

由阴、阳极电压及入射光强及频率确定光电流*

刘昶时^{1)†} 刘文莉²⁾

1) (嘉兴学院南湖学院, 嘉兴 314001)

2) (嘉兴学院数理信息工程学院, 嘉兴 314001)

(2012年5月18日收到; 2012年8月1日收到修改稿)

根据费米-狄拉克统计, 本文推导出了一个光电效应中光电流作为阴、阳极电压的函数关系. 应用本文所提供的函数所得计算结果同实验结果非常好地符合. 其次, 建立了入射光强对光电流贡献的数学表现, 最后, 从数学上得到了入射光频率与光电流的关系, 从而能够预测光电流.

关键词: 光电流, 拟合, 电压, 光强

PACS: 84.60.Jt, 42.79.Ek

DOI: 10.7498/aps.62.028401

1 引言

光与物质相互作用可以产生一种能量转移的现象, 即光照射到某些物质上, 引起物质的电性质发生变化, 也就是光能量转换成电能. 这类光致电变的现象被人们统称为光电效应 (photoelectric effect). 这一现象是 1887 年赫兹在实验研究麦克斯韦电磁理论时偶然发现的^[1]. 光电效应分为外光电效应和内光电效应: 外光电效应是被光激发产生的电子逸出物质表面, 形成真空中的电子流的现象; 应用外光电效应人类发明了真空环境中能够深入理解原子和分子过程的方法^[2,3] 例如化学分析的光电子谱 (ESCA)^[4,5] X 射线电子谱 (XPS), 紫外线电子谱 (UVPES) 等^[6-8]. 内光电效应是被光激发所产生的载流子 (自由电子或空穴) 仍在物质内部运动, 使物质的电导率发生变化 (光电导效应) 或产生光生伏特 (photovoltaic effect)^[9] 的现象. 利用内光电效应人类制作了光电耦合器^[10], 半导体光电材料^[11,12], 氧化物半导体^[13], 半导体异质结^[14], 金属氧化物半导体^[15], 以得到具有实用价值的太阳能电池及各种光电传感器. 即便在应用光谱确定半导体材料的禁带宽度时, 也是以光电效应的解释为

其原理^[16].

爱因斯坦创见性地提出光是具有能量为 $h\nu$ 的光子, 通过电子一次性地吸收光子, 从而产生实验所观察到的光电流. 爱因斯坦光电效应方程从数学上表达了这个思想. 这样即定性又定量地回答了为什么有截止电压, 同时定性和定量给出了截止频率 (红限) ν_0 的来源^[17]. 使得物理学界终于从经典物理理论不能解释光电效应实验规律的困境中解脱出来. 不仅如此, 爱因斯坦光电效应方程成为常用的测量金属逸出功方法的基本原理^[18]. 光电效应的特征是由不同频率和光强的光照射在给定阴极材料上产生的光电流随阴、阳极间电压变化的电压-电流即 $I-V$ 曲线表现的. 爱因斯坦光电效应方程成功地给出了 $I-V$ 曲线中截止电压的物理意义和用它确定普朗克常量的方法, 但是到目前为止, 如何从数学上仅用一个函数给出从反向饱和到正向饱和光电流过程中光电流随着电压、光强以及入射光频率的变化规律, 还没有答案. 本文通过费米-狄拉克统计的物理意义, 结合实验结果, 采用唯象的方法探索到解决这个问题的数学表达, 使用本文所提供的函数所得结果非常好地符合实验结果. 根据霍姆亥兹的观点: 如果经过某种途径找到一个与实验结果相当好地符合的函数, 那么这个函数很可

* 浙江省教育厅科技计划项目 (批准号: Y201122757) 资助课题.

† 通讯作者. E-mail: liucs4976@sohu.com

能是唯一、正确描述实验现象的数学表达. 本文结果是由电压、入射光强及频率计算光电流的有效方法.

