# 钙钛矿结构 $Pr_{1-x}Ca_x MnO_3$ 薄膜中电脉冲诱导 电阻值变化的理论研究\*

李 倩<sup>1</sup><sup>†</sup> 王之国<sup>1,2</sup> 刘 <sup>1</sup><sup>1</sup> 邢钟文<sup>3</sup><sup>1</sup> 刘 楣<sup>1,4</sup>

1 (东南大学物理系,南京 210096)
 2 (淮阴师范学院物理系,淮阴 223001)
 3 (休斯敦大学物理系,休斯敦,TX77204 美国)
 (2006 年 6 月 23 日收到 2006 年 7 月 27 日收到修改稿)

建立一个有效的三明治隧穿模型研究在 Pr<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub> MnO<sub>3</sub> 薄膜中电流脉冲引起的电阻改变(EPIR)性质 发现载流 子在三明治结构各区域间的隧穿概率以及在不均匀界面层的导通概率对材料的 EPIR 值产生重要影响.还研究了 电流-电压曲线中的迟滞效应 ,得到的结果与近年来的文献报道一致.

关键词:强关联电子系统,金属-氧化物界面,隧穿 PACC:7300,7127,7130

### 1.引 言

2000 年美国 Texas 超导和空间外延中心<sup>[1]</sup>报道 了钙钛矿结构的 Pr<sub>1-x</sub> Ca<sub>x</sub> MnO<sub>3</sub>(PCMO)薄膜室温下 电阻对电脉冲信号产生了灵敏的反应,其开关效应 能长久保持.其后,日本和其他一些实验室也对电脉 冲信号引导的开关效应进行了深入的实验研 究<sup>[2-1/7]</sup>发现在其他一些氧化物钙钛矿结构<sup>[10-14]</sup>或 有机材料中<sup>[15-1/7]</sup>也有类似的效应.

在室温和不加磁场情况下,当持续时间为 100 ns的正脉冲电压加在 PCMO 薄膜上,样品的电阻 值急速下降表现出低电阻状态( $R = R_{min}$ ),并能长久 保持稳定的电阻状态.改变脉冲电压方向为负脉冲, 电阻转变成为高电阻状态( $R = R_{max}$ ).定义这种可逆 的高低阻双稳态的相对改变值为电脉冲引起的电阻 变化(EPIR):EPIR =  $\Delta R/R_{min} = (R_{max} - R_{min})R_{min}$ .文 献 1 报道的 PCMO 薄膜具有两个特别的性质:1) EPIR 值可达到了 1770%.2)除去电压脉冲后,其阻 值在 2 × 10<sup>5</sup> s 后改变量不到 1.5%,表现出双稳电 阻态的非易失性(nonvolatile).由于 PCMO 薄膜具有 大的 EPIR 值和强的非易失性,这种材料在外加扫描 电压的变化为 0→ V<sub>max</sub>→ - V<sub>max</sub>→0 时,相应的 *I-V* 关系曲线中出现了明显的迟滞现象.近年来的实验 研究表明,这种室温下电脉冲导致的电阻值变化转 变速度快,可逆,非易失,并且薄膜尺寸可以做的相 当小,满足新一代高密度,高速度和低能耗存储器件 的要求,引起了人们的极大兴趣.

然而在理论研究方面对这种电子材料的开关效 应机理却没有统一的认识.目前有两种看法:一是认 为由于材料内一些电荷阱引起的.典型的解释是认 为 PCMO 材料的不均匀,在正电压下绝缘材料中的 金属颗粒排列成线使电阻呈低阻态.负电压脉冲破 坏了原来金属颗粒线使电阻呈高阻态<sup>[1]</sup>.另一种是 认为金属和氧化物接触的界面性质造成的.近年 Rozenberg 等人<sup>[18,19]</sup>提出了一个简单的理论模型.两 个与电极接触的界面和中间氧化物介质组成一个三 明治结构.该模型能较好地解释实验中观测到的电 脉冲开关效应及 *LV* 曲线中的迟滞现象.

