n_v / \partial t)_c$ 是谷间转移导致的散射率。

第二个方程是关于动量的馈入,损失和输运的方程。右侧三项分别计入了电场加速,扩散和散射引起的动量密度变化的贡献。 T_v 代表第 v 谷的电子温度。左侧第二项由粒子的流动造成。

第三个方程是关于能量的馈入,损失和输运。其中各项的物理意义和第二个方程相似,右侧第四项为电子热导贡献。与之联系的能流 $\kappa \nabla T_v$ 并不包含在能流 $W_v v_v$ 。

以上三个方程便构成了流体动力学模型的基本方程。

1.3.4 蒙特卡罗方法和路径变量法

在用于研究半导体中的载流子输运性质的蒙特卡罗方法是完全按照输运的半经典模型的也就是玻尔兹曼方程来进行的。半导体蒙特卡罗方法追踪单个或者多个粒子的无规则运动。在此基础上通过适当的统计来得到所需要的性质。

在半经典图像中,荷电粒子的微观运动可以归结为一系列的交替在外场下自由飞行和随机性的散射,蒙特卡罗方法通过产生均匀分布在0和1之间的随机数系列来处理和散射相关的随机性事件。

和散射相比,对于给定的电场,电子的初态和自由飞行时间,自由飞行过程是完全确定的,其遵守经典的牛顿动力学方程。对于散射,在半导体蒙特卡罗方

法中有三种基本随机事件：在第一次碰撞后，下一次何时发生碰撞（自由飞行时间）；散射属于何种类型；散射后载流子处于何种状态。这三种基本随机时间都可以通过随机数来模拟它的统计分布。然后通过这个分布通过具体的统计方法确定我们所求的物理量[83]。

几乎在把蒙特卡罗方法引入到输运问题的研究的同时，一种可以用于求解半导体中强场分布的数值方法：路径变量法（迭代法）[92-96]被发展出来，可以证明在非简并的均匀半导体中，稳态分布函数 $f(k)$ 满足以下积分方程：

$$f(k) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \left[\int W(k', k - \frac{Ft'}{\hbar}) f(k') dk' \right] \exp\left[- \int_0^{t'} \lambda(k - \frac{Ft''}{\hbar}) dt''\right] dt' \quad (1.13)$$

式中 $\lambda(k)$ 代表散射率， $W(k', k)$ 为 k' 到 k 的量子跃迁率， F 代表外力，式 (1.13) 称为路径变量积分方程。被积函数的第一因子代表 t' 时间以前，由各 k' 态向 $k - Ft'/\hbar$ 态跃迁所导致的该态的分布变化率，经过 t' 时间，该态中的电子被力 F 加速至 k 态。第二个因子则代表在此过程中未发生散射的几率，可以由玻尔兹曼方程出发证明 (1.13) 式成立[92]，它是稳态积分形式的玻尔兹曼方程。

由任何初始分布 $f_0(k)$ 出发，通过迭代，可以得到稳态分布

$$f^{(n)}(k) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \left[\int W(k', k - \frac{Ft'}{\hbar}) f^{(n-1)}(k') dk' \right] \exp\left[- \int_0^{t'} \lambda(k - \frac{Ft''}{\hbar}) dt''\right] dt' \quad (1.12)$$

其中 $f^{(n)}(k)$ 和 $f^{(n+1)}(k)$ 分别代表第 n 次和第 $n+1$ 次迭代所得到的分布值，当 $f^{(n)}(k)$ 和 $f^{(n+1)}(k)$ 的数值差别小到一个预设值的时候认为迭代求解完成，所得 $f^{(n)}(k)$ 即为所求分布。有了分布函数就可以求出其他我们所需要的物理量，比如电流，载流子浓度等。

Ree 和 Lebowitz 等还发展了迭代求解含时的玻尔兹曼方程的方法[94,97,98]也就是含时路径变量法，这里就不详细介绍。

蒙特卡罗方法和路径变量法在原则上是属于同一精度的方法，这是因为两者都是直接从玻尔兹曼方程出发。

1.3.5 本文工作所使用的理论模型和算法

蒙特卡罗方法、路径变量法、流体动力学模型都是为处理小尺度(深亚微米)强电场下出现的非本地输运现象而提出的，但这些方法都显得过于复杂或者具有

很大规模的计算量[83]。然而我们所面对的研究对象并不是一个小尺度器件，计算区域都在微米的尺度范围内，以上三种方法并不具有特别的优势反而会引入不必要的计算量。因此我们选择漂移-扩散模型作为我们理论计算的出发点。

目前在半导体光电效应研究中还是使用稳态漂移-扩散模型[99.100]，也就是研究的对象是一个稳定光照下，半导体光电器件内的 $J-V$ 特性或者说稳态光电效应，这对应的是一个不含时的问题。而在本文中，我们面临的对象是一个在脉冲光源下异质结内的动态光电效应，很明显至少需要的是一个含时漂移-扩散模型，而关于含时漂移-扩散模型在光电效应方面的应用，目前还没有工作被报道。本文工作是第一次将含时漂移-扩散模型应用到光电效应的研究中来。

需要注意的是，在一个异质结内界面载流子的输运是无法使用漂移-扩散来描述，因为界面破坏了材料的连续性。因此我们在漂移-扩散模型的基础上在界面处引入了 Richardson 热电流模型，认为在我们所研究的异质结界面处的电流主要是由电子或者空穴在界面附近翻越界面势垒的热电流。使用这个电流连接在界面两侧的含时漂移-扩散方程，也就是界面两侧使用漂移-扩散模型描述而界面处使用 Richardson 热电流模型描述，这样就得到一套可以描述异质结光电效应的可解方程组。

对于稳态漂移-扩散模型，目前已经有很好的计算方法。1961 年 H. K. Gummel 便提出一套收敛快且精度很高的计算方案[85]，现在比较通用的半导体器件计算机辅助程序都是建立在此算法的基础之上，比如 AMPS(Analysis of Microelectronic and Photonic Structures)程序[101]。但是 Gummel 算法只是对处理椭圆型方程也就是边值问题有效，无法处理含时漂移-扩散模型所包含的抛物型方程（空穴和电子含时连续性方程）也就是初值问题。在本文中，我们发展出了一套以牛顿法为基础的含时漂移-扩散模型的算法。

另外在求解描述光电效应的含时漂移-扩散模型时，会遭遇一个非常严重的问题：光生载流子浓度相对于材料的背景载流子浓度非常小，这种差别在十几个数量级左右，这在实际计算中会产生比较严重的舍入误差问题，而这种误差会造成数值解的无规律震荡。为了解决这个问题，在漂移-扩散模型的解析式中，我们就将载流子的初始背景浓度和演化过程中的载流子浓度变化分离开来，然后再进行数值离散化，极大程度降低了这种误差，得到稳定的数值解。

在后文中，关于这个模型及其求解方法将会做更详细的介绍。

1.4 本论文的主要研究内容和意义

综上所述，研究钙钛矿氧化物异质结光电效应不但可以深入理解钙钛矿氧化物的物理机制，同时也能通过这个体系设计出新型的多功能器件，无论是从物理机制研究还是工业应用的角度，对钙钛矿氧化物异质结的研究都具有非常重大的意义。

本论文主要是从理论的角度分析钙钛矿氧化物异质结中的光电效应，建立描述其动态物理过程的数学模型，同时探讨它的内在物理机制和可能出现的新现象。本文的研究内容主要分为两个部分：

1) 建立起了描述钙钛矿氧化物异质结的纵向光电效应的物理模型。然后对钙钛矿氧化物异质结纵向光电效应中的光掺杂效应进行了研究。最后分析了影响纵向光电响应的因素；

2) 建立起了描述钙钛矿氧化物异质结中的横向光电效应动态过程的物理模型。对钙钛矿氧化物异质结中发现的反常横向光电效应进行了理论分析和计算。

本章参考文献

1. D. H. Lowndes, D. B. Geohegan, A. A. Puretzky, D. P. Norton, and C. M. Rouleau, *Science* 273, 898(1996)
2. R. Ramesh, O. Auciello, V. G. Keramides, and R. Dat, in *Science and Technology of Electroceramic Thin Films*, edited by O. Auciello and R. Waser (Klywer Academic, Dordercht, Netherlands, 1995), p1-22.
3. R. Ramesh *et al.*, in *Polycrystalline Thin Films; Structure, Texture, Properties and Applicatios*, edited by K. Barmak *et al.*, (Material Research Society, Pittsburgh, PA, 1994), p431-443.
4. H. Koinmuna, N. Kanada, J. Nishino, A. Ohtano, H. Kubota, M. Kawasaki, and M. Yoshimoto, *Appl. Suf. Sci.* 109/110, 514(1997).
5. H.Koinmuna, *MRS Bull.* 19,21(1994).
6. M.Ritala, K.Kukli, A. Rahtu, P. I. Roisanen, M. Leskela, T. Sajavaara, and J. Keinonen, *Science* 288, 319 (2000).
7. M. Suzuki and T. Ami, *Mater. Sci. Eng. B* 41,166(1996).
8. H. Katsu, H. Tanaka, and T. Kawai, *Appl. Phys. Lett.* 76, 3245 (2000).
9. C. Mitra, P. Raychaudhuri, G. Köbernik, K. Dörr, K. -H. Müller, L. Schultz, and R. Pinto, *Appl. Phys. Lett.* 79, 2408 (2001); C. Mitra, P. Raychaudhuri, K. Dörr, K. -H. Müller, L. Schultz, P. M. Oppeneer, and S. Wirth, *Phys. Rev. Lett.* 90, 017202 (2003).
10. H. Tanaka, J. Zhang, and T. Kawai, *Phys. Rev. Lett.* 88, 027204 (2002).
11. H. B. Lu, S. Y. Dai, Z. H. Chen, Y. L. Zhou, B. L. Cheng, K. -J. Jin, L. F. Liu, G. Z. Yang, and X. L. Ma, *Appl. Phys. Lett.* 85, 032502 (2005); H. B. Lu, G. Z. Yang, Z. H. Chen, S. Y. Dai, Y. L. Zhou, K. -J. Jin, B. L. Cheng, M. He, L. F. Liu, H. Z. Guo, Y. Y. Fei, W. F. Xiang, and L. Yan, *Appl. Phys. Lett.* 84, 5007 (2004); H. B. Lu, S. Y. Dai, Z. H. Chen, L. F. Liu, H. Z. Guo, W. F. Xiang, Y. Y. Fei, M. He, Y. L. Zhou, and G. Z. Yang, *Chin. Phys. Lett.* 20, 137 (2003).

12. K. -J. Jin, H. B. Lu, Q. L. Zhou, K. Zhao, B. L. Cheng, Z. H. Chen, Y. L. Zhou, G. Z. Yang, *Phys. Rev. B* 71, 184428 (2005);
13. J. R. Sun, C. M. Xiong, T. Y. Zhao, S. Y. Zhang, Y. F. Chen, and B. G. Shen, *Appl. Phys. Lett.* 84, 1528 (2004); J. R. Sun, C. M. Li, and H. K. Wong, *Appl. Phys. Lett.* 84, 4804 (2004).
14. J. Zhang, H. Tanaka, T. Kawai, *Appl. Phys. Lett.* 80, 4378 (2002).
15. F. X. Hu, J. Gao, J. R. Sun, and B. G. Shen, *Appl. Phys. Lett.* 83, 1869 (2003);
16. M. B. Lee, M. Kawasaki, M. Yoshimoto, and H. Koinuma, *Appl. Phys. Lett.* 66, 1331 (1995).
17. D. Roy and S. B. Krupanidhi, *Appl. Phys. Lett.* 61, 2057 (1992).
18. H. D. Megaw, *Proc. Roy. Soc. (London)* 189, 261(1947).
19. H. D. Megaw and D. Helen, *Ferroelectricity in Crystals* (Methuen, London, 1957).
20. J. G. Bednorz and K. A. Muller, *Z. Phys. B* 64, 189(1986).
21. J. G. Bednorz, M. Takashige, and K. A. Muller, *Europhys. Lett.*, 3, 379 (1987).
22. C. W. Chu, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Guo, and Z. J. Huang, *Science* 235, 567(1987).
23. Q. X. Jia, X. D. Wu, S. R. Foltyn, and P. Tiwari, *Appl. Phys. Lett.* 66, 2197 (1995).
24. A. Li, G. Ge, P. Li, D. Wu, S. Xiong, and N. B. Ming, *Appl. Phys. Lett.* 70, 1616(1997).
25. C. M. Carlson, T. V. Rivkin, P. A. Parilla, J. D. Perkins, D. S. Ginley, A. B. Kozyrev, Y. N. Oshadchy, and A. S. Pavlov, *Appl. Phys. Lett.* 76, 1920(2000).
26. F. Le Marrec, R. Farhi, M. El Marssi, J. L. Dellis, M. G. Karkut, and D. Ariosa, *Phys. Rev. B* 61, R6447(2000).
27. F. M. Pontes, E. R. Leite, E. Longo, J. A. Varela, E. B. Araujo, and J. A. Eiras, *Appl. Phys. Lett.* 76, 2433 (2000).
28. C. H. Park and D. J. Chadi, *Phys. Rev. Lett.* 84, 4717 (2000).
29. I. Kanno, S. Hayashi, R. Takayama, and T. Hirao, *Appl. Phys. Lett.* 68, 328 (1996).

30. Z. Yu, C. Ang, P. M. Vilarinho, P. Q. Mantas, and J. L. Baptista, *J. Appl. Phys.* 83, 4874(1998).
31. O. Bidault, P. Goux, M. Kchikech, M. Belkaoumi, and M. Maglione, *Phys. Rev. B* 49, 7868(1994).
32. K. Iijima, R. Takayama, Y. Tomita, and I. Ueda, *J. Appl. Phys.* 60, 2914 (1986).
33. K. Ueda, H. Tabata, and T. Kawai, *Appl. Phys. Lett.* 75, 555(1999).
34. 钟维烈, 铁电体物理学, 科学出版社, 北京 (1996) .
35. A. R. West, *Solid State Chemistry*, John Weley and Sons, Essex (1989).
36. V. M. Goldschmidt, *Mat. Naturv. Kl.* 2, 117 (1926).
37. 邢定钰, 物理, 34, p.348-361(2005).
38. A-M. Haghiri-Gosnet and J-P. Renard, *Appl. Phys.* 36, R127-R150(2003).
39. E. Dagotto, T. Hotta, and A. Moreo, *Physics Reports* 344, p.1-153(2001).
40. C. Mitra, P. Raychaudhuri, G. Kobernik, K. Dorr, K.-H. Muller, and L. Schultz, and R. Pinto, *Appl Phys. Lett.* 79, 2408-2410(2001).
41. H. N. Lee, H. M. Christen, M. F. Chisholm, C. M. Rouleau, D. H. Lowndes, *Nature* 433, 395(2005).
42. M. Dawber, C. Lichtensteiger, M. Cantoni, M. Veithen, P. Ghosez, K. Johnston, K. M. Rabe, J. M. Triscone, *Phys. Rev. Lett.* 95, 177601(2005).
43. M. F. Imaev, R. M. Imaev, O. A. Kaibyshev, F. F. Musin, M. O. Yamalova, *Supercond. Sci. Technol.* 7, 701(1994).
44. H. A. Mook, P. C. Dai, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, F. Dogan, *Nature* 395, 580 (1998).
45. S. Yamamichi, T. Sakuma, K. Takemura, Y. Miyasaka, *Jpn. J. Appl. Phys.* 30, 2193(1991).
46. X. Z. Liu, Y. R. Li, *Appl. Phys. A* 83, 67(2006).
47. W. E. Pickett, D. J. Singh, *Phys. Rev B* 53, 1146(1996).
48. J. Y. T. Wei, N. C. Yeh, R. P. Vasquez, A. Gupta, *J. Appl. Phys.* 83, 7366(1998).
49. R. Jimenez, M. L. Calzada, J. Mendiola, *Thin Solid Films* 348, 253(1999).
50. D. E. Cox, B. Noheda, G. Shirane, Y. Uesu, K. Fujishiro, Y. Yamada, *Appl. Phys.*