2 实验结果及数值模拟

目前批量生产的利用光电效应测量普朗克常量的仪器均好于当年密立根所使用的仪器. 为体现本文结果的普适性, 本工作利用 GD-III 型光电效应实验仪获得光电流随阴、阳极电压、入射光波长及光强变化的实验结果. 实验时, 当汞灯发出的光通过波长分别为 365.0, 404.7, 435.8, 546 及 577.0 nm 的干涉滤光片后就成为单色性相当好的单色光, 每一个单色光打在银氧钾材料制备的阴极产生光电流. 通过调节阴、阳极电压的大小及极性, 记录每一个电压时的光电流, 即得光电流的 I - V 曲线. 实验中通过改变光源同阴极材料之间的距离及调整干涉滤光片的通光面积, 得到各个波长光在具有不同光强时产生的 I - V 曲线. 由于五个干涉滤光片的透射率彼此不同, 为客观和方便地考察光强对光电流的影响, 本文采用归一化光强 S 代表光强大小. 归一化的方向是每个频率入射光的最大光强, 最大光强由该单色光最短的光源同阴极材料之间的

距离 d_{\min} 及该单色光最大的干涉滤光片的通光面积 A_{\max} 给出, 即 $S = \frac{A}{d^2} / \frac{A_{\max}}{d_{\min}^2}$, 其中, A 是干涉滤光片的通光面积, 而 d 为光源同阴极材料之间的距离. 这样, 每一个入射波长中最大的入射归一化光强为 1. 实验在室温中进行, 温度范围在 290—303 K 之间.

图 1 给出了具有确定归一化光强 S 的五个波长产生的光电流-电压实验曲线. 图 2 则是由四个不同归一化光强的 365.0 和 546 nm 波长的光产生的光电流同对应电压之间的实验散点分布曲线. 从图 1 和图 2 的实验曲线可以看出, 当阴、阳极之间的电压由最大的反向偏压向最大的正向偏压增加时, 光电流从反向饱和光电流开始上升达到正向饱和光电流, 期间在某一个电压之前曲线是向上凹的, 而在这电压之后曲线是向下凹的, 呈现出典型光电效应的光电流-电压曲线特征.

电子遵守费米-狄拉克统计:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp((E - E_f)/kT)}, \quad (1)$$

此处 $f(E)$ 为电子具有能量 E 的概率, E_f 是费米能级, T 为绝对温度, k 为 Boltzmann 常量, 它是 $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$.