本文发展了 Rozenberg 等人提出的模型,用上 (u),下(b)界面层和中间介质层组成的三明治结构 研究此氧化物材料特殊的导电性质.考虑到氧化物 介质-金属电极接触面的非均匀性,我们提出界面层 由一系列非均匀小颗粒组成,每个小颗粒具有不同

<sup>\*</sup>国家自然科学基金(批准号:10574021)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail : liqfs@tom.com

非永久联系人, E-mail:mliu@seu.edu.cn

的电荷占据态及导通概率.引入一个无序的隧穿公 式来控制载流子在界面颗粒层的导通概率.用 Monte Carlo 数值模拟研究载流子在三明治结构中的注入 与隧穿.我们发现载流子在各区域间的隧穿率的大 小 以及在界面颗粒中的导通概率 *p*,对系统的 EPIR 值以及迟滞效应起着很大的作用.我们的计算 结果与实验报道是相符的,能够很好地解释 EPIR 值 和相应的 *LV* 迟滞回线产生机理.

#### 2. 模型和方法

图 1 是三明治模型的示意图.由于氧化物钙钛 矿物质在纳米尺度上的空间不均匀性<sup>201</sup>,所以这个 氧化物介质层里包含着一些非渗透的金属颗粒.材 料中的金属颗粒集中在两边金属电极(顶部电极 *E*<sub>u</sub> 和底部电极 *E*<sub>b</sub>)附近,在两个电极之间形成了由顶 部颗粒界面层(u)中间氧化物介质层(c)底部颗粒 界面层(b)的三明治结构.



图 1 三明治结构模型示意图(正电压方向)

假设在外电场作用下载流子在各区域间运动是 隧穿运动,界面势垒对载流子隧穿的阻挡,使三明治 结构电阻值比 PCMO 体材料电阻值大得多,因此可 以推断金属电极-氧化物介质之间的界面对输运特 性起重要作用<sup>[5]</sup>.根据费米黄金法则<sup>[18]</sup>,载流子从 α 区域到β 区域的跃迁概率可以为

 $\rho_{\alpha,\beta} = \Gamma^{\alpha,\beta} N_{\beta} [1 - n_{\beta}] f_{\alpha,\beta} (V), \quad (1)$   $N_{\beta} \ln n_{\beta} \in \beta \, \mathbb{C}$ 域的状态数和占据率  $\Gamma^{\alpha\beta} - \overline{\mathcal{K}} + \overline{\mathcal{K}} + \overline{\mathcal{K}} + \overline{\mathcal{K}}$ 到  $\beta$  的隧穿概率 函数  $f_{\alpha,\beta} (V)$ 反映跃迁概率对于外 界电压 V 的依赖关系.

在图 1 中将载流子从底部流进 ,顶部流出的方

向规定为正方向,反之为负方向.相对于中间氧化物 介质部分,顶层和底层比例要小得多,并因为与上下 金属电极接触,在界面表现出非均匀的性质,因此我 们把顶层或底层又分成40个不同的小颗粒,在正电 压条件下该模型可以用载流子在各个区域的占据数 变化率方程表示

$$\frac{\mathrm{d}n_{ib}}{\mathrm{d}t} = \Gamma_{i}^{E_{\mathrm{b},b}} N_{E_{\mathrm{b}}} n_{E_{\mathrm{b}}} (1 - n_{ib}) f_{E_{\mathrm{b},b}} (V) - \Gamma_{i}^{\mathrm{b},c} n_{ib} N_{c} (1 - n_{c}) f_{\mathrm{b},c} (V) , \qquad (2)$$