- Lett. 79, 400(2001)
51. W. T. Wang, G. Yang, Z. H. Chen, H. B. Lu, Y. L. Zhou, G. Z. Yang, X. Kong, Appl. Opt. 42, 5591(2003)
52. W. S. Shi, Z. H. Chen, N. N. Liu, H. B. Lu, Y. L. Zhou, D. F. Cui, G. Z. Yang, Appl. Phys. Lett. 75, 1547(1999).
53. M. Kanai, T. Kawai, and S. Kawai, Appl. Phys. Lett. **58**, 771-773(1991).
54. G. Z. Yang, H. B. Lu, F. Chen, T. Zhao, and Z. H. Chen, J. Crystal Growth **227**, 929-935(2001).
55. H. Z. Guo, Y. H. Huang, K. J. Jin, H. B. Lu, L. F. Liu, Y. L. Zhou, B. L. Cheng, and Z. H. Chen, Appl. Phys. Lett. **84** 123502(2005).
56. G. Z. Liu, K.J. Jin, J. Qiu, M. He, H. B. Lu, J. Xing, Y. L. Zhou, and G. Z. Yang, Appl. Phys. Lett. **91**, 252110(2007).
57. A. Ruotolo, C. Y. Lam, W. F. Cheng, K. H. Wong, and C. W. Leung, Phys. Rev. B **76**, 075122 (2007).
58. M. Minohara, I. Ohkubo, H. Kumigashira, and M. Oshima, Appl. Phys. Lett. **90** 132123(2007).
59. D. M. Newns, J. A. Misewich, C. C. Tsuei, A. Gupta, B. A. Scott, and A. G. Schrott, Appl. Phys. Lett. **73**, 780-782 (1998); J. A. Misewich and A. G. Schrott, Appl. Phys. Lett. **76**, 3632-3634 (2000).
60. G. Q. Gong, A. Gupta, G. Xiao, P. Lecoeur, and T. R. McGuire, Phys. Rev. B **54**, R3742-R3745(1996).
61. K. S. Takahashi, M. Kawasaki, Y. Tokura, Appl. Phys. Lett. **79**, 1324-1326(2001).
62. Y. Tomioka, A. Asamitsu, Y. Moritomo, and Y. Tokura, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 3626 (1995).
63. K. Miyano, T. Tanaka, Y. Tomioka, and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. **78**, 4257(1997).
64. V. Kiryukhin, D. Casa, J. P. Hill, B. Kermer, A. Vigliante, Y. Tomioka, and Y. Tokura, Nature **386**, 813(1997)

65. R. Cauro, J. C. Grenet, A. Gilabert, and M. G. Medici, *Int. J. Mod. Phys. B* **13**, 3786 (1999)
66. A. Gilabert, R. Cauro, M. G. Medici, J. C. Grenet, H. S. Wang, Y. F. Hu, and Q. Li, *J. Superconductivity: Incorporating Novel Magnetism* **13**, 285(2000)
67. H. Katsu, H. Tanaka, and T. Kawai, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3245(2000).
68. Y. Muraoka, T. Yamauchi, Y. Ueda and Z. Hiroi, *J. Phys.:Condens. Matter* **14**, L757(2002).
69. Z. Hiroi, T. Yamauchi, Y. Muraoka, T. Muramatsu, and J.-I. Yamaura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **72**, 3049(2003).
70. Y. Muraoka, T. Yamauchi, T. Muramatsu, J. Yamaura, and Z. Hiroi, *J. Magn. Magn. Mater.* **272-276**, 448(2004).
71. Y. Muraoka, and Z. Hiroi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **72**, 781(2003).
72. Y. Muraoka, T. Muramatsu, and Z. Hiroi, *Thin Solid Films* **486**, 82(2005).
73. Y. Muraoka, T. Muramatsu, J. Yamaura, and Z. Hiroi, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 2950.
74. T. Muramatsu, Y. Muraoka, T. Yamauchi, J. Yamaura, and Z. Hiroi, *J. Magn. Magn. Mater.* **272-276**, e787(2004).
75. S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1999).
76. J. R. Sun, B. G. Shen, Z. G. Sheng, and Y. P. Sun, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 3375(2004).
77. J. R. Sun, S. Y. Zhang, B. G. Shen, and H. K. Wong, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 053503(2005).
78. J. R. Sun, C. H. Lai and H. K. Wong, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 37(2004).
79. H. B. Lu, K. J. Jin, Y. H. Huang, M. He, K. Zhao, B. L. Cheng, Z. H. Chen, Y. L. Zhou, S. Y. Dai, G. Z. Yang, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 241915(2005)
80. Y. H. Huang, K. Zhao, H. B. Lu, K.-J. Jin, M. He, Z. H. Chen, Y. L. Zhou, G. Z. Yang, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 061919(2006).
81. Y. H. Huang, K. Zhao, H. B. Lu, K.-J. Jin, M. He, Z. H. Chen, Y. L. Zhou, G. Z. Yang, *Physica B* **373**, 313(2006).
82. J. Xing, K.-J. Jin, H. B. Lu, M. He, G. Z. Liu, J. Qiu, and G. Z. Yang, *Appl. Phys.*

Lett. 92, 071113(2008).

83. 叶良修, 小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟, 科学出版社(1997).

84. 黄昆 韩汝琦, 固体物理学, 高等教育出版社(1988).

85. H. K. Gummel, IEEE Trans. Electr. Dev., ED-11, 455(1961).

86. D. P. Kennedy and R. R. O'Brien, IBM J. Res. Dev., 13, 662(1969).

87. J. W. Slotboom, Electron. Lett., 5, 6771(1969).

88. R. Stratton, Phys. Rev., 126, 2002(1962).

89. K. Blotekizr, IEEE Trans. Electr. Dev., ED-17, 34(1970).

90. R. K. Cook and J. Ferry, IEEE Trans. Electr. Dev., ED-29, 970(1982).

91. A. Forghieri, R. Guerrieri, P. Ciampolini, A. Gnudi, M. Rudan, and G. Baccarani, IEEE. Trans. Computer-Aided Design CAD-7, 231(1988).

92. H. Budd, Proc. 8th Int. Conf. Phys. Semicond. Kyot. J. Phys. Soc. Japan, Suppl., 24, 420(1966).

93. H. P. Rees, Phys. Lett. , 26A, 416(1968).

94. H. D. Rees., J. Phys. Chem. Solids, 30, 643(1969).

95. H. Budd, Phys. Rev., 158, 798(1966).

96. B. Vinter, J. Phys., 7, 798(1974).

97. P. A. Lebowitz and P. M. Marcus, Solid State Commun., 9, 1671(1971); P. A. Lebowitz and P. J. Price, Appl. Phys. Lett., 19, 530(1971).

98. H. D. Rees, J. Phys., 6, 262(1973).

99. J. G. Fossum, Solid-State Electr., 19(4), 269(1976).

100. Avant!(Synopsys) Co., "Mediciilser's Manual"(2003)

101.J.Arch, W.Howland, P. Mcelheny, "A manual for AMPS-1D"(1997).

第二章 钙钛矿氧化物异质结纵向光电效应

2.1 引言

光激发不但可以激发出钙钛矿氧化物体系电和磁等性质[1]的改变从而引发一系列有趣的物理现象[7-8], 而且同时它也是一种研究钙钛矿氧化物体系重要手段。特别是, 光激发可以在此材料体系中有效地激发生载流子, 从载流子浓度的角度, 这可以被视为一种光诱导的掺杂效应。它不需要繁杂地改变材料的化学组分和晶体结构就可以改变材料的载流子浓度, 被称作“光掺杂”(Photodoping)方法[9,10]。

众所周知钙钛矿氧化物的磁电性质对其掺杂浓度极其敏感[11], 如图2.1。对于 ABO_3 型钙钛矿锰氧化物, 通常是通过化学掺杂改变其 A 位上组分而实现对材料的磁电性质的调控, 但是化学掺杂是固定的因此无法实现自由调控。但光掺杂的方法相对于化学掺杂却没有这样一个限制, 光掺杂方法可以比较自由地实现对钙钛矿氧化物体系内载流子浓度而且不需要改变体系的

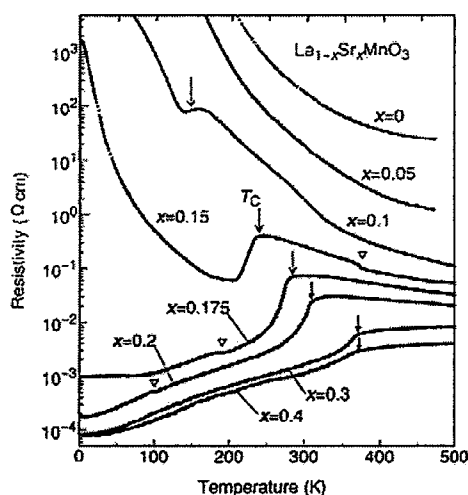


图2.1, $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ 在不同掺杂时的电阻率随温度变化的曲线

晶体结构和引入新的杂质元素, 从而很方便地实现对此材料体系性质的实时调控。这也意味着光场的调控会是一种有效控制钙钛矿氧化物体系材料性质的手段, 可以期望通过此手段设计出光磁电耦合的新型多功能器件[10]。

目前对于钙钛矿氧化物的体材料, 光场对材料性质的改变往往是不可逆的, 这是对光的调控的极大限制。实验[9]表明, 在钙钛矿氧化物异质结中, 光激发对材料性质的改变将是可逆的, 钙钛矿氧化物异质结是实现光磁电耦合器件极具潜力的候选者。同时还有可能发现在技术上有重要应用价值的物理效应。而且目前针对钙钛矿氧化物异质结光激发效应的研究还主要集中在实验的领域, 相应的理论研究还没有很好地开展起来, 因此开展钙钛矿异质结光电效应理论研究不仅

可以给新型光磁电耦合器件的设计打下理论基础,而且也对进一步深入理解钙钛矿氧化物具有重要意义,

在本章中,我们将基于含时漂移-扩散模型的自洽计算[12]从理论上分析一种典型的钙钛矿异质结 Sr-doped LaMnO_3 /Nb-doped SrTiO_3 (LSMO/SNTO)中纵向光电效应的动态物理过程,从而从理论上得到了光场在钙钛矿氧化物异质结中所激发的光掺杂效应。同时我还分析了影响钙钛矿氧化物异质结光电效应的几个重要因素。

2.2 物理模型与方法

我们采用的描述钙钛矿氧化物异质结光电效应的模型是在传统半导体领域中广泛使用的漂移-扩散模型。此模型是在我们组以往在钙钛矿氧化物异质结输运研究中使用的稳态漂移-扩散模型的基础上发展而来的,在我们组以往的研究中发现在漂移-扩散模型同相应界面输运机制结合可以有效地解释钙钛矿氧化物异质结中发现的一系列奇特输运现象[13-17],而且得到了与实验符合很好的理论计算结果[18,19],说明漂移-扩散模型适用于描述钙钛矿氧化物输运性质。因此在本章的研究中,我们将漂移-扩散模型迁移到钙钛矿氧化物的光电性质的研究中来,同时在界面引入 Richardson 热电子发射机制[20],但不同于以往输运研究的是,研究的对象已经不是一个稳态的问题而是一个动态的过程,因此必须将时间引入到漂移-扩散模型中来,这就是我们使用的含时漂移-扩散模型。这套模型主要由描述电势分布的 Poisson 方程和描述电子与空穴输运的电子和空穴含时连续性方程组成[12],这是三个彼此耦合的非线性方程。

需要强调的是,本章所研究的体系是一个纵向(垂直于异质结界面的方向,用 x 坐标表示)受均匀光照的异质结体系如图 2.2,在异质结横向(平行于异质结界面的方向,用 y,z 坐标表示)基本的物理量(电势、电子和空穴浓度、光照强度、产生率、复合率等)都是假设与横向位置坐标 y,z 无关,与之相应的微分项全部为 0,这样三维漂移-扩散模型在我们所研究体系中便退化为一个只与纵向坐标 x 相关一维漂移-扩散模型。这假设也得到了实验方面的支持,因为实验中发现光电信号与电极位置无关。

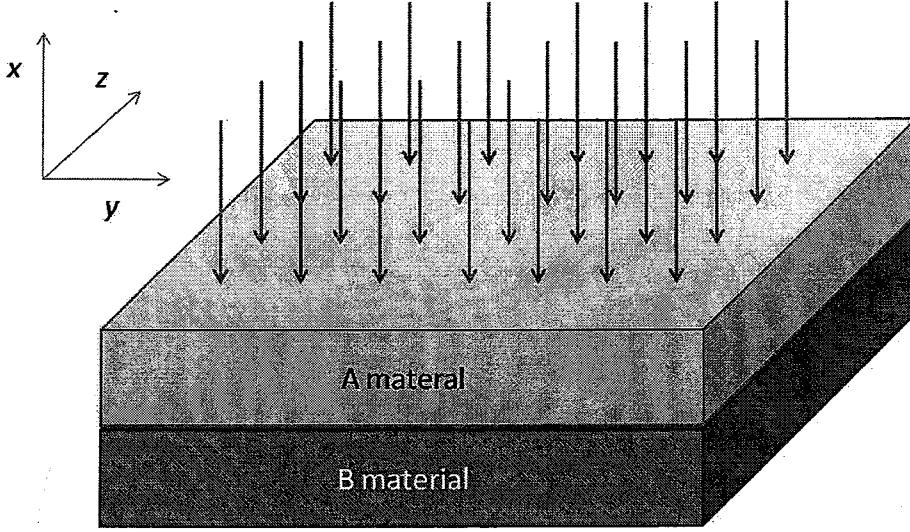


图 2.2 均匀光照下的异质结示意图, x 轴为纵向, y, z 两方向成为横向。

Poisson 方程:

$$\frac{\partial^2 \phi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{e}{\varepsilon} [p(x,t) - n(x,t) + N] \quad (2.1)$$

其中 $\phi(x,t)$ 表示材料内的电势分布, x 和 t 分别是位置坐标和时间坐标; e 代表单电子电荷电量, $p(x,t)$ 和 $n(x,t)$ 分别代表材料内自由空穴和自由电子浓度分布, 它们也同时是位置和时间的函数; ε 是材料的介电常数, N 是净掺杂浓度, 这两个参数在异质结的两个不同材料区域一般取值都是不一样的。Poisson 方程描述的是在材料体系内电荷与电势之间的关系。

电子连续性方程:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial J_n(x,t)}{\partial x} + G(x,t) - R(x,t) \quad (2.2)$$

空穴连续性方程:

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial J_p(x,t)}{\partial x} + G(x,t) - R(x,t) \quad (2.3)$$

其中 J_n 与 J_p 分别是电子和空穴电流密度, $G(x,t)$ 代表光场激发的电子-空穴对的产生率, 相应地 $R(x,t)$ 是当非平衡电子空穴的复合率。连续性方程描述的是在材料内电子与空穴的漂移, 扩散两种输运过程产生的电子与空穴浓度的分布变化。其中 J_n 与 J_p 分别满足公式:

$$J_n(x, t) = -e\mu_n n(x, t) \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} + eD_n \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \quad (2.4)$$

$$J_p(x, t) = -e\mu_p p(x, t) \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} - eD_p \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \quad (2.5)$$

其中 μ_n 和 μ_p 分别是电子和空穴迁移率, D_n 和 D_p 分别是电子和空穴扩散系数。根据爱因斯坦关系[21], 载流子的迁移率和扩散系数满足关系式:

$$D_n = \frac{k_B T}{e} \mu_n; D_p = \frac{k_B T}{e} \mu_p \text{ 其中 } k_B \text{ 玻尔兹曼常数, } T \text{ 为温度。}$$

同时我们认为在钙钛矿氧化物中非平衡电子空穴的复合仍然满足 Shockley-Read-Hall (SRH)模型[22]:

$$R(x, t) = \frac{p(x, t)n(x, t) - n_i^2}{\tau_{n0}(n(x, t) + n_i) + \tau_{p0}(p(x, t) + n_i)} \quad (2.6)$$