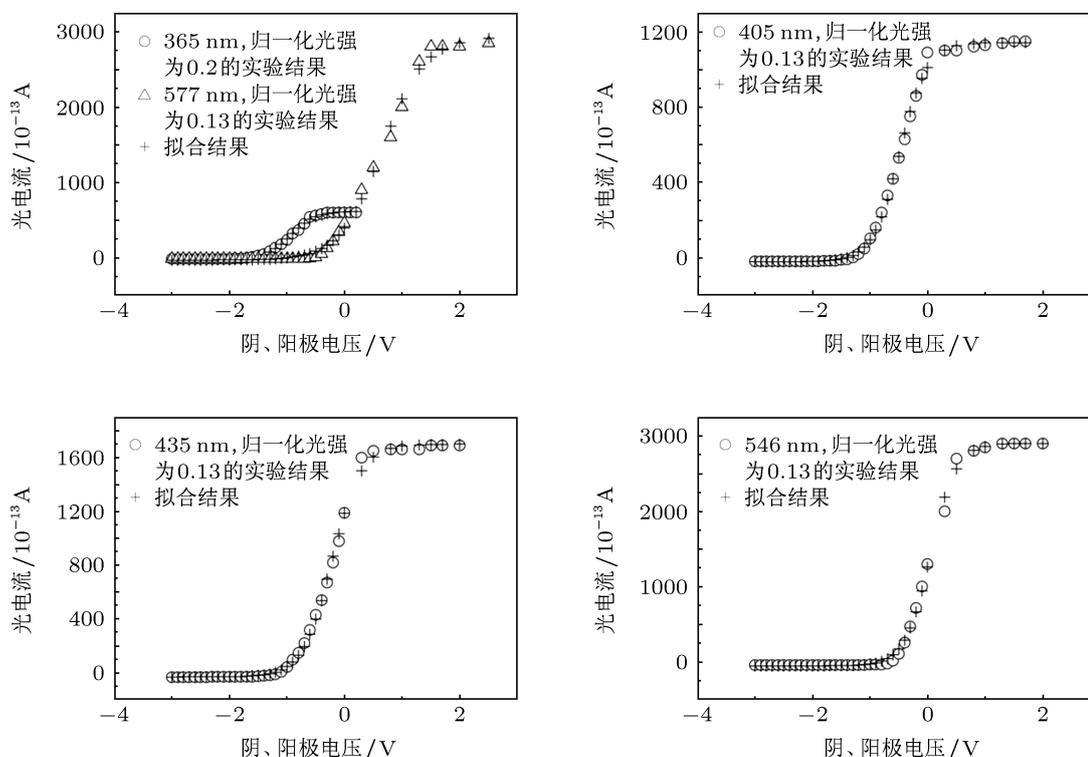


图 1 在确定归一化入射光强时光电效应的实验与理论光电流结果的比较

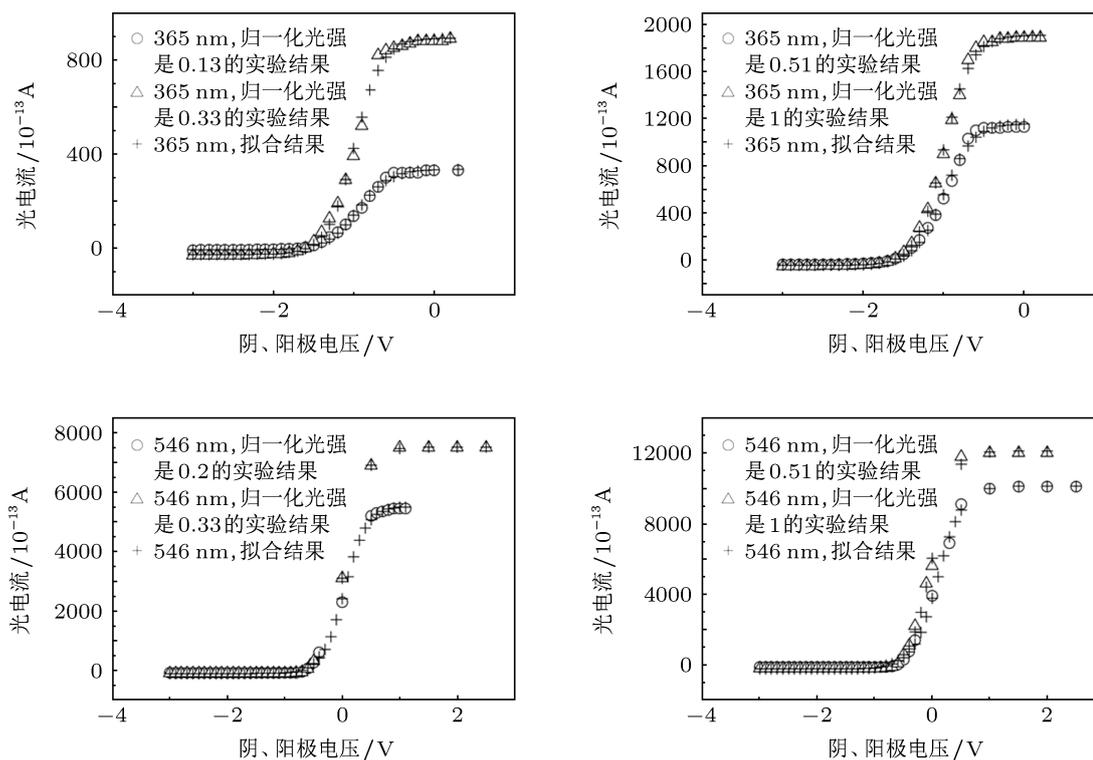


图2 光电效应的实验与理论光电流结果的比较及它们作为归一化入射光强的函数分布

当固体中的电子吸收一个光子的能量 $h\nu$ 并进入外电场 V (V 为阴、阳极之间的电压), 它所具有的最大能量是 $eV + h\nu - e\delta - e\phi$, 此处 e 为电子的电荷, 即 $e = -1.602 \times 10^{-19}$ C(库仑), $e\phi$ 为金属阴极的逸出功, δ 是阴、阳极表面差异(含温度)引起的电势差. 于是, 电子离开阴极表面能具有最大能量 $eV + h\nu - e\delta - e\phi$ 的概率为

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp((E - E_f)/kT)} = \frac{1}{1 + \exp\left(\left(V + \frac{h}{e}\nu - \phi - \delta\right) \frac{e}{kT}\right)}. \quad (2)$$

令

$$V_c = \delta + \phi - \frac{h}{e}\nu(V), \quad (3)$$

$$V_0 = \frac{kT}{e}(V), \quad (4)$$

则

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\left(V + \frac{h}{e}\nu - \phi - \delta\right) \cdot \frac{e}{kT}\right)} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{V - V_c}{V_0}\right)}. \quad (5)$$