$$\frac{\mathrm{d}n_{\rm c}}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{40} \Gamma_i^{\rm b\ c} N_{\rm b} n_{ib} (1 - n_{\rm c}) f_{\rm b\ c} (V) - \Gamma_i^{\rm c\ a} n_{\rm c} N_{\rm u} (1 - n_{iu}) f_{\rm c\ a} (V) , \qquad (3)$$

$$\frac{\mathrm{d}n_{iu}}{\mathrm{d}t} = \Gamma_i^{\mathrm{c}\,\mathrm{a}} N_{\mathrm{c}} n_{\mathrm{c}} (1 - n_{iu}) f_{\mathrm{c}\,\mathrm{a}} (V) - \Gamma_i^{\mathrm{u},E_{\mathrm{u}}} n_{iu} N_{E_{\mathrm{u}}} (1 - n_{E_{\mathrm{u}}}) f_{\mathrm{u},E_{\mathrm{u}}} (V), \quad (4)$$

式中 i 从 1 到 40 代表上或下界面区域的 40 个颗粒 小区域. 假设<sup>[18]</sup>  $f_{\alpha,\beta}$ (V)是不依赖于  $\alpha$  和  $\beta$  具体区 域的函数 ,与电压的关系为  $f(V) = \sinh(V)$ .我们假 设载流子在电介质内部隧穿率相同 ,等于一个常数  $\Gamma_i^{b,c} = \Gamma_i^{c,a} = \Gamma^{int}$ ,而从电极到顶部或底部颗粒界面 层的隧穿率公式定义为

 $\Gamma_{i}^{E_{b},I(u,E_{u})} = \gamma_{i}^{E_{b}(E_{u})}\gamma_{i,\text{rand}}\Gamma^{\text{ext}}, \quad (5)$   $\Gamma^{\text{ext}}$ 为界面标准隧穿率.上式中用两个系数  $\gamma_{i}^{E_{b}(E_{u})}$ 和 $\gamma_{i,\text{rand}}$ 来控制电极到颗粒层的隧穿率.定义  $\gamma_{i}^{E_{b}(E_{u})}$ 为由颗粒占据率控制的隧穿系数<sup>[21]</sup>.即

$$\gamma_{i}^{E_{b}(E_{u})} = \begin{cases} e^{-1/\sqrt{n_{il}(u)^{+1}}}, & n_{il}(u) > 0.1\\ 0.1, & n_{il}(u) \le 0.1. \end{cases}$$
(6)

由(6)式可以看出,当颗粒中的占据率 $n_{i,k(u)}$ 增加,隧 穿率会提高,在 $n_{i,k(u)}=1$ 时,隧穿率达到最大值.因 此界面颗粒中的电荷累积会影响载流子的隧穿.我 们还引入 $\gamma_{i,xud}$ 来表示由于界面颗粒层的不均匀性 而引起的传输涨落系数

 $\gamma_{i, xand} = | \xi(t_j) | \Theta(p - q_j),$  (7) 其中  $\xi(t_j)$ 是具有平均值为 0,宽度为 1 的高斯分布 随机数 控制 i 颗粒  $t_j$  时间步隧穿的大小  $q_j \ge 0$ — 1 之间均匀分布的随机数  $\Theta(x)$ 是单位阶跃函数 . 由于电荷在界面颗粒与金属电极之间的导通是无序 的 ,我们用 p 来控制颗粒的导通概率 .

在加负电压时载流子流向与正电压方向相反,我 们可以写出负电压下类似的方程.用五阶隆格 – 库塔 法数值求解这一系列方程.给定每一区域载流子占据 率初值都等于 1/2,计算第 t<sub>i</sub> 个 Monte Carlo 步(MCS) 的中间区域和界面小颗粒区域的占据率  $n_{i,a}(t_j)$ ,并 由此求出载流子流出上界面的电流.计算出每一时刻 的电流值为单位时间间隔  $\Delta t$  的平均值:

$$I = e \sum_{i}^{40} \Gamma_{i}^{u,E_{u}} \frac{N_{E_{u}}}{2} n_{i,u} N_{u} f(V) . \qquad (8)$$