其中, n_i 为本征载流子浓度, τ_{n0} 和 τ_{p0} 分别为电子和空穴的寿命。

光激发体系中电子空穴对的产生率满足关系[21]:

$$G(x, t) = I_0 \alpha \beta \exp(-\alpha x) \quad (2.7)$$

其中 I_0 是单位面积的入射光子流密度, α 与 β 分别代表材料的光吸收系数与量子效率。

我们认为在异质结的界面处, 电子和空穴主要穿越途径是热发射机制, 因此我们引入了 Richardson 热电子发射机制[20]作为界面的主要输运机制, 在界面处 Richardson 热电流可以表达为:

$$j_{Rich-p} = \frac{A_{p1}^* T^2}{N_{v1}} \cdot \exp\left(-\frac{|\Delta E_v|}{kT}\right) \cdot \theta(-\Delta E_v) \cdot p(x_{interf} - 0) - \frac{A_{p2}^* T^2}{N_{v2}} \cdot \exp\left(-\frac{|\Delta E_v|}{kT}\right) \cdot \theta(\Delta E_v) \cdot p(x_{interf} + 0), \quad (2.8)$$

$$j_{Rich-n} = -\frac{A_{n1}^* T^2}{N_{c1}} \cdot \exp\left(-\frac{|\Delta E_c|}{kT}\right) \cdot \theta(\Delta E_c) \cdot n(x_{interf} - 0) + \frac{A_{n2}^* T^2}{N_{c2}} \exp\left(-\frac{|\Delta E_c|}{kT}\right) \cdot \theta(-\Delta E_c) \cdot n(x_{interf} + 0), \quad (2.9)$$

其中 j_{Rich-p} 和 j_{Rich-n} 分别是异质结界面的 Richardson 热空穴和热电子电子电流。 x_{interf} 代表界面的位置坐标 (这里 0 代表无穷小), ΔE_c 和 ΔE_v 分别是 导带和价带势垒能量高度; A_{p1} , A_{p2} , A_{n1} , A_{n2} 分别是界面两边两种材料的空穴有效 Richardson 常数和电子有效 Richardson 常数, 其表示为有效质量的函数: $A_{p1}^* =$

$4\pi em_{p1}^* k^2/h^3, A_{p2}^* = 4\pi em_{p2}^* k^2/h^3, A_{p1}^* = 4\pi em_{p1}^* k^2/h^3$ and $A_{p2}^* = 4\pi em_{p2}^* k^2/h^3$ 。 $N_{v1}, N_{v2}, N_{v3}, N_{v4}$ 分别是两种材料的价带的有效态密度和导带有效态密度，其表示为： $N_{v1}=2(2\pi m_{pL}^* kT/h^2)^{3/2}$ ， $N_{v2}=2(2\pi m_{pR}^* kT/h^2)^{3/2}$ (or $N_{c1}=2(2\pi m_{nL}^* kT/h^2)^{3/2}$ ， $N_{c2}=2(2\pi m_{nR}^* kT/h^2)^{3/2}$)。

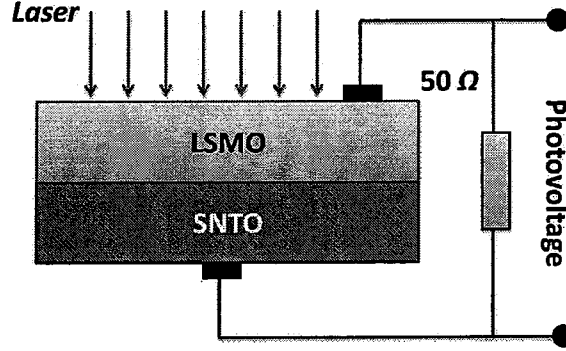


图 2.3，308nm 脉冲激光照射到 LSMO/SNTO 异质结的 LSMO 表面，并且在异质结两端并联 50Ω 的电阻。

2.3 LSMO/SNTO 异质结制备与光伏效应测量介绍

我们在 $\text{SrNb}_{0.01}\text{Ti}_{0.99}\text{O}_3$ (001) 基片上使用激光分子束外延技术 (Laser-MBE) 生长了 40 nm 厚的 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{MnO}_3$ 薄膜。然后在生成的异质结两个表面焊上 In 电极，并联 50 Ω 的电阻。使用 XeCl 脉冲激光 (脉冲能量 0.15J，波长为 308 nm，脉冲频率为 1 Hz，脉冲宽度为 20 ns，光子能量大于 LSMO 和 SNTO 材料的禁带宽度，因此在两种材料中都会激发出光生电子空穴对) 均匀垂直照射在 LSMO 薄膜上激发 LSMO/SNTO 异质结的光伏信号。使用 500M Hz 的示波器测量光电电压信号，测量示意图如图 2.3。

2.4 LSMO/SNTO 异质结的纵向光伏信号随时间演化过程以及相应的理论计算结果

通过使用上文所述的漂移-扩散模型的，我对此 LSMO/SNTO 纵向光伏信号随时间演化的过程进行了自洽计算 (计算参数见表 2.1)，图 2.4 的 a 图是上文实

验中所测量到的结果, b 图是理论计算所得到的光电响应的曲线。从计算结果可以看出, 理论计算结果同实验结果符合的是比较好的, 这说明漂移-扩散模型和 Richardson 热发射模型, 不但适用描述钙钛矿氧化物异质结的输运性质同时也适用于描述钙钛矿氧化物异质结的光电性质。

表 2.1, $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{MnO}_3/\text{SrNb}_{0.01}\text{Ti}_{0.99}\text{O}_3$ 异质结纵向光电效应计算参数[23-25]

	$\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{MnO}_3$	$\text{SrNb}_{0.01}\text{Ti}_{0.99}\text{O}_3$
Dielectric constant(ϵ_0)	10	150
Electron mobility ($\text{cm}^2/(\text{V.s})$)	10	33
Hole mobility ($\text{cm}^2/(\text{V.s})$)	1.8	6
Band gap (eV)	1.0	2.8
Electron effective mass (m_0)	4.0	7.0
Hole effective mass (m_0)	6.0	10.0

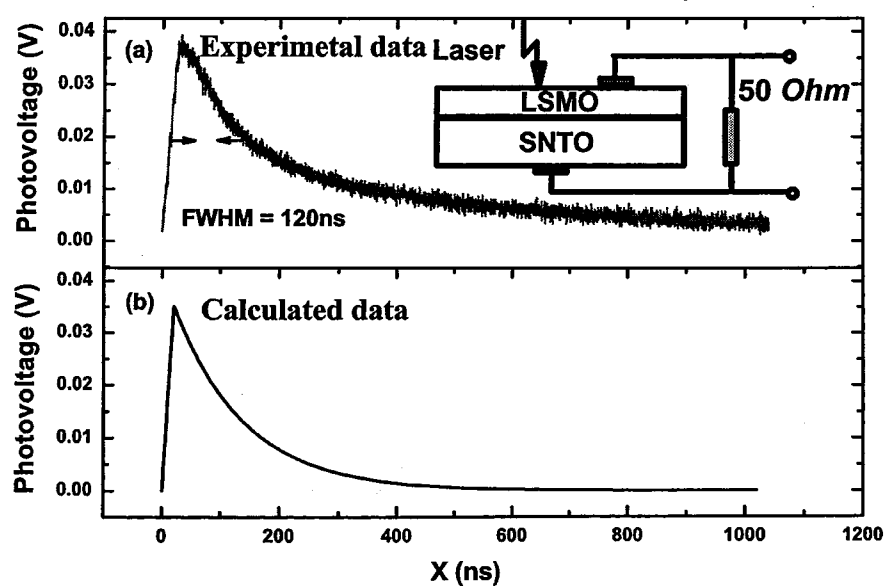


图 2.4, a) 实验所得到的光生电压随时间演化的过程; b) 理论计算所得的光电压信号随时间演化的过程。

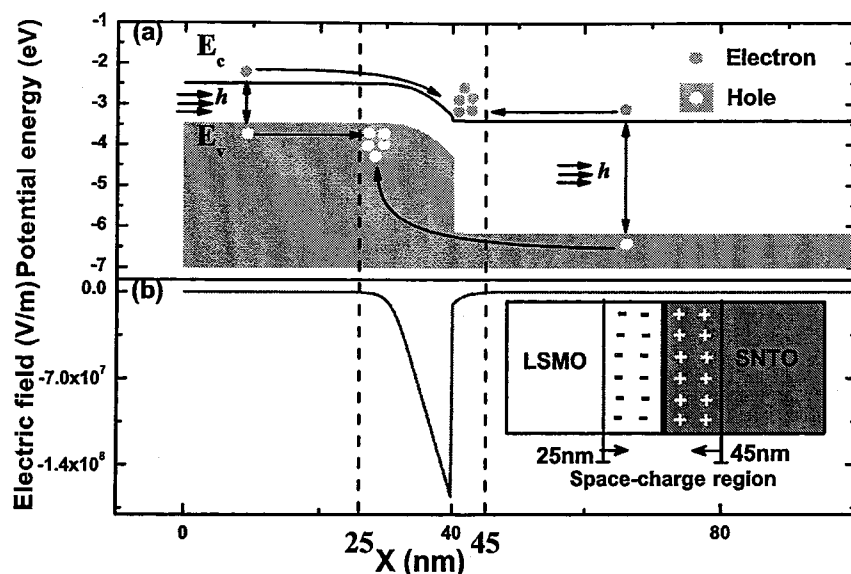


图 2.5 a) 没有光照的时候, LSMO/SNTO 界面附近的导带 (E_c) 和价带 (E_v)。b) 相应的界面附近的电场分布图像。插图是空间电荷区边界在界面两侧的位置。

2.5 LSMO/SNTO 异质结光电效应中的光掺杂效应以及其动态物理过程

通过漂移-扩散模型, 不但可以计算出 LSMO/SNTO 异质结光电效应中的光电压信号随时间演化的过程, 而且也可以计算出异质结中电势分布, 电子与空穴浓度分布随时间演化的过程, 这些物理量变化一般是无法从实验中定量得到。

如图 2.5, 当光照射到 LSMO/SNTO 异质结中的时候, 大量的光生电子和空穴将会被激发出来, 刚刚产生的电子-空穴在空间中处于同一个位置, 因此在电子-空穴对刚被激发出来的时候是不会产生光生电压, 但是由于扩散的作用, 这些电子-空穴对会不断向空间电荷区运动, 但进入空间电荷区后, 由于电子和空穴带相反电荷, 它们将被空间电荷区的电场 (空间电荷区的电场方向是从 N 区指向 P 区的, 见图 2.5) 分离并将朝着不同方向漂移: 电子朝着 N 区运动, 空穴朝 P 区运动, 这样一来 P 区和 N 区的带电量将会改变。原来 P 区所带负电会减少, N 区带正电也会减少, 空间电荷区变窄, 原来无光照时的异质结内的漂移-扩散平衡被打破, P 区的费米能级相对于 N 区将会被抬高, 这样就产生一个从 P

区到 N 区的电势差, 这个电势差便是光生电势。图 2.5, 是我们通过稳态-漂移扩散模型所计算出来的在 LSMO/SNTO 界面附近导带和价带与电场分布图像。

为了更精确地了解在 LSMO/SNTO 异质结纵向光电效应的整个动态物理过程。我们计算了在光电响应两个阶段(光电压上升和光电压下降), LSMO/SNTO 异质结中电子与空穴浓度分布, 电势分布随时间演化的过程。特别是光生载流子在异质结中运动过程, 这直接联系着我们对 LSMO/SNTO 异质结中光掺杂效应的理解。

首先我们计算了在光电压上升的这个时间段内(0-25ns)电子和空穴浓度随时间演化的过程, 图 2.6 是我们计算得到这个时间段内 LSMO/SNTO 异质结中电子空穴浓度相对于初始浓度分布的变化(为了更加清晰地了解载流子浓度的变化过程, 我们以载流子浓度相对于初始分布的变化量作为我们研究的主要对象而不是直接研究两种载流子浓度的演化)。

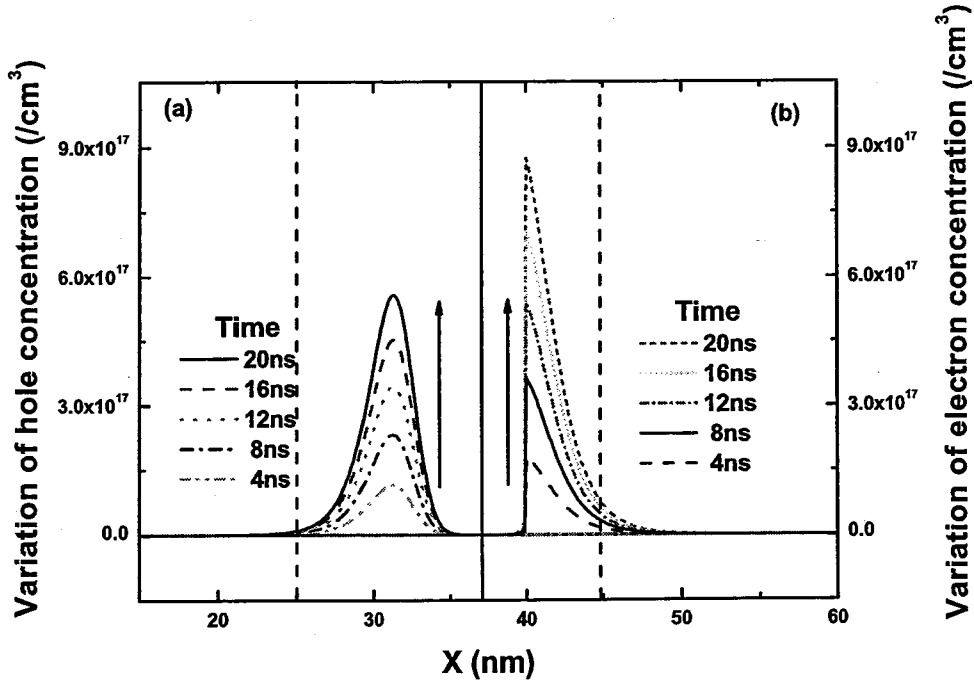


图 2.6 计算得到的光照开始 4ns, 8ns, 12ns, 18ns, 20ns 后, LSMO/SNTO 异质结界面附近电子和空穴浓度分布相对于初始状态的变化; (a) 电子浓度变化, (b) 空穴浓度变化。图中两条虚线代表的是两个空间电荷区边界, 界面在 40 nm 处, 界面右侧是 LSMO, 左侧是 SNTO。

从图 2.6 中我们可以看出, 在光电压上升的这个时间段内, 光激发造成的电

子和空穴浓度变化主要集中在空间电荷区内，对应于图 2.6 中的随时间不断上升的两个峰，电子在空间电荷区内靠近 N 区（SNT0）的一侧不断聚集，空穴在空间电荷区内靠近 P 区的一侧(LSMO)不断聚集。这说明光生电子空穴对在被光激发出来之后的确在空间电荷区内被电场分离。电子会朝着 N 区运动，相应地空穴会朝着 P 区运动。但光生电子在进入 N 区后不会运动出空间电荷区，而是留在空间电荷区内的 N 区一侧，同样的光生空穴在被电场扫入 P 区之后，也是主要留在了空间电荷区内，这说明在 LSMO/SNT0 异质结中，光所造成的电子空穴浓度变化主要是集中在空间电荷区内，而在空间电荷区外的载流子浓度变化就相对比较小，这也说明在光电压上升的时间段内，光掺杂效应主要是集中在 LSMO/SNT0 异质结的空间电荷区内。

同时我们还计算在光电压上升期间，电势分布随时间演化的过程（见图 2.7，在 Poisson 方程的求解中，我们将 SNT0 的计算区域的最右点取为零电势点，因而 N 区电势分别并未发生移动变化主要集中在 P 区；同时电势分布的变化相对于异质结的内建电势差很小，显示整个计算区域内的电势分布将无法观察到电势的演化，于是我们在图 2.7 中只标出了 LSMO 一侧电势分布的变化）。当光照开始的时候，LSMO（P 区）的一侧的电势随着时间会相对于 SNT0（N 区）的一侧逐渐被抬高。也就是 LSMO/SNT0 异质结 P 区和 N 区之间的内建电势差在逐渐减小。但同时，如前文所述异质结两端的载流子浓度并未发生明显改变。因此此图中电势分布的改变量直接对应于 LSMO/SNT0 异质结光生两端费米势的改变，也就是产生了一个 P 区到 N 区的光生电压。