在室温范围内, 若阴极 290 K, $V_0 = \frac{kT}{e} = 0.25$ V. 阴极温度为 303 K, $V_0 = \frac{kT}{e} = 0.26$ V. 光电流 $I(V)$ 应该与概率 $f(E)$ 成正比, 即

$$I(V) = \frac{c_2}{1 + \exp\left(\frac{V - V_c}{V_0}\right)}. \quad (6)$$

但是因为

$$\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{V - V_c}{V_0}\right)} \Big|_{V \rightarrow \infty} = 0, \quad (7)$$

而实验结果表明在正向电压到一定值时, 光电流 $I(V)$ 是正向饱和光电流 I_{\max} , 所以可以将 (7) 式改写为

$$I(V) = c_1 + \frac{c_2}{1 + \exp\left(\frac{V - V_c}{V_0}\right)}. \quad (8)$$

光电流 $I(V)$ 的两个极限是

$$I(V) \Big|_{V \rightarrow \infty} = I_{\max}, \quad (9)$$

$$I(V) \Big|_{V \rightarrow -\infty} = I_{\min}, \quad (10)$$

这里 I_{\min} 为反向饱和光电流, 考虑到

$$\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{V - V_c}{V_0}\right)} \Big|_{V \rightarrow -\infty} = 1, \quad (11)$$

得到

$$c_1 = I_{\max}, \quad (12)$$

$$c_2 = I_{\min} - I_{\max}. \quad (13)$$

这样由费米-狄拉克统计得到的光电流 I 随阴、阳极之间电压 V 的函数变化为

$$I(V) = I_{\max} + \frac{I_{\min} - I_{\max}}{1 + \exp((V - V_c)/V_0)}, \quad (14)$$

这里 I_{\min} 和 I_{\max} 分别为反向饱和光电流和正向饱和光电流的理论结果, 在数学上 V_c 是阴、阳极电压-光电流曲线的拐点电压, 在小于 V_c 的阴、阳极电压区间曲线是向上凹的, 而在大于 V_c 的阴、

阳极电压区间曲线是向下凹的, 同时在 V_c 处光电流取得其平均值 $(I_{\min} + I_{\max})/2$, V_0 则是电压常量. I_{\min} , I_{\max} , V_c , V_0 均将通过最小二乘方曲线拟合得到优化值.

以函数 (14) 对图 1 及图 2 的光电流-电压实验结果进行曲线最小二乘方最佳拟合, 得到了优化参数 I_{\min} , I_{\max} , V_c 和 V_0 . 图 1 和图 2 中的 + 字散点曲线为理论计算到的光电流随阴、阳极电压的分布. 表 1 展示了应用图 1 及图 2 的实验数据所得在每一个实验中入射波长和对应光强时的最优化参数和具体的拟合函数, 同时, 表 1 也给出了理论结果与实验结果之间的相关系数以评价拟合结果.

表 1 五个入射波长在不同归一化入射光强时光电流随着阴、阳极电压变化的拟合结果及评价

波长 λ/nm	相对入射光强	函数形式 / 10^{-13} A	相关系数
365	0.2	$I(V) = 615.90 - \frac{14.27 + 615.90}{1 + \exp((V + 0.93)/0.21)}$	0.999
405	0.13	$I(V) = 1142.85 - \frac{21.04 + 1142.04}{1 + \exp((V + 0.48)/0.23)}$	0.999
435	0.13	$I(V) = 1699.39 - \frac{31.40 + 169.39}{1 + \exp((V + 0.22)/0.25)}$	0.999
546	0.13	$I(V) = 2902.38 - \frac{50.63 + 2902.38}{1 + \exp((V + 0.0495)/0.22)}$	0.999
577	0.13	$I(V) = 2928.61 - \frac{31.46 + 2928.61}{1 + \exp((V - 0.65)/0.36)}$	0.999
365	1	$I(V) = 1911.61 - \frac{48.01 + 1911.61}{1 + \exp((V + 1.0)/0.17)}$	0.999
365	0.51	$I(V) = 1159.89 - \frac{33.14 + 1159.89}{1 + \exp((V + 0.99)/0.18)}$	0.999
365	0.32	$I(V) = 892.57 - \frac{27.45 + 892.57}{1 + \exp((V + 0.99)/0.17)}$	0.999
365	0.13	$I(V) = 335.12 - \frac{6.86 + 335.12}{1 + \exp((V + 0.94)/0.19)}$	0.999
546	1	$I(V) = 12121.45 - \frac{228.94 + 12121.45}{1 + \exp((V + 0.0055)/0.19)}$	0.999
546	0.51	$I(V) = 10133.88 - \frac{153.57 + 10133.88}{1 + \exp((V + 0.1)/0.21)}$	0.999
546	0.33	$I(V) = 7510.61 - \frac{108.91 + 7510.61}{1 + \exp((V + 0.057)/0.18)}$	0.999
546	0.2	$I(V) = 5526.60 - \frac{87.61 + 5526.60}{1 + \exp((V + 0.042)/0.19)}$	0.999