### 3. 结果和讨论

在我们模拟中,首先假设金属电极占据率  $n_{E_b}$ =  $n_{E_u}$  = 1/2,界面颗粒的导通率 p = 0.5.给定参数  $\Gamma^{\text{int}} = 8 \times 10^{-9}$ , $\Gamma^{\text{ext}} = 5 \times 10^{-13}$ , $N_u = N_b = 10^6$ , $N_c = 10^{10}$ , $N_{E_u} = N_{E_b} = N_e = 10^{14}$ .由此可以看出相比中间 层区域,底层和顶层状态数是一个很小的值,同时由 于 $\Gamma^{\text{int}} \gg \Gamma^{\text{ext}}$ ,这就意味着底层和顶层颗粒区域有可 能被占满,因而限制了载流子的界面隧穿.这一结果 表明界面电荷积累可以限制载流子的运动.

设一个电压脉冲值为 12.5 脉冲时间为一个单 位时间间隔  $\Delta t \Delta t = 500$  MCS.同时用一稳定的直流 小电压  $V_{\text{read}} = 0.01$  测量电阻,计算脉冲过后的电流 和电阻值,我们首先连续加了5个正电压脉冲,每两 个脉冲相隔时间为  $t = 1000 \Delta t$ ,计算每个时刻的电 阻值. 然后同样在  $t = 5000 \Delta t$  时间内连续加了 5 个 负电压脉冲,计算每个时刻的电阻值,将连续加20 个正负脉冲情况下计算得到的电阻随时间 t 变化表 示在图 2 中.可以看到,在第一个正脉冲过后,系统 便达到了稳定的低阻状态,随后的几个正脉冲并不 改变系统低阻状态. 改变电压方向为负脉冲后,电 阻几乎突然增大 60 倍,连续的第二,三个负脉冲使 电阻值继续增大到原来的 300 倍左右,并成为一个 稳定的高阻状态,交替的电压脉冲使三明治结构在 稳定的高低电阻值之间切换,我们计算了 60 个脉冲 的电阻值 发现其电阻一直保持着这种稳定的高低 阻态变化,这种能保持稳定的电阻状态称为可逆性 和非易失性,我们的计算结果与实验资料是一致 的<sup>[1,3-6]</sup>.

为了分析产生电阻双稳态的原因,在连续施加 20个正负脉冲情况下,将计算得到的三明治结构中 每层平均电荷占据数(*n*<sub>b</sub>,*n*<sub>e</sub>,*n*<sub>u</sub>)随时间的变化表 示在图 2(e)中.其中 *n*<sub>b</sub>为底部界面层平均占据率 (图中虚线表示),而 *n*<sub>u</sub>为顶部界面层平均占据率 (图中实线表示),中间层载流子占据率 *n*<sub>e</sub>几乎保 持 1/2 不变.从图中可以看出,载流子的占据率对系



图 2 (a) 电压脉冲 (b) 电阻 (c) 各层平均电荷占据数( $n_u$ , $n_b$ ,  $n_c$ ) 随时间 ( $\Delta t$ )的变化关系(单位时间间隔  $\Delta t = 500$  MCS)

统的电阻值变化起着决定性的作用.由于所取参数  $N_e \Gamma^{int} = 80$ ,  $N_e \Gamma^{ext} = 50$ ,所以在施加正电压脉冲后 从顶部颗粒层方程(4)可以看出,方程右边第一项比 第二项大,因此顶层颗粒的占据态变化大于零,  $dn_{i,a}/dt > 0$ .电荷重新分布,在顶部区域聚集,使  $n_u(t)$ 立刻从0.5增加到极大值0.8. $n_u(t)$ 的增大 又使系数 $\gamma_{iu}^{E_u} = e^{-1\sqrt{n_{i,a}}+1}$ 也达到极大,提高了(4)式 中右边第二项的值,使得占据态的变化趋于饱和,  $dn_{i,a}/dt = 0$ .所以正脉冲电压使顶层占据态达到稳 定的极大值.这时如用小偏压 $V_{read}$ 测量得到的电流 最大,电阻值最小.在连续施加正脉冲电压时,电阻 保持低阻态不变.