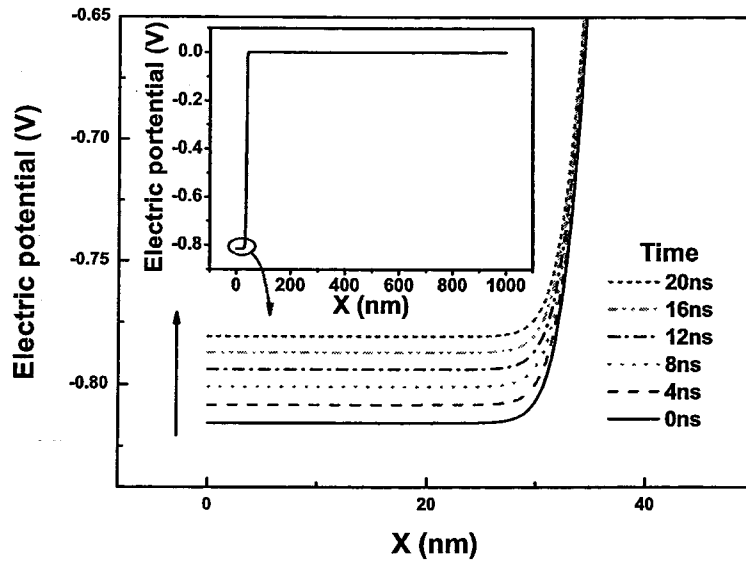


图 2.7, 计算得到的光照开始 0ns, 4ns, 8ns, 12ns, 18ns, 20ns 后, LSMO/SNTO 异质结 LSMO (P 区) 一侧电势分布状态, 插图显示的是未光照的时候整个 LSMO/SNTO 异质结中电势分布的状态

同时我还计算了在光脉冲结束之后, LSMO/SNTO 异质结中电子空穴浓度, 和电势分布随时间的演化过程 (图 2.8)。在整个时间段内, 异质结体系内的各个物理量都向初始状态驰豫: 原来聚集在空间电荷区内的电子空穴逐渐减少, 于是空间电荷区内的电荷也逐渐恢复初始的状态, 这样一来在异质结体系内的电势分布也随着时间逐渐恢复到初始的状态。

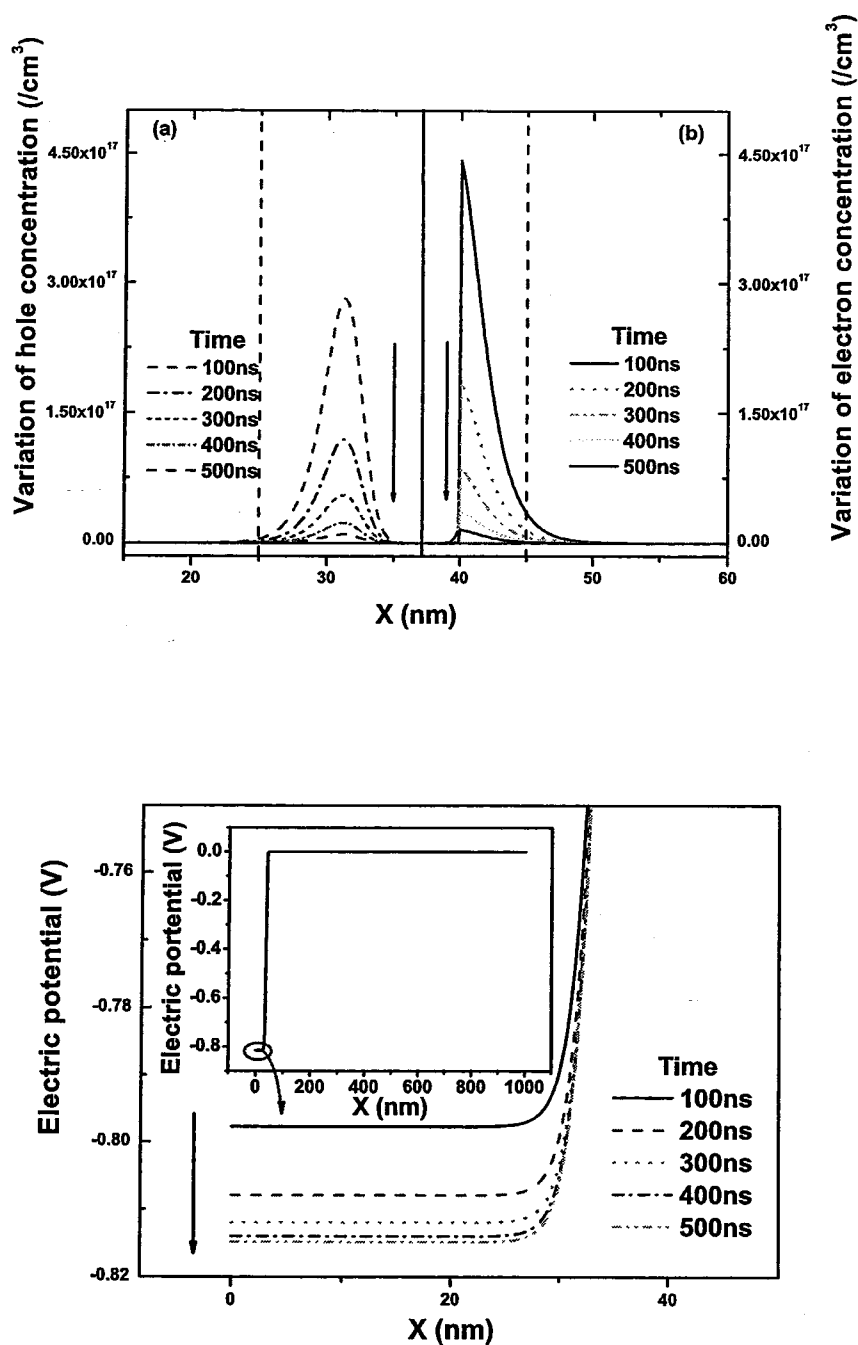


图 2.8, 计算得到的光照开始 100、200、300、400 和 500ns 后, LSMO/SNTO 异质结界
面附近电子和空穴浓度分布和电势分布相对于初始状态的变化; 上图是电子空穴浓度变
化, 下图是空穴浓度变化。

2.6 影响 LSMO/SNTO 异质结光电响应的几个因素

钙钛矿氧化物异质结光电效应的一个重要应用方面就是在使用它设计新的

光电探测器。而光电探测器的一个重要指标便是它的光电响应速度。因此研究钙钛矿氧化物异质结的光电响应对它的实际应用具有非常重要的作用。J. R. Sun 等人在锰基全氧化物异质结中观测到毫秒级响应的光生伏特信号。 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{MnO}_3/\text{SrTi}_{0.99}\text{Nb}_{0.01}\text{O}_3$ (LSMO/SNTO) 异质结观察到了纳秒响应的光电效应我们课题组在 $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{Si}$ 异质结中发现了具有皮秒响应的光电效应。但这些工作仍然是局限于实验的研究, 为了更好理解钙钛矿氧化物异质结中光电响应, 应该在理论上对其做细致的分析。

在本节的工作中, 我们将使用漂移-扩散模型, 从理论上细致分析影响 LSMO/SNTO 异质结光电响应的几个因素。

首先我们注意到在我们的实验中并联电阻将会非常直接地影响钙钛矿氧化物异质结的光电响应, 于是我们计算了在同样的光照下, 并联不同电阻, LSMO/SNTO 异质结光电响应性质的变化(图 2.9)。在计算中我们发现当并联电阻越小的时候, 光电压信号会越快达到峰值, 同时在光照结束后光电压信号衰减越快。说明小的电阻会提高 LSMO/SNTO 异质结的光电响应速度。但这并不是说明电阻越小越好, 从图 2.9 中可以看出随着电阻减小, 光电压的峰值也同时在下降, 这说明小电阻在提高光电响应的速度的同时, 也减小了灵敏度。也就是说通过改变并联电阻不能同时提高 LSMO/SNTO 异质结的灵敏度和速度。这个结论也得到了实验方面的验证[26]。因此在设计 LSMO/SNTO 的光电器件的时候, 应该灵活地选择并联电阻, 当我们需要更快的器件的时候, 就应该选择小的并联电阻, 如果我们需要更灵敏的光电器件就应该选择比较大的电阻。

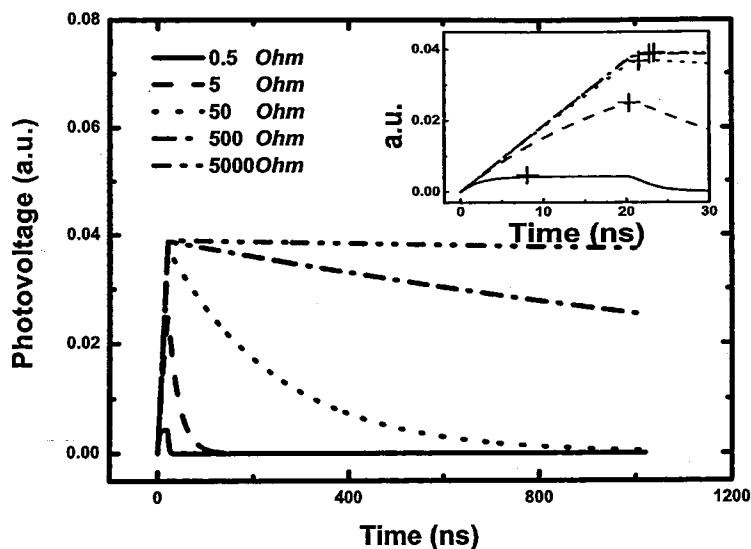


图 2.9 计算得到的在不同并联电阻下 (0.5, 5, 50, 500, 5000 Ω), LSMO/SNTO 异质结光电响应的变化, 插图是放大的光电压上升阶段在不同并联电阻下的变化, 当电阻越小的时候光电压上升越快, 同时光电压衰减的也越快, 但是光电压峰值越小。

电阻对 LSMO/SNTO 异质结光电响应的影响可以通过一个更为简化的物理模型来理解。可以把异质结光电效应的过程看作一个电容的充电和放电过程, 这个电容就是异质结的结电容。当光照射到异质结产生电压的时候, 对应于这个假想电容的充电, LSMO 区一侧充正电, 因为带正电的光生空穴被空间电荷区电场扫入异质结 LSMO 一侧; 相应地 SNTO 一侧带负电, 对于带负电的光生电子被扫入异质结 SNTO 一侧, 这样就在电容的两端产生了一个电压, 这个电压对应于光电压。当光照结束后, 电容中的电荷会通过并联的电阻流出电容。这样

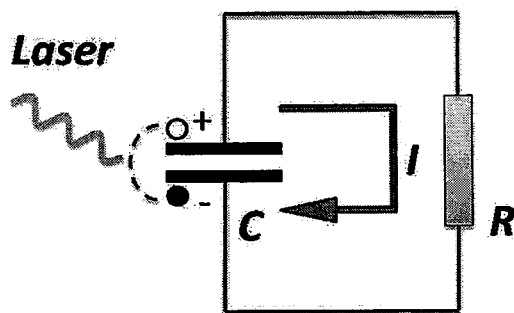


图 2.10 异质结光电效应的 RC 电路简化示意图, C 代表电容, R 代表电阻, I 代表电流。蓝色箭头代表电路中的电流方向。

LSMO/SNTO 异质结光电效应便可以简化地认为是一个 RC 电路的充放电过程, 如图 2.10 所示。以如上光电效应的 RC 电路简化模型可以很好地理解电阻对于

LSMO/SNTO 光电响应的影响。

对于光电压上升的阶段，电阻越小的时候，流出异质结（对应图 2.10 中的电容 C ）的电流 I 越大，那么光照造成的电容充电和电阻 R 造成的电容放电之间就会越快达到平衡，也就是光电压会更快达到峰值电压，但由于小电阻造成了更快的放电速度，在达到光电压峰值的时候，等效的电容 C 上带电量也将越小，那么对应光电压峰值也就越小。

光电压衰减的阶段可以视为一个 RC 电路的简单放电过程， RC 电路电压衰减可以用一个简单的公式描述

$$V(t) = V_0 \exp(-t / RC) \quad (2.10)$$

其中 $V(t)$ 代表电容器两端的电压也对应于异质结两端的电压， V_0 代表放电开始前电容器两端的初始电压对应于光电压的峰值电压， t 代表放电开始的时间； R 和 C 分别代表电阻和电容。从公式 2.10 可以看出，电压呈指数衰减的，其衰减寿命为 $\sqrt{RC}$ ，也就是电阻越小电压衰减的越快。这正是对于我们计算的得到的并联电阻越小，光电压光电压衰减的越快的计算结果。

当光子能量高的时候，在材料中激发出的光生电子和空穴的剩余能量将越

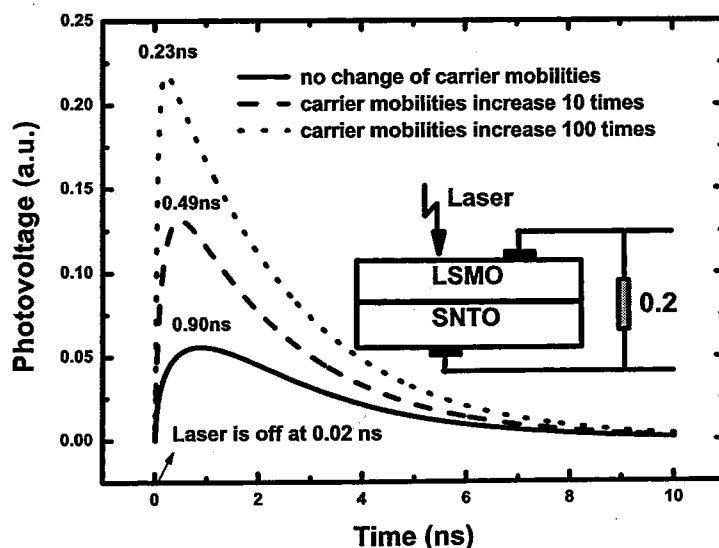


图 2.11，计算得到的在载流子迁移率升高，也就是照射的光子能量升高对 LSMO/SNTO 异质结光电响应的影响。其中峰值位置分别在 0.90ns，0.49ns 和 0.23ns，光子能量越高光电压上升速度越快，同时峰值越大。

高,那么光生载流子的运动速度也将提高,这将表现为载流子的有效迁移率的提高。从迁移率的提高出发,我们研究了照射在 LSMO/SNTO 异质结上的光子能量也就是光的波长对其光电响应的影响。图 2.11 是我们计算的载流子迁移率的升高也就是光子能量的提高对 LSMO/SNTO 异质结光电响应的影响(激光脉冲宽度为 0.02ns,并联电阻为 0.2 Ω)。从图中可以看出载流子的迁移率越高也就是光子能量越高,光电压上升到峰值的时间越快,同时光电压峰值越高。

这也同样可以用上文中提到 RC 电路简化模型来解释,在光电压上升的阶段,也就是电容充电阶段,越高的光子能量将产生运动速度越快的光生电子空穴对,这些电子空穴对也就会越快到达空间电荷区然后被分离,这样使得光电压越快达到峰值。同时由于光电压上升到峰值的时间缩短了,在这个时间段内流出电容的电量也就相对减少,那么就有更多的电量造成更高的电压,也就是高能量的光子会产生一个高的光电压峰。

这说明高的光子能量(短波长的光波)会提高 LSMO/SNTO 异质结的光电响应速度的同时也可以提高光电响应的灵敏度。

2.7 小结

在本章中,我们以含时漂移-扩散模型为基础发展了一套描述钙钛矿氧化物异质结光电效应的物理模型。并使用这一模型研究了 LSMO/SNTO 异质结中光电效应的动态物理过程。计算得到的光电压随时间演化过程同实验结果有很好的符合,这说明我们的模型的确是适用描述 LSMO/SNTO 异质结光电效应的。我们相应地还研究了 LSMO/SNTO 异质结的光掺杂效应,发现光掺杂效应主要集中在异质结的空间电荷区内,而在其他区域光掺杂效应则不是很明显,这对我们进一步研究钙钛矿氧化物异质结的光磁电耦合性质有重要的意义。我们还使用这一模型分析了影响 LSMO/SNTO 异质结光电响应的几个重要因素,我们发现测量电路中的并联电阻越小,产生的光电响应将会越快但光电响应的灵敏度会越低;照射光子能量越高,产生光电响应的速度会越快,光电压的峰值也会越高。这对我们设计钙钛矿氧化物异质结光电器件有一定指导意义。

本章参考文献

1. H. Katsu, H. Tanaka, and T. Kawai, Appl. Phys. Lett. 76, 3245(2000).
2. Y. Muraoka, T. Yamauchi, Y. Ueda and Z. Hiroi, J. Phys.:Condens. Matter 14, L757(2002).
3. Z. Hiroi, T. Yamauchi, Y. Muraoka, T. Muramatsu, and J.-I. Yamaura, J. Phys. Soc. Jpn. 72, 3049(2003).
4. Y. Muraoka, T. Yamauchi, T. Muramatsu, J. Yamaura, and Z. Hiroi, J. Magn. Magn. Mater. 272-276,448(2004).
5. Y. Muraoka, and Z. Hiroi, J. Phys. Soc. Jpn. 72, 781(2003).
6. Y. Muraoka, T. Muramatsu, and Z. Hiroi, Thin Solid Films 486,82(2005).
7. Y. Muraoka, T. Muramatsu, J. Yamaura, and Z. Hiroi, Appl. Phys. Lett. 85, 2950.
8. T. Muramatsu, Y. Muraoka, T. Yamauchi, J. Yamaura, and Z. Hiroi, J. Magn. Magn. Mater. 272-276, e787(2004).
9. G.Yu, C.H.Lee, A.J. Heeger, N.Herron and E.M. McCarron, Phys. Rev. Lett., 67, p. 2581 (1991).
10. H. Tanaka, J. Zhang, and T. Kawai, Phys. Rev. Lett., 88, p. 027204.1 (1997).
11. A. Urushibara, Y. Moritomo, T. Arima, A. Asamitsu, G. Kido and Y. Tokura, Phys. Rev. B, 51,14103(1995).
12. S. Selberherr, Analysis and Simulation of Semiconductor Devices, Springer-Verlag Wien-New York, 1984, p. 128.
13. M. Sugiura, K. Uragou, M. Tachiki, and T. Kobayashi, J. Appl. Phys. 90, 187-191(2001):.
14. K. J. Jin, H. B. Lu, Q. L. Zhou, K. Zhao, B. L. Cheng, Z. H. Chen, Y. L. Zhou, and G. Z. Yang, Phys. Rev. B 71, 184428(2005).
15. C. Mitra, P. Raychaudhuri, K. Dorr, K-H. Muller, L. Schultz, P. M. Oppeneer, and S. Wirth. Phys. Rev. Lett. 90, 017202(2003).
16. C. C. Wang, M. He, F. Yang, J. Wen, G. Z. Liu, and H. B. Lu, Appl. Phys. Lett.

- 90, 192904(2007).
17. N. Nakagawa, M. Asai, Y. Mukunoki, T. Susaki, and H. Y. Hwang, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 082504(2005).
18. Q. L. Zhou, K. J. Jin, H. B. Lu, P. Han, Z. H. Chen, K. Zhao, Y. L. Zhou, and G. Z. Yang, *Europhys. Lett.* **71**, 283-289(2005).
19. J. Qiu, K. J. Jin, P. Han, H. B. Lu, C. L. Hu, B. P. Wang and G. Z. Yang, *Europhys. Lett.* **79**, 5700 (2007).
20. K. Yang, J. R. East and G. I. Haddad, *Solid-St. Electron.*, **36**, pp. 321-330 (1993).
21. 刘恩科, 朱秉升, 罗晋生 等编著, 半导体物理学 (第六版): 电子工业出版社 (2003)
22. W. Shockley, W. T. Read, *Phys. Rev.*, **87**, p. 835 (1952).
23. K.-J. Jin, H. B. Lu, Q. L. Zhou, K. Zhao, B. L. Cheng, Z. H. Chen, Y. L. Zhou, and G. Z. Yang, *Phy. Rev. B*, **71**, p. 184428, (2005); Q. L. Zhou, K.-J. Jin, K. Zhao, D. Y. Guan, H. B. Lu, Z. Hao Chen, and G. Z. Yang, *Phys. Rev. B*, **72**, 224439 (2005); K.-J. Jin, H. B. Lu, Q. Li. Zhou, K. Zhao, G. Z. Yang, *J. Magn. Magn. Mater.* **303**, pp. 329-332 (2006); P. Han, K.-J. Jin, H. B. Lu, Q. L. Zhou, Y. L. Zhou, and G. Z. Yang, *Appl. Phys. Lett.*, **91**, p. 182102 (2007).
24. S. Ohta, T. Nomura, H. Ohta and K. Koumoto, *J. Appl. Phys.*, **97**, p. 034106 (2005).
25. L. M. Wang, C.C. Liu, H. C. Yang, H. E. Hong, *J. Appl. Phys.*, **95**, p. 4928 (2005).
26. Huang Y H, Jin K J, Zhao K, Lu H B, He M, Chen Z H, Zhou Y L and Yang G Z *Chin. Phys. Lett.* **23**, 982(2006)

第三章 钙钛矿氧化物异质结的横向光电效应

3.1 引言

在上章中，我们研究了钙钛矿氧化物异质结中的纵向光电效应（Transverse photovoltage, TPV），值得注意的是其中使用的光源是均匀照射在异质结表面。如果光源是非均匀照射在异质结表面，光强在平行于异质结表面方向的对称性被破坏，这样在这个方向会产生一个不均匀的电势分布，于是在平行于异质结表面的方向的不同位置间便会产生一个电势差（图 3.1），这个效应被称为横向光电效应（Lateral photovoltage, LPV）。

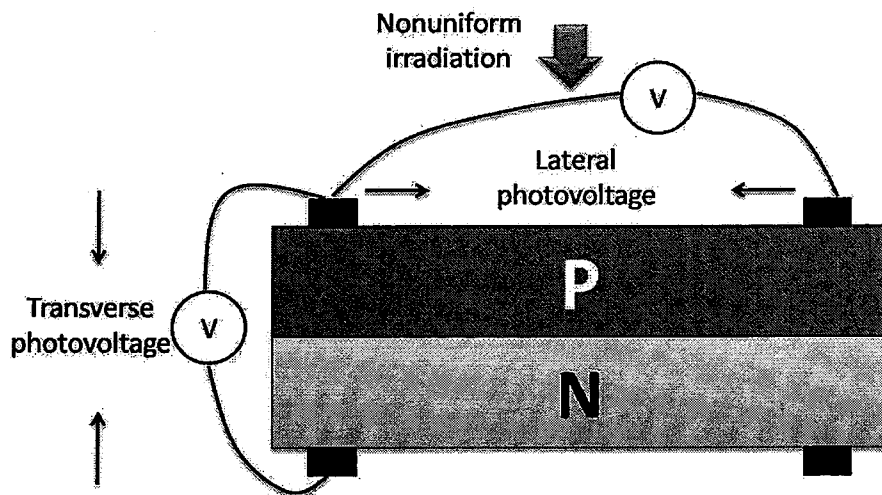


图 3.1 纵向光电和横向光电效应示意图。

横向光电效应最早是 Schottky 在 1930 年提出的[1]。1957 年，Wallmark 对点光斑照射产生的横向光电效应进行了细致的理论分析和实验研究[2]。1960 年，Lucovsky 提出了普遍描述横向光电效应的数学方程。不过 Lucovsky 的方程描述的是体系是一侧重掺杂的 pn 结 (p^+n 或 pn^+)，于是 1976 年 Hirohiko 等人发展了 Lucovsky 的理论，讨论了没有重掺杂假设的横向光电效应的理论模型[3]。1976 年 T. Niu 等人发展了 Lucovsky 的理论，讨论了没有重掺杂假设的横向光电效应的

理论模型[4]。1991 年 S. Amari 又将横向光电效应的理论研究推广到了二维，并且给出了解析的结果[5]。横向光电效应对光的照射位置非常敏感，因此横向光电被广泛地用于位置探测器的设计，大量工业应用的工作在 Wallmark 和 Locovsky 的工作之后被开展[6-14]。在这方面，J. Henry 的研究工作比较突出，他在肖特基型位置探测器的方面做出了大量深入而系统的工作。目前通过横向光电效应设计出来的位置探测器的灵敏度已经达到了 30 mV/mm ($\text{Co-SiO}_2\text{-Si}$, CoMnO-Si) [15,16]，表现出了良好的工业应用前景。

以往的工作都主要是使用传统恒定光源照射在传统半导体 pn 结或肖特基结上产生横向光电效应。对于钙钛矿氧化物异质结和使用强的脉冲激光所产生横向光电效应方面的工作还进行比较少，钙钛矿氧化物的特殊性质和接近材料极限的强光照射使得我们可以期望这类横向光电效应有可能会产生不同于传统光电效应的现象，甚至于产生新的工业用途。我们研究组的吕惠宾研究员，金奎娟研究员还有赵昆教授也的确在钙钛矿氧化物异质结中发现了反常的横向光电现象并做了初步理论分析[17]，在后文中我们将比较详细介绍这方面的工作。

在本章中，我们将分析 Lucovsky 模型的应用于脉冲激光照射情形下的异质结横向光电效应的局限性，并且基于二维的含时漂移-扩散模型，建立起描述脉冲激光照射下的异质结横向光电效应的物理模型。并将从计算的角度讨论此模型的计算困难和解决方案。最后，我们使用此模型和方法，对我们组在钙钛矿氧化物异质结中发现的反常横向光电效应进行了计算，我们计算结果表明强激光照射使得异质结达到光电效应饱和一种在传统理论中被忽略的 Demer 效应被增强造成了这种反常的光电效应。并且在计算中得到了随着光强增加，横向光电效应从正常到反常过渡的过程。

3.2 描述稳态横向光电效应的 Lucovsky 模型简介以及对其局限性的讨论

首先，我们先回顾一下描述恒定或者准恒定光源照射产生的横向光电效应的 Lucovsky 模型。这个模型首先是由 G. Lucovsky 在 1960 年提出并给出了模型解析解[3]，此后横向光电效应的理论研究都是在 Lucovsky 的模型框架下的发展和

深入。因此，通过这个经典模型阐述可以了解产生横向光电效应的物理过程。

在 Lucovsky 模型中考虑的是这样一个一侧重掺杂的 pn 结 (p^+n 或 pn^+)，后文中我们将以 pn^+ 结为例阐述 Lucovsky 模型。实际上重掺杂的假设是为了简化我们面对的物理对象。重掺杂的一侧载流子浓度相对于另外一侧要高出几个数量级，也就是说重掺杂一侧的电导率会比另外一侧高很多。那么根据欧姆定律，重掺杂一侧的横向电压相对于非重掺杂的一侧就可以被忽略，也就是在模型中认为这一侧没有光生电压，或者说是这重掺杂一侧表面是一个等势面。通过这样一个假设，便可以使得我们将问题的关键放在非重掺杂的一侧，简化了模型。

可以从图 3.2 得到 pn^+ 结横向光电效应定性的理解。当光局域地照射在 p 区

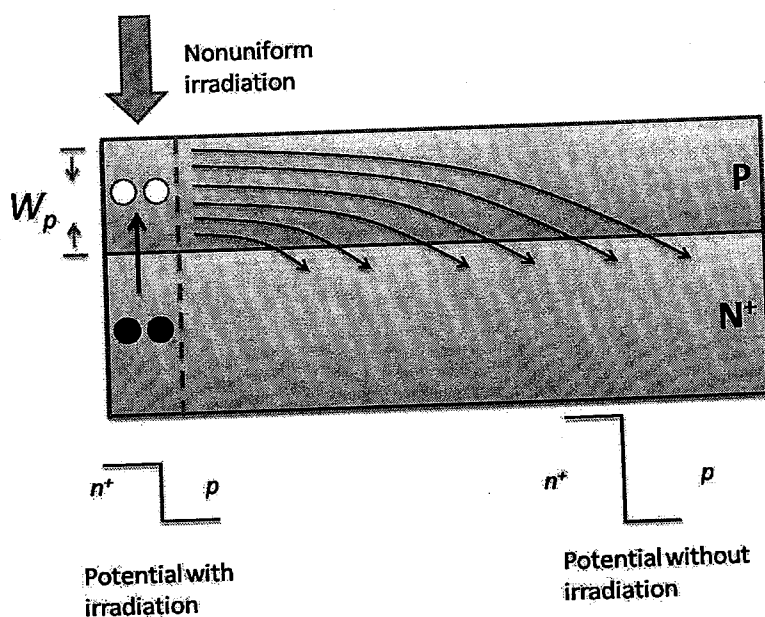


图 3.2 pn^+ 结横向光电效应示意图。

表面的一个区域。那么首先会在这个区域内激发出光生电子-空穴对，电子-空穴对会扩散到结的空间电荷区然后被分离。在内建电场的作用下，电子被注入到 N 区，空穴被注入到 P 区，如同前一章所述，光照区域的纵向光电效应产生，这个区域内的 P 区和 N 区之间的内建电势差被减小，而在未被光照的区域这个电势差未发生改变或者改变很小。这个差别使得光照区域和未光照区域之间产生了一个横向的电势差，这个电势差便是横向光生电压 (LPV)。

横向的电势差产生的同时也会产生横向的电流，横向电流同横向电压的之间

的关系满足欧姆关系: $V=IR$, 同时根据基尔霍夫定律, 当光电效应达到稳定的时候, pn^+ 结体系内每一点都不会有电荷积累, 也就是流入某一点的电荷等于流出某一点的电荷。Lucovsky 模型思想核心便是通过欧姆定律和稳态电路的基尔霍夫定律来建立描述稳态横向光电效应的模型。

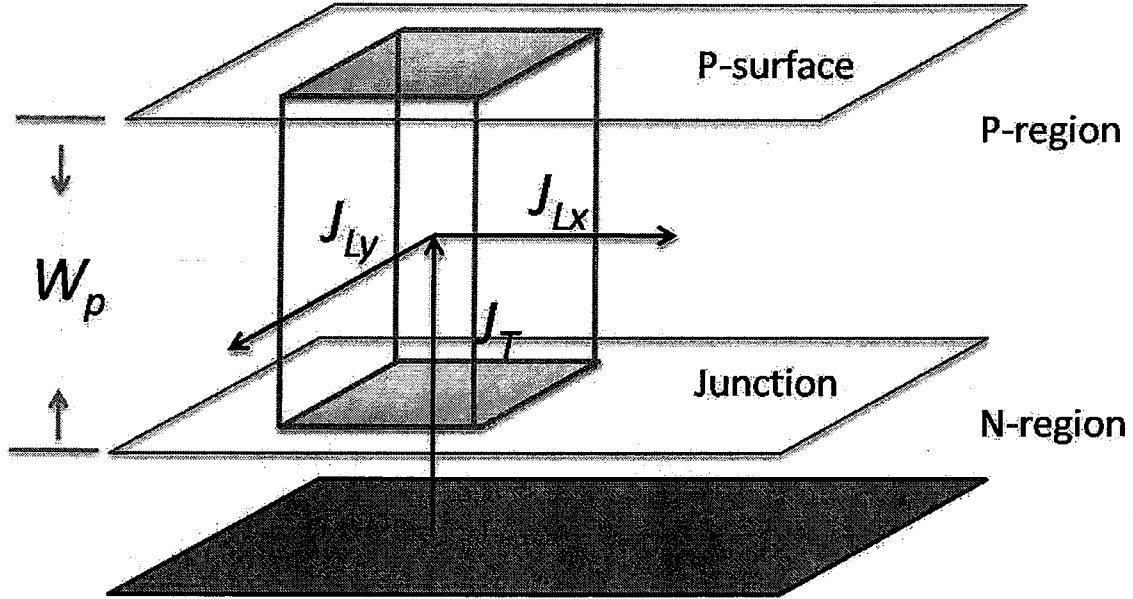


图 3.3 pn^+ 结稳态横向光电中一个小区域内的电流流向示意图, 其中 W_p 表示 P 区的厚度, J_T 表示纵向光电流密度, J_{Lx} 和 J_{Ly} 分别是两个方向的横向光电流密度。