反之 加负电压使顶部颗粒层放电,其占据率迅 速减小,底层的占据率变大.n<sub>u</sub>(t)越小,电阻值越 大.但从图中可以看出第一个负脉冲后,n<sub>u</sub>并没有 达到稳定的最小值,这是因为顶层颗粒高占据态有 一定的保持性,这就使系统的电阻值未达到稳定的 高阻状态.顶层颗粒的彻底放电需要连续的施加负 脉冲电压.随着负脉冲数的增加,n<sub>u</sub>达到稳定极小, 使系统的阻态也达到稳定高阻态.对比正负电压脉 冲部分的情况可以清楚地看出正脉冲更易达到稳定 电阻态,这与实验结果也一致<sup>[15641]</sup>.

为了研究电阻 EPIR 值的大小,我们调节参数如下.在其他参数与图 2 相同情况下改变  $\Gamma^{\text{ext}}$ 和  $\Gamma^{\text{int}}$ 的值,计算正负脉冲引起的电阻绝对改变值  $\Delta R =$ 

( $R_{max} - R_{min}$ )和相对改变 EPIR 值列在表 1 中.表中 (a)(b)(c)三列数据为保持界面标准隧穿常数  $\Gamma^{ext} = 5 \times 10^{-13}$ ,依次增大区域内部隧穿常数分别为 (a) $\Gamma^{int} = 6 \times 10^{-9}$ (b) $\Gamma^{int} = 8 \times 10^{-9}$ (c) $\Gamma^{int} = 10 \times 10^{-9}$ .(d)和(e)两列采用的数据为保持 $\Gamma^{int} = 8 \times 10^{-9}$ 改变(d) $\Pi^{ext} = 2 \times 10^{-13}$ (e) $\Gamma^{ext} = 8 \times 10^{-13}$ .由 表 1 可以看到在其他参数不变的情况下,改变 $\Gamma^{ext}$ 或 $\Gamma^{int}$ 的值相当于改变进入和流出顶部界面层的差 值 $N_{e}\Gamma^{int} - N_{e}\Gamma^{ext}$ ,直接对高低电阻的绝对变化 $\Delta R$ 以及 EPIR 的大小起着决定性的影响.减小 $N_{e}\Gamma^{ext}$ 或者增大 $N_{e}\Gamma^{int}$ 的值,都会使 EPIR 值增大.

表 1 改变  $\Gamma^{ext}$ 和  $\Gamma^{int}$ 的值  $\Delta R$  及 EPIR 的变化

|  | (a) | (b)  | (c)  | (d)  | (e) |
|--|-----|------|------|------|-----|
| р  | 0.5 | 0.5  | 0.5  | 0.5  | 0.5 |
| $N_{ m c} arGamma^{ m int}$  | 60  | 80   | 100  | 80   | 80  |
| $N_{ m e} \Gamma^{ m ext}$   | 50  | 50   | 50   | 20   | 80  |
| $\frac{\left(N_{\rm c}\Gamma^{\rm int} - N_{\rm e}\Gamma^{\rm ext}\right)}{N_{\rm e}\Gamma^{\rm ext}}$ | 0.2 | 0.6  | 1    | 3    | 0   |
| $\Delta R$   | 781 | 1046 | 1306 | 6293 | 416 |
| EPIR   | 205 | 303  | 401  | 868  | 166 |
|  |     |      |      |      |     |

表 2 改变界面层颗粒导通的概率  $p \triangle R$  及 EPIR 的变化

|   | (a)   | (b)   | (c)   |  |
|---|-------|-------|-------|--|
| p   | 0.2   | 0.5   | 0.8   |  |
| $\frac{(N_{\rm e}\Gamma^{\rm int} - N_{\rm e}\Gamma^{\rm ext})}{N_{\rm e}\Gamma^{\rm ext}}$ | 0.6   | 0.6   | 0.6   |  |
| $n_{u}(+)$  | 0.911 | 0.808 | 0.739 |  |
| $n_{\rm u}(-)$  | 0.015 | 0.030 | 0.038 |  |
| $\frac{n_{\rm u}(+) - n_{\rm u}(-)}{n_{\rm u}(-)}$  | 59.73 | 25.93 | 18.45 |  |
| $\Delta R$  | 1998  | 1046  | 249   |  |
| EPIR  | 869   | 303   | 166   |  |

在其他参数与图 2 相同情况下,改变界面层颗 粒导通率分别为(a)p = 0.2 (b)p = 0.5 (c)p = 0.8时计算脉冲引起的高低电阻的绝对改变值  $\Delta R$  和相 对改变值 EPIR 列在表 2 中.可以看出虽然三种情况 下参数  $N_c \Gamma^{\text{int}} - N_c \Gamma^{\text{ext}}$ 的值不变,但颗粒导通率的值 越小 p = 0.2,正脉冲时顶部占据率  $n_u$ (+)虽然最 大,但负脉冲时上界面的高占据阻止了电荷的流入, 系统顶层颗粒的彻底放电使顶层两个电荷占据态的 变化 $\frac{n_u$ (+)- $n_u$ (-)}最大,也使高低阻差值最大. 由此可以看出当颗粒导通率 p 值越小时,得到  $\Delta R$  和 EPIR 值最大.

最后我们研究三明治结构 *LV* 曲线的迟滞现 象.我们对该三明治结构施加连续变化的扫描小电 压 0→+1→-1→0,计算得到相应的 I-V 曲线表示 在图 3 和图 4 中.图 3 中,固定 p = 0.5,  $\Gamma^{\text{ext}} = 5 \times$  $10^{-13}$ 时改变内部区域隧穿常数分别为(a) $\Gamma^{int} = 6 \times$  $10^{-9}$  (b) $\Gamma^{int} = 8 \times 10^{-9}$  (c) $\Gamma^{int} = 10 \times 10^{-9}$ ,所取其 他参数与图2相同,我们可以看到当连续加上小正 电压到 +1 时,计算得到的电流呈非线性上升,而当 正电压连续下降到零时, 电流呈线性下降到零. 由图 中的迟滞回线表明顶层颗粒占据态的充放电有一定 的迟滞性,当系统改变电压方向连续向负电压增加 到 - 1 时,系统的上,下界面颗粒层的电荷占据态都 发生相应的非线性变化,负电压时上,下界面颗粒层 电荷占据态的保持力使电流曲线表现了与正电压不 同的多彩多姿的迟滞回线,可以由图 2(c)中看到, 第一个负脉冲后 n<sub>u</sub>(n<sub>b</sub>)并没有立刻达到稳定的极 小 大 值 表现出占据态有较大的保持性 因此产生 了较大迟滞性.当电压大于±1时,系统达到稳定状 态 迟滞性消失.



图 3  $I \cdot V$  曲线中的迟滞效应 ,在 p = 0.5 , $\Gamma^{\text{ext}} = 5 \times 10^{-13}$ 时(a)  $\Gamma^{\text{int}} = 6 \times 10^{-9}$  (b) $\Gamma^{\text{int}} = 8 \times 10^{-9}$  (c) $\Gamma^{\text{int}} = 10 \times 10^{-9}$ 