如图 3.3 考虑 P 区一个小的立方体区域, 在横向光电效应达到稳定状态的时候, 流入或者流出这个区域的电流有三种 1) 垂直于交界面的光电流密度 J_T ; 2) 平行于界面两个方向的光电流密度 J_{Lx} , J_{Ly} 。由于体系以及达到了一个稳定状态, 根据基尔霍夫定律, 这个区域内将不会有电荷的积累和耗散, 也就是 $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ 。

将图 3.3 的区域推至极限, 就有光电流之间的关系式如下:

$$\frac{dJ_L(r)}{dr} = -\frac{J_L(r)}{r} - \frac{J_T(r)}{W_p}, \quad (3.1)$$

其中 r 是将横向二维坐标 x, y 转换为极坐标 (r, θ) , W_p 是图 3.3 中 p 区的厚度。

纵向电流分为两个部分, 1) 而根据理想 pn 结的纵向电流关系可以得到第一部分:

$$J_{T1}(r) = J_s(e^{e\phi(r)/kT} - 1) \quad (3.2)$$

其中 J_s 是 pn 结的反向饱和电流, 它具有形式: $j_s = e(\frac{D_n}{L_n} n_p^0 + \frac{D_p}{L_p} p_n^0)$, 其中 n_p^0 , p_n^0 分别是 P 区和 N 区的热平衡电子和空穴浓度; e 为单电子电量; D_n , D_p 分别是电子和空穴的扩散系数; L_n , L_p 分别是电子和空穴的扩散长度。 k 和 T 分别是玻尔兹曼常数和温度。 $\varphi(r)$ 是 P 区的电势分布, 需要强调的是我们假设了在 N 区重掺杂, 因此 N 区被认为是一个等势区, 在纵向电流的公式中, N 区被认为是电势为 0, 那么 P 区和 N 区间的纵向光电压就直接用 $\varphi(r)$ 代替。 2) 光生电子空穴对在空间电荷区被分离形成的纵向电流密度:

$$J_{T2}(r) = -\frac{ef}{2\pi r \Delta r}, \quad (3.3)$$

其中 f 是横向单位面积中电子-空穴对被分离的速率 (在没有光照的区域此部分电流为 0)。

那么总纵向光电流便是:

$$J_{T2}(r) = J_{T1}(r) + J_{T2}(r) = J_s(e^{e\varphi(r)/kT} - 1) - \frac{ef}{2\pi r \Delta r} \quad (3.4)$$

横向电流密度可以很容易通过欧姆定律得到:

$$\frac{d\varphi(r)}{dr} = -\rho_p J_L(r), \quad (3.5)$$

其中 ρ_p 是 P 区的电阻率。

将公式(3.2)和(3.4)代入到公式(3.1)中可得:

$$\frac{d^2\varphi(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\varphi(r)}{dr} - \frac{\rho_p J_s}{W_p} (e^{e\varphi(r)/kT} - 1) = \begin{cases} \frac{e\rho_p f}{W_p}, & \text{有光照的区域} \\ 0, & \text{没有光照的区域} \end{cases}, \quad (3.6)$$

这个方程便是 Lucovsky 提出的描述 pn 结横向光电效应的模型。这个方程是一个求解 P 区电势分布 $\varphi(r)$ 的方程。 Lucovsky 还提出了含时的横向光电方程, 用于描述光强随时间变化的情形:

$$\nabla^2 \varphi(r, t) - \frac{\rho_p C}{W_p} \frac{\partial \varphi(r, t)}{\partial t} - \alpha^2 \varphi(r, t) = -\frac{e\rho_p}{W_p} f(r, t), \quad (3.7)$$

其中 C 是结电容。相应地 Lucovsky 还给出此方程的解析解。

尽管 Lucovsky 模型已经广泛地被应用在横向光电效应的研究中, 但是

Lucovsky 模型并不是一个绝对正确的模型,其中包含了大量的假设,这些假设使得这个模型具有极大的局限性。下面我们将讨论 Lucovsky 模型的局限性和为什么这个模型不能用于研究强的脉冲激光下的横向光电效应。

Lucovsky 模型中隐含的前提假设:

1) 假设 pn 结的空间电荷区完全集中在 pn 结界面处附近,在这个区域外就是中性的区域没有电场。

2) 简单地认为只有垂直于界面处一个扩散长度内的光生载流子可以到达空间电荷区,且不考虑空间电荷区产生的光生载流子.也就是认为空间电荷区的宽度远远小于载流子的扩散长度。

3) 将纵向光电效应产生的电流认为是可以简单地套用小信号模型公式去计算,同时公式也只是考虑同质结情形。当光强足够,体系将偏离小信号模型所能描述的范畴。

4) 对于非稳态的横向光电效应,实际上模型是假设纵向光电流部分是处在稳态的,也就是直接套用属于稳态的纵向光电流公式计算。这实际上描述的只是一个准稳态的问题,当光强的随时间变化的速度超过了结纵向电流响应的速度, Lucovsky 模型就会失效。

5) 将结光电压同结内电荷的关系直接使用电容 C 来描述,这是一个极其简化的线性关系,若光强足够强,以至于可以使体系偏离线性情形的时候, Lucovsky 模型便不再适用了。

5) 没有区分电子和空穴对电流的贡献,无法得到电子和空穴相互作用可能产生的情况。

6) 将 P 区和 N 区电阻率认为是恒定的且处处相同,也就是光电过程中不发生变化,这也是不合理的,特别是当光生激发的电子空穴足够多时,材料的电阻率会发生明显的变化。而且在界面附近由于空间电荷区的存在,电阻率是无法保持处处相同的。

7) 认为在 P 区或者 N 区的电势 $\phi(r)$ 只是横向方向坐标的函数,与纵向方向位置无关,这也是不合理的。电势分布在结内的分布同纵向和横向两个方向的位置都应该相关的。

总的来说, Lucovsky 模型前提假设在低的光强和慢的光强变化情形下是近似

成立的，但是当我们使用的光源足够强，速度足够快的时候，很明显 Lucovsky 模型将不再适用，而我们面对恰恰是这样的一个问题，因此我们必须寻找新的更完备的模型来描述横向光电效应。

3.3 描述横向光电效应的二维含时漂移-扩散模型

为了更准确地描述横向光电效应，我们讨论问题的出发点必须从最基本的漂移-扩散模型出发，与 Lucovsky 模型比较，漂移-扩散模型可以完全避免 Lucovsky 模型中的前提假设。如果要描述在强和超快激光作用下的动态横向光电效应，必须使用漂移-扩散模型

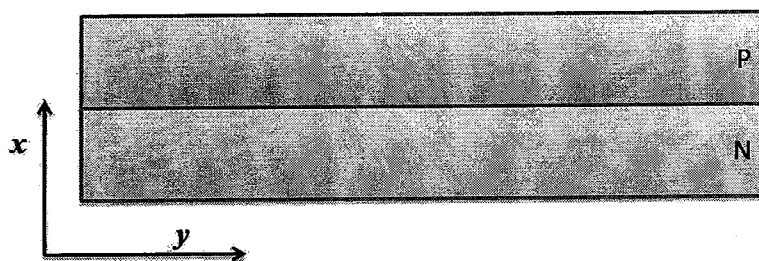


图 3.3 二维漂移-扩散模型示意图

[18]:

$$\frac{\partial^2 \phi(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y, t)}{\partial y^2} = -\frac{e}{\epsilon} [p(x, y, t) - n(x, y, t) + N], \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial p(x, y, t)}{\partial t} = -\frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{j}_p(x, y, t) + G(x, y, t) - R(x, y, t), \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial n(x, y, t)}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{j}_n(x, y, t) + G(x, y, t) - R(x, y, t), \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \vec{j}_p(x, y, t) = & [-e\mu_p p(x, y, t) \frac{\partial \phi(x, y, t)}{\partial x} - kT\mu_p \frac{\partial p(x, y, t)}{\partial x}] \cdot \vec{i}_x \\ & + [-e\mu_p p(x, y, t) \frac{\partial \phi(x, y, t)}{\partial y} - kT\mu_p \frac{\partial p(x, y, t)}{\partial y}] \cdot \vec{i}_y \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} \vec{j}_n(x, y, t) = & [-e\mu_n n(x, y, t) \frac{\partial \phi(x, y, t)}{\partial x} + kT\mu_n \frac{\partial n(x, y, t)}{\partial x}] \cdot \vec{i}_x \\ & + [-e\mu_n n(x, y, t) \frac{\partial \phi(x, y, t)}{\partial y} + kT\mu_n \frac{\partial n(x, y, t)}{\partial y}] \cdot \vec{i}_y. \end{aligned} \quad (3.12)$$

其中 x, y : 纵向和横向方向的坐标位置，

$\Phi(x, y, t)$: 电势分布函数，

$n(x, y, t), p(x, y, t)$: 电子和空穴浓度分布函数，

$\vec{j}_n(x, y, t), \vec{j}_p(x, y, t)$: 电子和空穴电流密度矢量,

i_x, i_y : 沿 x, y 两个坐标方向的单位矢量

e, ε, N : 单位电子电量, 材料介电常数, 净掺杂浓度,

μ_n, μ_p : 电子和空穴的迁移率

k, T : 玻尔兹曼常数和温度,

$G(x, y, t)$: 光生电子空穴对产生率, 其表示为 $G(x, y, t) = I_0(y) \alpha \beta \exp(-\alpha x)$ (没有光照时 $G(x, y, t) = 0$), α 代表材料的光吸收系数, β 代表量子效率 $I_0(y)$ 代表入射光子流密度。一般计算中认为 $I_0(y)$ 是一个高斯分布函数:
 $I_0(y, t) = \exp(-y^2/\sigma^2)$.

$R(x, y, t)$: 非平衡电子空穴复合率, 在后面的计算中采用的是 SRH 复合模型[19]。

在界面我们仍然使用 Richardson 热电子发射机制作为界面输运机制。求解这套方程组的初始条件可以通过求解稳态的漂移-扩散模型得到, 稳态的漂移-扩散模型已经在我组关于钙钛矿氧化物异质结的输运研究上被很成熟地运用, 得到了很好的结果[20-22]。

3.4 含时二维漂移-扩散模型的求解困难以及解决方案

有了描述横向光电效应的二维含时漂移-扩散模型, 问题的关键便是求解这套方程组。观察公式 (3.8-3.12), 我们可以看到这是一套彼此耦合的非线性二阶微分方程组, 其中包含了椭圆型和抛物型两种方程, 结构非常复杂, 很难如同 Lucovsky 模型那样得到解析解。于是我们必须通过数值方法对其进行数值求解, 但是数值求解这套方程依然存在巨大的困难:

1) 数值求解可以预期的计算量非常大, 因为我们处理的是一个二维问题, 其时间复杂度是 $n \times n$, 网格划分就会产生巨大的计算量。同时二维的漂移-扩散方程组之间的耦合非常复杂, 建立起稳定的数值计算格式非常困难。

2) 在研究横向光电效应中我们面对的对象非常特殊, 计算区域不是一个简单的矩形, 而是

一个两维度方向的计算尺度差别非常大的区域

(如图 3.4, 两个维度尺度差别有四个数量级)。

这在迭代求解的过程

会产生很严重的舍入误差。特别是对二维 Poisson 方程的求解, 方程的二阶性会把这个尺度差别放大两数量级, Poisson 方程求解的迭代过程很难在目前编程语言的数值精度下收敛。

于是我们分裂原来的二维 Poisson 方程为两个一维 Poisson 方程如下:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \phi_2(x, y, z)}{dx^2} + \frac{d^2 \phi_2(x, y, z)}{dy^2} &= -\frac{\rho_2(x, y, z)}{\varepsilon} \Rightarrow \\ \frac{d^2 \phi_1(x)}{dx^2} &= -\frac{Q(x)}{\varepsilon} \\ \frac{d^2 \phi_2(x, y, z)}{dy^2} &= -\frac{\rho_2(x, y, z)}{\varepsilon} \\ \phi(x, y, z) &= \phi_1(x) + \phi_2(x, y, z) \end{aligned} \quad (3.13)$$

通过 (3.13) 的分裂过程, 将避免在计算中两个维度之间耦合从而避免了在求解中产生的舍入误差。同时分裂之后的 Poisson 方程可以很自然地同连续性方程的格式耦合得到稳定的计算格式。

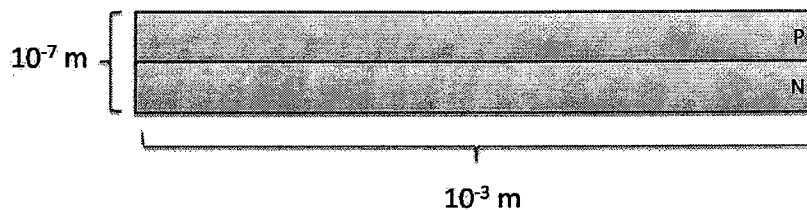


图 3.4 计算区域两个维度的尺度差别差 4 个数量级

3.5 正常的横向光电效应和在钙钛矿氧化物异质结中发现的反常横向光电效应

考虑一个被非均匀光照射的 pn 结如图 3.5, 根据 Lucovsky 的传统横向光电效

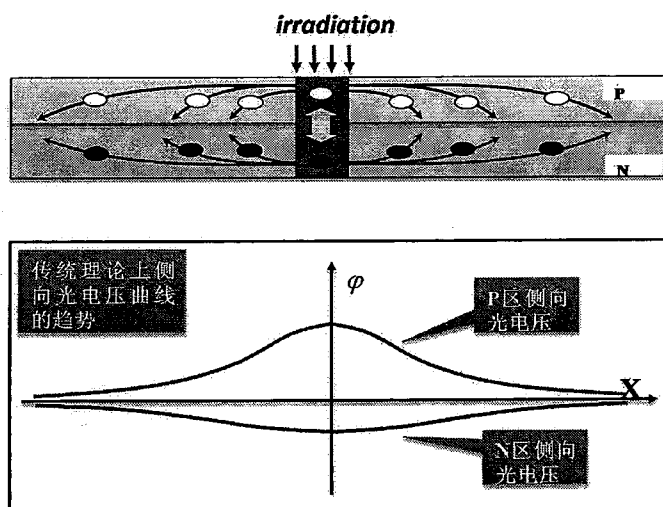


图 3.5 正常的横向光电效应

应理论, 在 P 区受光照的区域的光生空穴会向没有光照的区域移动, 这样就在 P 区产生一个从光照区域指向未光照区域的光电流, 如图 3.5 所示; 相应的在 N 区受光照的区域的光生电子会向着没有光照的区域移动, 由于电子带负电, 这样就形成了一个从未光照区域指向光照区域的光电流, 光电流方向同 P 区的光电流方向正好相反。根据欧姆定律, 电势下降的方向同电流的方向是相同的。那么在 P 区是光照区域的电势高于未光照区域的电势, 而在 N 区是光照区域的电势低于未光照区域的电势, 如图 3.5 下图所示。

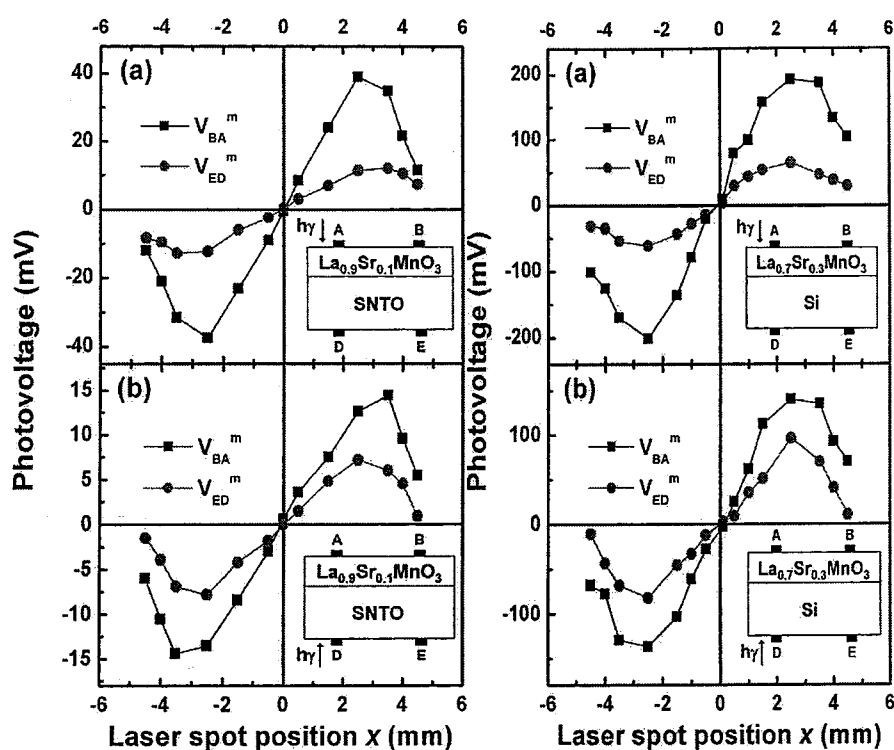


图 3.6 LSMO/SNTO 和 LSMO/Si 异质结中发现的反常横向光电效应

但是在实验上，我们在 LSMO/SNTO 和 LSMO/Si 两种异质结中发现了与传统横向光电效应不同的横向光电现象[17]。

在这两种异质结的 P 区表面分别焊上 A、B 两个电极，在 N 区表面焊上 C、D 两个电极，电极之间的距离为 6mm。同一个表面的两个电极之间的中点位置设为坐标零点，A、C 两个电极的位置为 -3mm，B、D 两个电极的位置为 3mm。然后一个线宽为 0.5mm 的光斑照射在异质结的 P 区和 N 区表面（光源是 20ns 的 XeCl 脉冲激光，脉冲能量为 0.15mJ，为了避免热效应照射的频率是 5min 一次），并沿着平行于界面的方向移动。测量 P 区电极 A、B 之间的电压 V_{BA} 和 N 区电极 D、E 之间电压 V_{ED} 随光斑位置移动的变化趋势，测量的数据如图 3.6 所示。

可以看出在 LSMO/SNTO 和 LSMO/Si 异质结上 P 区和 N 区的横向光电效应的趋势是一致的。图 3.6 的数据如果转换为光斑附近电势分布的情况便是图 3.7 的情形。

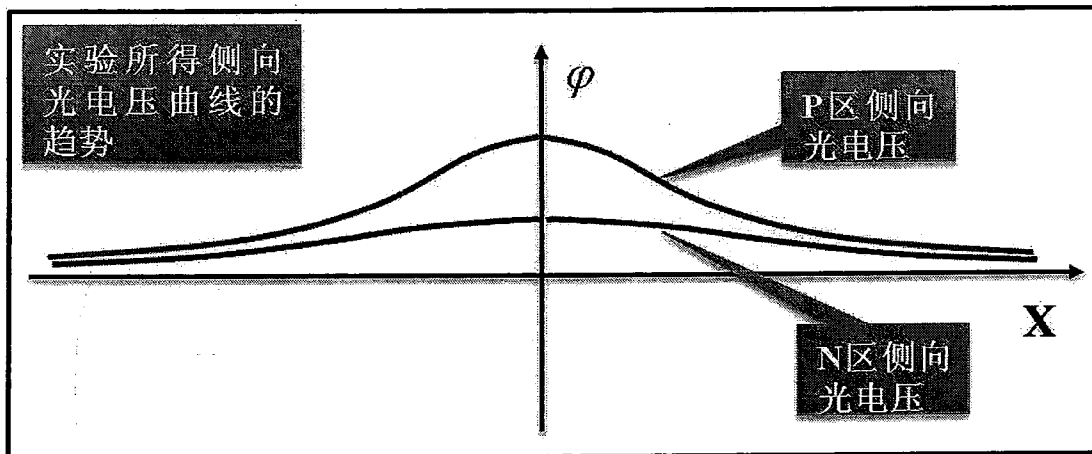


图 3.5, 实验中的 LSMO/SNTO 和 LSMO/Si 异质结 P 区和 N 区表面的光斑附近电势分布示意图, 光斑中心的位置在坐标零点。

可以看出, 无论是在 P 区还是 N 区, 电势的分布都是光照中心高而没有光照的区域低, 这与传统横向光电效应的理论结果是完全不一致的, 这是一种反常的横向光电效应。

3.6 Dember 效应

Dember 效应[23]是在 50 年前被提出来解释光导致的表面光生电势差(不同于体内的光电效应)。在后文中我们将阐述这个效应同我们发现的反常横向光电效应的关系。这个电压是由材料

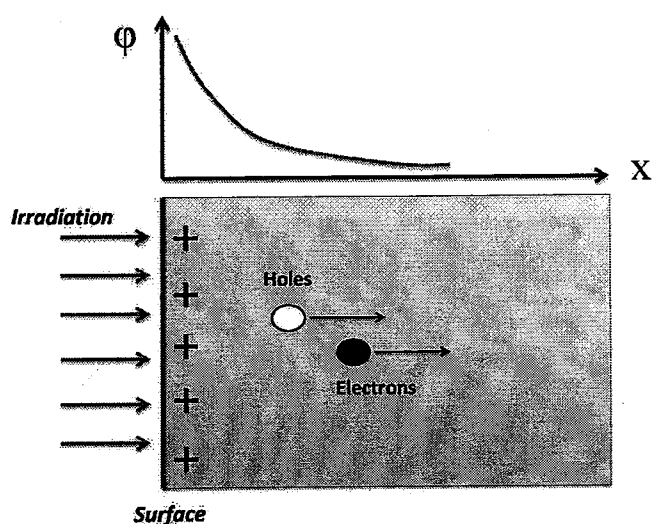


图 3.6, 半导体表面的光致 Dember 效应的示意图

内不同的载流子（半导体中便是电子和空穴）之间的不同迁移率所造成的。如图 3.6 所示，当光照射在半导体的表面的时候，由于光吸收，会在半导体的表面的一个光吸收特征长度的深度内激发大量的电子空穴对，在表面其浓度高于材料体内。这样就形成了一个光生电子空穴对的浓度梯度，于是这些电子空穴对会向半导体材料的体内扩散。不过非常值得注意的是，在材料中电子的迁移率总是高于空穴的迁移率，根据爱因斯坦关系[24]，电子的扩散系数也高于空穴的扩散系数。那么光生电子空穴对在向材料体内扩散的过程中，电子会更多地进入体区，空穴会被落在电子的后面。也就是在整个过程中，表面的空穴浓度高于表面的电子浓度，表面将带正电而体内带负电。于是就形成了一个如图 3.6 所示的电势梯度。这便是 Dember 效应，表面的电势同体内的电势电势差被称为 Dember 电压，对于 p 型材料，其[25]表述为：

$$V_{Dember} = \frac{\alpha I_n^2 (1-R) I_0}{(\alpha L_D + 1)(\xi_0 + 1)} \frac{b-1}{b\mu_p p_0} \quad (3.14)$$

Dember 效应是一种速度非常快的效应，当光照射在半导体表面到 Dember 电势的完成建立的时间间隔非常短，因为电子和空穴会从表面扩散到材料体内的速度非常快。这也意味着 Dember 电场的产生速度非常快，其特征时间甚至到达亚皮秒量级。那么这个 Dember 效应的建立就可以激发出 THz 波段的电磁波。目前已经在 InAs 等窄带半导体的表面发现由 Dember 效应的产生的 THz 辐射，而且目前这已经成为一种有效的产生 THz 辐射的方法[26]。Dember 效应目前只是认为是一种在材料表面产生的效应，但载流子的扩散系数不同在材料体内一样存在，因此可以确信在半导体材料内部一样存在 Dember 效应。

3.7 钙钛矿氧化物异质结中反常横向光电效应的理论解释和相应的数值计算结果

我们发现的反常横向光电效应实际上就是一种材料体内的 Dember 效应，我们实验中使用的光源是 XeCl 脉冲激光，激光脉冲非常短只有 20ns，脉冲能量为 0.15mJ。光源的瞬间功率非常大[17]，这样大的激光功率会在异质结中瞬间激发出大量的光生载流子。使得异质结很快达到光电饱和的水平，这样一来异质结的

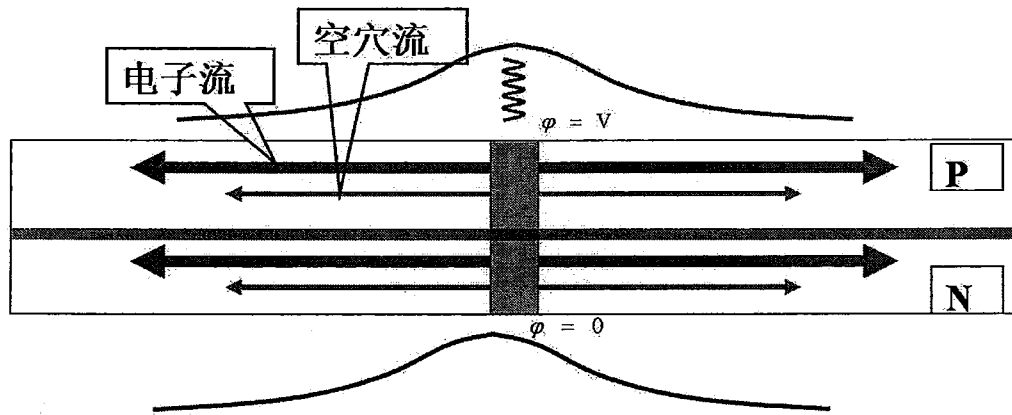


图 3.7，反常的横向光电效应定性分析

横向光电效应已经偏离了 Lucovsky 模型所能描述的情况，也正是因此，出现了不同于传统横向光电效应的情形。

光越强，光电效应中的异质结空间电荷区的内建电场就会越弱，当异质结的达到了光电饱和的时候，空间电荷区内的电场便已经被减弱到一个非常弱的程度。那么由光激发的电子空穴对便不能被空间电荷区内的电场有效的分离开来。这样一来，无论是在 P 区还是 N 区，都存在大量的光生电子和空穴，其浓度都是光照区域高于非光照区域。于是这些电子空穴对都会从光照的区域向非光照区域扩散。由于电子迁移率比空穴的迁移率要大，电子会运动到空穴的前面去，这样一来电子空穴对在空间位置上就出现了分离，于是光电压就产生了，而且这个光生电势是光照中心高，没有光照区域低，同表面产生 Dember 效应的原理完全一致。而且值得注意的是，这种效应在 P 区和 N 区两个区域都是一致的，因为这两个区域都存在大量的电子空穴对向非光照区域扩散。这样一个 Dember 效应导致的横向光电效应同我们在 LSMO/SNTO 和 LSMO/Si 异质结发现的横向光电压结果在趋势上是一致的，也就是说实验中发现的反常横向光电效应是一种强光源产生 Dember 效应所导致的。

	$\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{MnO}_3$	$\text{SrNb}_{0.01}\text{Ti}_{0.99}\text{O}_3$
Dielectric constant(ϵ_0)	10.0	300.0
Electron mobility ($\text{cm}^2/(\text{V.s})$)	10.0	8.0
Hole mobility ($\text{cm}^2/(\text{V.s})$)	1.8	0.1
Band gap (eV)	0.8	2.8
Net ionized impurity concentrations ($/\text{cm}^3$)	4.0×1.0^{19}	1.63×1.0^{20}
Photon absorption coefficient(cm^{-1})	1.5×10^5	1.2×10^5

表 3.1, 重要的计算参数[22]

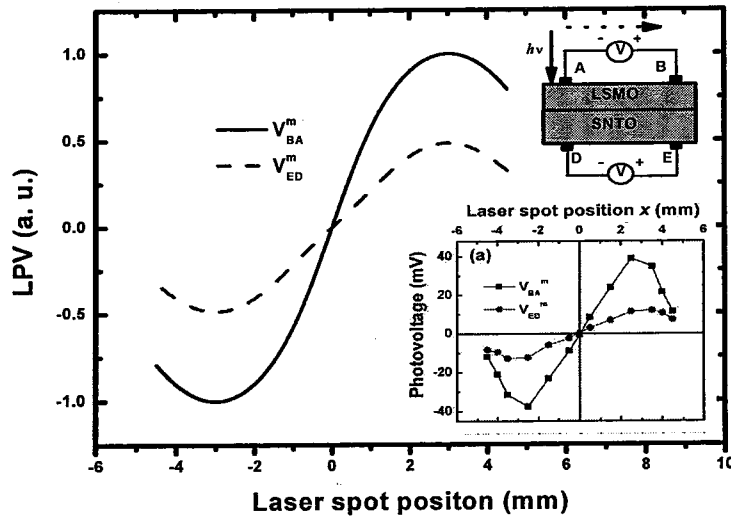


图 3.8, 计算得到 LSMO/SNTO 异质结中反常横向光电压 (LPV) 的计算结果, 插图是实验中测量到 LPV 结果, 两者的趋势是完全一致的

为了验证我们对上文的反常横向光电效应的理解, 按照实验中的 XeCl 激光

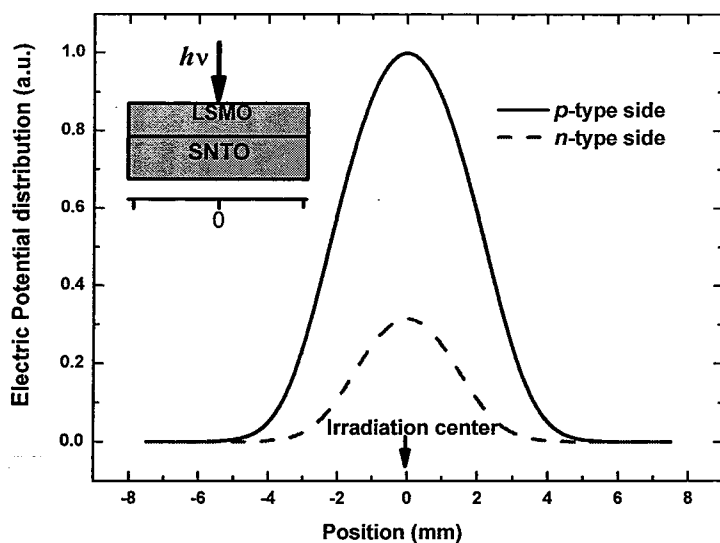


图 3.9 计算得到 LSMO/SNT0 异质结中光照中心附近的光生电势分布结果

光源数据，我们使用了二维含时漂移-扩散模型对 LSMO/SNT0 异质结的横向光电效应进行了计算，计算中使用的参数请见表 1。图 3.8 和 3.9 就是我们计算得到横向光电压 V_{BA} 和 V_{ED} ，和光照中心附近 P 区和 N 区两侧的电势分布。可以看出，的确在这个光照强度下，出现了反常的横向光电效应。在 P 区和 N 区的两侧产生的电势都是光照中心高，而两侧未受光照区域低。这同图 3.6 中的实验结果趋势上是完全一致，这也同时说明