对比图 3 中的( a ) ( b )和( c )可以看出,三曲线 在正电压部分的形状差别不大,改变  $\Gamma^{int}$ 值引起的 差别主要表现在负电压部分.可以看到( c )图中在电 压为 – 1 时的稳定电流 |  $I_{min}(-1)$  最小.这是由于界 面颗粒层占据率对隧穿系数  $\gamma_{i}^{E_{0}(E_{n})}$  的非线性控制, 由于 EPIR 公式也可写为 $\frac{|I_{max}(+1)| - |I_{min}(-1)|}{|I_{min}(-1)|}$ ,

图4( a ) ( b )为固定*P* = 0.5 ,Γ<sup>int</sup> = 8×10<sup>-9</sup>时改



图 4 *V-I* 曲线中的迟滞效应.(a)(b)为在 p = 0.5,  $\Gamma^{int} = 8 \times 10^{-9}$ 时(a) $\Gamma^{ext} = 2 \times 10^{-13}$ (b) $\Gamma^{exp} = 8 \times 10^{-13}$ .(c), (d)为保持  $\Gamma^{int} = 8 \times 10^{-9}$ ,  $\Gamma^{ext} = 5 \times 10^{-13}$  (c)p = 0.2 (d)p = 0.8

变界面隧穿标准概率为(a) $\Gamma^{\text{ext}} = 2 \times 10^{-13}$  (b) $\Gamma^{\text{ext}} = 8 \times 10^{-13}$  (c)(d)两图为固定  $\Gamma^{\text{int}} = 8 \times 10^{-9}$ , $\Gamma^{\text{ext}} = 5 \times 10^{-13}$ ,改变界面颗粒的导通率(c)p = 0.2 (d)p = 0.8 其他参数与图 2 中一致.对比图 4 中的几个曲线,可以发现其迟滞效应与图 3 中的表现一致.图中在电压为 – 1 时的稳定电流 |  $I_{\min}$ ( – 1) | 越小,其 EPIR 值越大.因此(a)和(c)的 EPIR 值较大.这一结果与表 1 2 中结论相一致,说明  $\Gamma^{\text{ext}}$ 和导通率 p 对系统的 *I-V* 迟滞回线和 EPIR 值的影响是等效的.

### 4.结 论

我们发展了 Rozenberg 等人提出的模型,充分 考虑了氧化物介质-金属界面层对载流子隧穿的影 响.引入由颗粒占据率控制的系数  $\gamma_i^{E_{\rm L}(E_{\rm u})}$  和随机调制的涨落系数  $\gamma_{i,\text{rand}}$  来定义不均匀颗粒界面区域与电极间载流子隧穿.用一个颗粒导通概率 p 来控制不均匀界面层的导通概率.在此基础上研究了隧穿率参数  $\Gamma^{\rm int}$ 和  $\Gamma^{\rm ext}$ ,颗粒导通概率 p 的变化对电脉冲开关效应和 I-V 迟滞回线的影响.结果发现  $N_e\Gamma^{\rm int}$  -  $N_e\Gamma^{\rm ext}$ 差值越大,或者导通率 p 越小,系统阻值的变化  $\Delta R$  和 EPIR 值也越大.通过分析 I-V 曲线中的迟滞效应,研究对迟滞回线产生影响的因素并与实验相互比照.负电压部分的迟滞回线较为明显,表现负电压时系统达到稳定状态的滞后性.我们的计算结果与实验相一致<sup>5.6.11]</sup>,并证明引入一个能反映界面不均匀性的颗粒界面隧穿率系数能够更好的解释 EPIR 开关效应的机理.