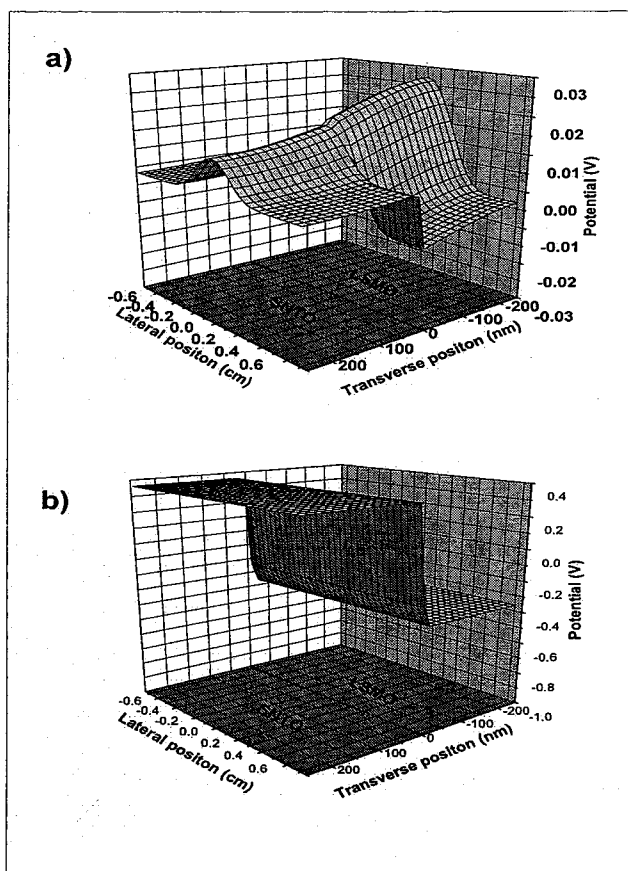


图 3.10 a) 计算得到的光照结束瞬间 LSMO/SNT0 异质结中电势分布图像; b) LSMO/SNT0 异质结内初始的电势分布（没受到光照的时候）

含时漂移-扩散模型适用于描述动态的横向光电效应。

为了进一步验证我们的结论，我们还通过含时漂移扩散模型计算了在 LSMO/SNTO 异质结中当脉冲激光停止一瞬间，异质结内部的电势分布情况（图 3.10）。从图 3.10b 可以看出异质结没受到光照的时候的，P 区（LSMO）和 N 区（SNTO）之间的内建电势差约为 0.38V；当光照结束的时刻，从图 3.10a 的计算结果可以看出，P 区和 N 区之间的平均电势差被缩小到约 0.01V，内建电势差在光照后，被极大地缩减了。在这样的一个小的电场环境下，进入空间电荷区内的电子空穴对是无法有效地分离的。于是在 LSMO/SNTO 异质结的两个区域内都存在大量的光生电子空穴对，这些电子空穴对在向两侧扩散的过程中 Dember 效应将成为横向光生电压的主要产生因素，于是就在异质结的两端都产生了一个相同的横向光生电势分布。

从我们以上的分析也可以看出，出现反常光电效应的原因是因为强激光产生的强的 Dember 效应。那么也是说，当激发电效应的光强降下来，横向光电效应应该能回到如图 3.5 所示的传统情况上来。于是，为了进一步验证我对实验中观察到的反常光电效应的理解，我计算了不同光强下光照中心附近电势分布变化。从图 3.11, 3.12 可以看出在 LSMO/SNTO 异质结中的随着光强的减弱，N

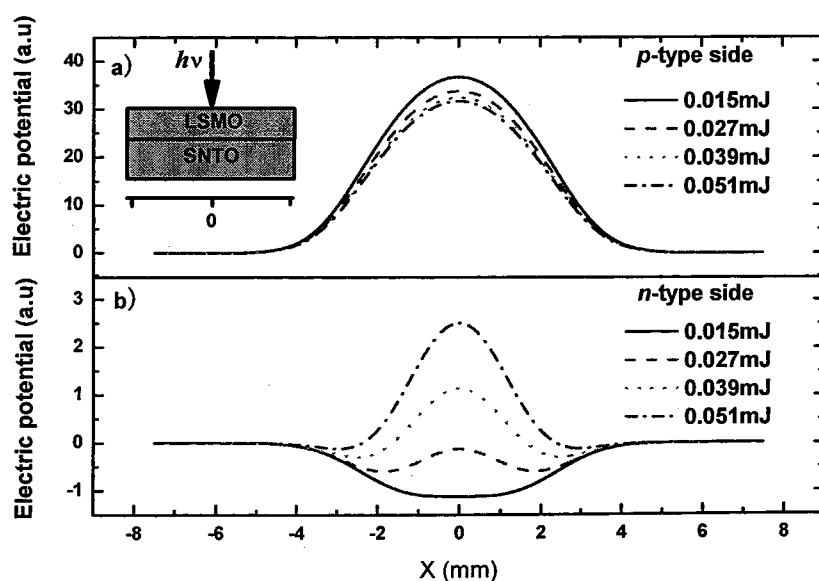


图 3.11 LSMO/SNTO 异质结横向光电效应中，两侧表面电势分布随激光强度增强逐渐出现反常的过程

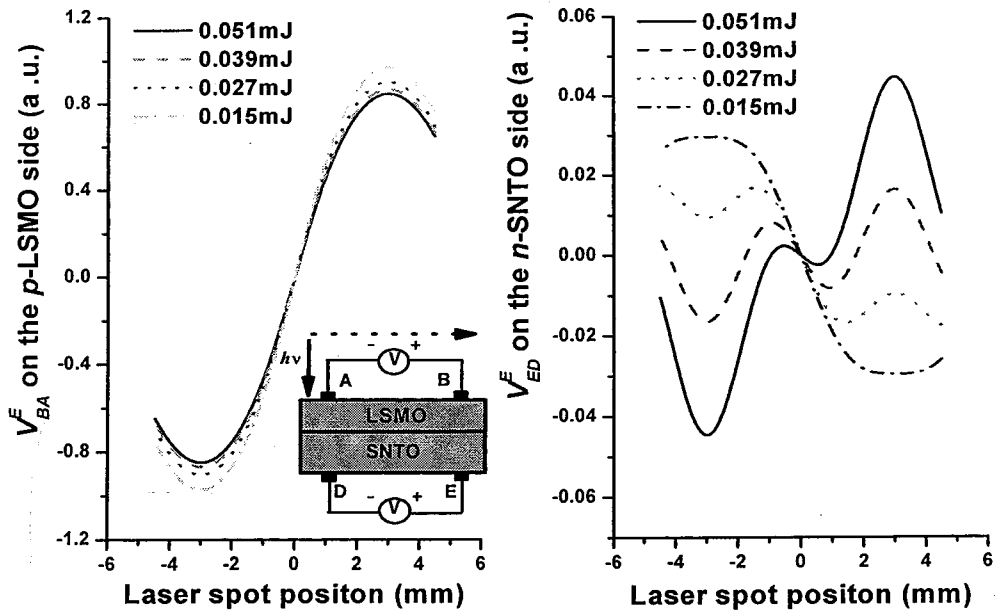


图 3.12, LSMO/SNTO 异质结中横向光电压随激光强度增强逐渐出现反常。

区的电势分布逐渐从中心高电势转变为低电势，也就是从反常的横向光电效应逐渐转变为正常的横向光电效应，开始出现反常的激光能量大概在 0.027mJ，大于这个能量将出现反常横向光电效应，当小于这个值则表现正常的横向光电效应。这从理论计算上进一步证明反常横向光电效应的确是一种光强导致的效应。

3.8 电栅现象

在一个特定的激光能量附近，由于 Dember 效应和传统横向光电效应对 N 区横向电势分布的贡献彼此相当，在这个能量附近，将出现既不同于反常光电效应也不同于传统横向光电效应的现象，在光照中心附近电势的分布表现为反常光电效应，而在远离光照中心电势分布呈现传统横向光电效应的趋势。在图 3.13 中，可以看出 N 区电势出现一个震荡的现象。

这可以类比于光学中的光栅衍射[27]的作用，我们在本文中称为电栅。在这个临界能量附近，电势分布的震荡可以产生两个电势极小点，这产生一个电势的双稳。同时通过光强的改变可以控制这两个极小点位置，当光增强的时候，极小点向着远离光照中心的位置移动。

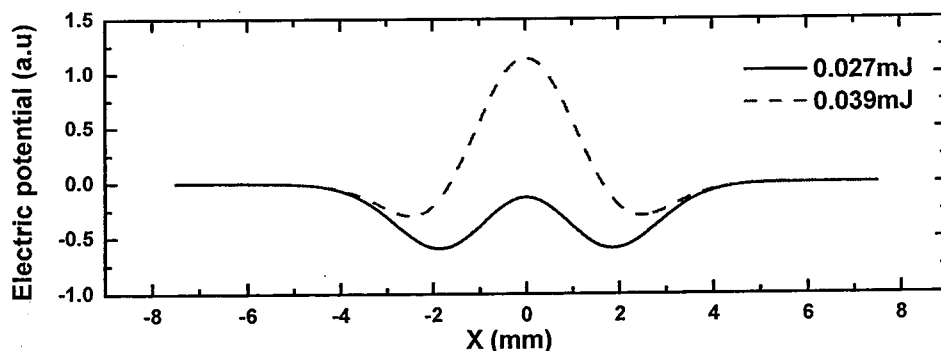


图 3.13, 光照能量在特定值附近, SNT0 一侧表面附近电势分布

3.9 小结

在本章中, 我们首先回顾了传统的横向光电效应理论: Lucovsky 模型; 并分析这套方程并不能描述强的脉冲激光导致的横向光电效应的原因。然后将含时二维漂移-扩散模型引入到对动态横向光电效应的研究中来, 以二维含时漂移-扩散模型为基础建立了描述动态横向光电效应的方程。同时我们分析数值求解此套方程的困难, 并提出分裂二维 Poisson 方程的方法解决了这个求解困难。我们用这套方法分析了我们以往在 LSMO/SNT0 和 LSMO/Si 两种异质结上发现的一种反常横向光电效应 (违背传统 Lucovsky 方程的结论)。从理论计算上证实这种反常效应是由强的激光强度导致的 Dember 效应增强所产生的, 并且得到了随着激光强度增强横向光电效应从正常到反常过渡的过程, 进一步证明我们对这种反常横向光电效应机制的解释是合理的。

本章参考文献

1. W. Schottky, Phys. Z 31, 913(1930).
2. J.T.Wallmark, Proc. IRE 45, 474(1957).
3. G. Lucovsky, J. Appl. Phys. 31, 1088(1960).
4. T. Niu, T. Matsuda, H. Sadamatsu, M. Takai, Jap. J. appl. Phys. 15, 601(1976).
5. S.Amari, J. Phys. III France 1, 1669 (1991).
6. H. Aguas, L. Pereica, D. Costa, E. Fortunato, and R. Martins, Opt. Mater. 27, 1088(2005).
7. R. C. G. da Silva, H. Boudinov, and R. R. B. Correia, Microelectron. J. 36, 1023(2005).
8. K. Zhao, K. J. Jin, H. B. Lu, Y. H. Huang, Q. L. Zhou, M. He, Z. H. Chen, Y. L. Zhou, and G. Z. Yang, Appl. Phys. Lett. 88, 141914(2006).
9. R. H. Willens, B. F. Levine, C. G. Bethea, and D. Brasen, Appl. Phys. Lett. 49, 1647(1986).
10. N. Tabatabaie, M. H. Meynadier, R. E. Nahory, J. P. Harbison, and L. T. Florez, Appl. Phys. Lett. 55, 792 (1989).
11. J. Henry and J. Livingstone, Adv. Mater. 13, 1023(2001).
12. J. Henry and J. Livingstone, IEEE. Sens. J. 2,372(2002).
13. J.Henry and J. Livingstone, IEEE. Sens. J. 3, 519(2003).
14. J.Henry and J. Livingstone, J. Phys. D: Appl. Phys. 37, 3180(2004).
15. S. Q. Xiao, H. Wang, Z. C. Zhao, and Y. X. Xia, J. Phys. D: Appl. Phys. 40, 5580(2007).
16. S. Q. Xiao, H. Wang, Z.C.Zhao, Y. Z. Xia, and Z. H. Wang, J. Phys D:Appl. Phys. 40, 6926(2007)
17. K.-J. Jin, K. Zhao, H. B. Lu, L. Liao and G. Z. Yang, Appl. Phys. Lett. 91, 081906(2007)
18. S. Selberherr, Analysis and Simulation of Semiconductor Devices,

- Springer-Verlag Wien-New York, 1984, p. 128
19. W. Shockley, W. T. Read, *Phys. Rev.*, 87, p. 835 (1952)
 20. Q. L. Zhou, K. J. Jin, H. B. Lu, P. Han, Z. H. Chen, K. Zhao, Y. L. Zhou, and G. Z. Yang, *Europhys. Lett.*, 71, 283-289(2005)
 21. J. Qiu, K. J. Jin, P. Han, H. B. Lu, C. L. Hu, B. P. Wang and G. Z. Yang, *Europhys. Lett.* 79, 5700(2007)
 22. P. Han, K. J. Jin, H. B. Lu, Q. L. Zhou, Y. L. Zhou, and G. Z. Yang, *Appl. Phys. Lett.* 91, 182102 (2007)
 23. J. I. Pankove, *Optical Processes in Semiconductors* Prentice-Hall (Englewood Cliffs, NJ, 1971), 320
 24. 刘恩科, 朱秉升, 罗晋生 等编著, 半导体物理学 (第六版): 电子工业出版社 (2003)
 25. 沈学础编著, 半导体光学性质: 科学出版社 (1992)
 26. Hng Gu, Masahiko Tani, Shunsuke Kono, *J. Appl. Phys.* 91, 5533-5537 (2002)。
 27. 赵凯华, 钟锡华编著, 光学: 北京大学出版社 (1984)

总结和展望

本论文工作的主要内容、结论、创新之处和对未来的工作的展望简述如下。

一. 总结

在本论文工作中，我们结合含时漂移-扩散模型: Poisson 方程、电流连续性方程以及异质结界面处的 Richardson 热发射电流模型对钙钛矿氧化物中的纵向光电效应和横向光电效应分别进行了自洽计算，并得到了和实验符合的计算结果。通过分析计算结果，得到了如下结论和发现：

1. 随着时间演化，钙钛矿氧化物异质结中的光掺杂会向空间电荷区内集中，也就是说光对钙钛矿氧化物异质结材料的性质的调控主要集中在空间电荷区内。
2. 我们发现光电测量电路中并联的电阻越小光电响应的速度将会越快，同时响应的灵敏度会越低。我们还分析光子能量对光电响应的影响，发现光子能量越高，所导致的光电响应速度会越快而且灵敏度越高。
3. 通过计算分析了在 LSMO/SNTO, LSMO/Si 异质结中发现的反常横向光电效应。定量地证实了，是强激光产生的 Demer 效应导致了这种反常横向光电效应。
4. 同时我从计算上得到了随着光强增大，横向光电效应从正常的向反常转变的过程，进一步从计算上证实了我们对钙钛矿氧化物异质结反常横向光电效应的解释。

二. 本论文的主要创新点

1. 第一次从理论的角度分析了钙钛矿氧化物异质结光电效应的动态物理过程，并设计了相应的计算算法。
2. 通过计算，首次定量地分析钙钛矿氧化物异质结中的光掺杂效应。
3. 分析了传统 Lucovsky 模型的不足之处，第一次建立起了描述动态横向光电效应的物理模型并设计出了相应的并行算法，解决了其中极其困难的求解问题，并用这套模型和算法首次对钙钛矿氧化物异质结的横向光电效应进行

了定量计算。

4. 在计算上定量地证实了在实验中发现的反常横向光电效应是由 Dember 效应引起的。

三. 进一步工作的展望

根据已经开展的工作和取得的成果,我们认为进一步的工作可以从以下几个方面展开。

1. 我们目前的对钙钛矿氧化物光电效应的研究还局限在常温(300K)的条件下,应该进一步发展我们的理论模型,使得它到能定量描述低温下光电现象。
2. 本文中建立的模型只是描述了光同钙钛矿氧化物异质结中的载流子(电子,空穴)作用,实际上作为一种电子关联体系,在钙钛矿氧化物体系中是存在在电荷,自旋和轨道有序之间的相互作用的,如何将这些作用引入到我们目前的模型中来是一个亟待解决的问题。
3. 同时钙钛矿氧化物中极其重要的各种相变机制还未纳入到我们的理论体系中来,如果要进一步研究钙钛矿氧化物异质结中的各种光致相变现象,这将是一个问题。因此如果能建立能描述相变过程的同时又具有可算性的光电效应模型,将有助于我们进一步理解钙钛矿氧化物的特性和内在物理机制。