- [1] Liu S Q , Wu N J , Lgnatiev A 2000 Appl . Phys . Lett . 76 2749
- [2] Sakai J , Kitagawa A , Imai S 2001 J. Appl. Phys. 90 1410
- [3] Bailalov A, Wang Y Q, Shen B, Lorenz B, Tsui S, Sun Y Y, Xue Y Y 2003 Appl. Phys. Lett. 83 957
- [4] Tsui S , Baikalov A , Cmaidalka J , Sun Y Y , Wang Y Q , Xue Y Y 2004 Appl. Phys. Lett. 85 317
- [5] Sawa A , Fujii T , Kawasaki M , Tokura Y 2004 Appl. Phys. Lett. 85 4073

- [6] Odagawa A, Sato H, Inoue I H, Akoh H, Kawasaki M, Tokura Y 2004 Phys. Rev. B 70 224403
- [7] Sakai J, Imai S 2005 J. Appl. Phys. 97 10H709
- [8] Quintero M , Leyva A G , Levy P 2005 Appl . Phys . Lett . 86 242102
- [9] Odagawa A, Kanno T, Adachi H 2006 J. Appl. phys. 99 016101
- [10] Gu R Y , Wang Z D , Ting C S 2003 Phys. Rev. B 70 153101
- [11] Dong R, Wang Q, Chen L D, Shang D S, Chen T L, Li X M, Zhang W Q 2005 Appl. Phys. Lett. 86 172107
- [12] Fors R , Khartsev S I , Grishin A M 2005 Phys. Rev. B 71 045305
- [13] Oligschlaeger R , Waser R 2006 Appl . Phys . Lett . 88 042901
- [14] Hamaguchi M, Aoyama K, Asanuma S, Uesu Y 2006 Appl. Phys. Lett. 88 1419
- [15] Ma L P , Pyo S , Ouyang J Y , Xu Q F , Yang Y 2003 Appl. Phys. Lett. 82 1419

- [16] Lai Y S , Tu C H , Kwong D L 2005 Appl. Phys. Lett. 87 122101
- [17] Shi D X , Ba D C , Pang S J , Song Y L , Gao H J 2001 Chin . Phys. 10 990
- [ 18 ] Rozenberg M J , Inoue I H , Sánchez M J 2004 Phys. Rev. Lett. 92 178302
- [19] Rozenberg M J, Inoue I H, Sánchez M J 2006 Appl. Phys. Lett. 88 033510
- [20] Li P G, Lei M, Tang W H, Song P Y, Chen J P, Li L H 2006 Acta. Phys. Sin. 55 2328 (in Chinese) 李培刚、雷 鸣、唐为 华、宋朋云、陈晋平、李玲红 2006 物理学报 55 2328 ]
- [21] Zeng S R 2002 Fundamental Physics of Semiconductor device (Beijing: Peking University Press)p111(in Chinese)[曾树荣 2002 半导体器件物理基础(北京:北京大学出版社)第111 页]

## Theoretical study on electric-pulse-induced resistance change in perovskite $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ films \*

Li Qian<sup>1)†</sup> Wang Zhi-Guo<sup>1</sup><sup>(2)</sup> Liu Su<sup>1)</sup> Xing Zhong-Wen<sup>3)</sup> Liu Mei<sup>1)‡</sup>

1 🕽 Department of Physics , Southeast University , Nanjing 210096 , China )

2 ) Department of Physics , Huaiyin Teachers College , Huaiyin  $\ 223001$  , China )

3 J Department of Physics , University of Houston , Houston , Texas 77204 , USA )

(Received 23 June 2006; revised manuscript received 27 July 2006)

#### Abstract

We developed a effective tunneling model to study the electric-pulse-induced resistive switching (EPIR) effect in PCMO films, and find that the tunneling probability of the charge transport at interfaces plays an important role in the EPIR effect. We also study the nonvolatile characteristics and the hysteretic current-voltage curve in the PCMO films, the calculated results consistent with the recent experimental data. This electric-pulse- induced resistive switching effect at room temperate has excellent potential of application.

Keywords : strongly correlated electron systems , metal-oxide interface , tunneling PACC : 7300 , 7127 , 7130

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10574021).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail:liqfs@tom.com

<sup>‡</sup> Permanent corresponding author. E-mail : mliu@seu.edu.cn