本工作的第二个最终目的是以阴、阳极电压和归一化入射光强同时预测光电流. 于是在图 3 中分别以表 1 中的最优化参数 I_{\min} 和 I_{\max} 为因变量, 而用归一化入射光强 S 作为自变量画出它们的散点分布图. 最小二乘方曲线拟合的结果表明反向饱和和电流的理论结果同归一化入射光强的关系是非

线性 ExpDecay2 函数

$$I_{\min}(S) = C_0 + C_1 \exp(-S/t_1) + C_2 \exp(-S/t_2), \quad (15)$$

这里的 C_0 , C_1 , C_2 , t_1 和 t_2 均为最优化拟合参量. 对 365 nm 具体函数是

$$I_{\min}(S) = 7195.99 + 46.98 \exp(-S/0.15)$$

$$-7218.43 \exp(-S/283.57), \quad (16)$$

这里的相关系数是 0.998.

对 546 nm 具体函数为

$$I_{\min}(S) = 154.92 \exp(-S/0.83) + 154.92A_2 \exp(-S/0.83) - 321.03, \quad (17)$$

这里的相关系数是 0.996. 如果 $A_1 = A_2$, 并且 $t_1 = t_2$, ExpDecay2 函数就退化为 ExpDecay1 函数.

使用图 3 中的散点分布进行最小二乘方曲线拟合的结果表明正向饱和光电流 I_{\max} 理论结果和归一化入射光强 S 的关系是非线性 logistic 函数,

$$I_{\max}(S) = B_1 + \frac{B_1 - B_2}{1 + \left(\frac{S}{S_0}\right)^P}, \quad (18)$$

这里的 B_1, B_2, S_0 和 P 均为最优化拟合参量. 对 365 nm 具体函数为

$$I_{\max}(S) = 15531.80 - \frac{298.54 + 15531.80}{1 + \left(\frac{S}{17.67}\right)^{0.64}}, \quad (19)$$

这里的相关系数是 0.998, 对 546 nm 具体函数为

$$I_{\max}(S) = 15452.03 - \frac{6421.80 + 15452.03}{1 + \left(\frac{S}{0.17}\right)^{0.99}}, \quad (20)$$

获得了 0.997 的相关系数.

如果能够建立拐点电压 V_c 同入射光频率 ν 之间的定量关系, 就意味着找到了光电流同入射光频率 ν 之间的定量关系. 从表 1 中可以看出 V_c 是随着入射光频率 ν 的增加而有规律地减小. 只有 546 nm 波长的光除外, 这可能是实验所用阴极材料在 546 nm 附近有反常吸收所致. 图 4 展示了拟合所得拐点电压 V_c 随光频率 ν 的变化, 最小二乘方曲线拟合结果表明表 1 中的拐点电压 V_c 同入射光频率 ν 之间是线性关系:

$$V_c = a\nu + b = 2.75 - 0.44 \times 10^{-14}\nu, \quad (21)$$

这里的 2.75 正是本实验中阴极材料银氧钾的逸出功 ϕ , 而 $(-0.44 \times 10^{-14}) \times (-1.602 \times 10^{-19}) = 7.0 \times 10^{-34}$ 正好为普朗克常量, 它同公布值的相对误差为 7.0%. 这个结果表明在具有正向和反向饱和光电流的实验光电流随阴、阳极电压变化情况时, 有可能应用拟合出的拐点电压 V_c 和入射光频率 ν 测得普朗克常量, 或者说能够由优化拐点电压及入射光频率得到普朗克常量和阴极材料的逸出功 ϕ , 表明本文所得光电流随阴、阳极电压及归一化入射光强的定量关系应该是正确的.

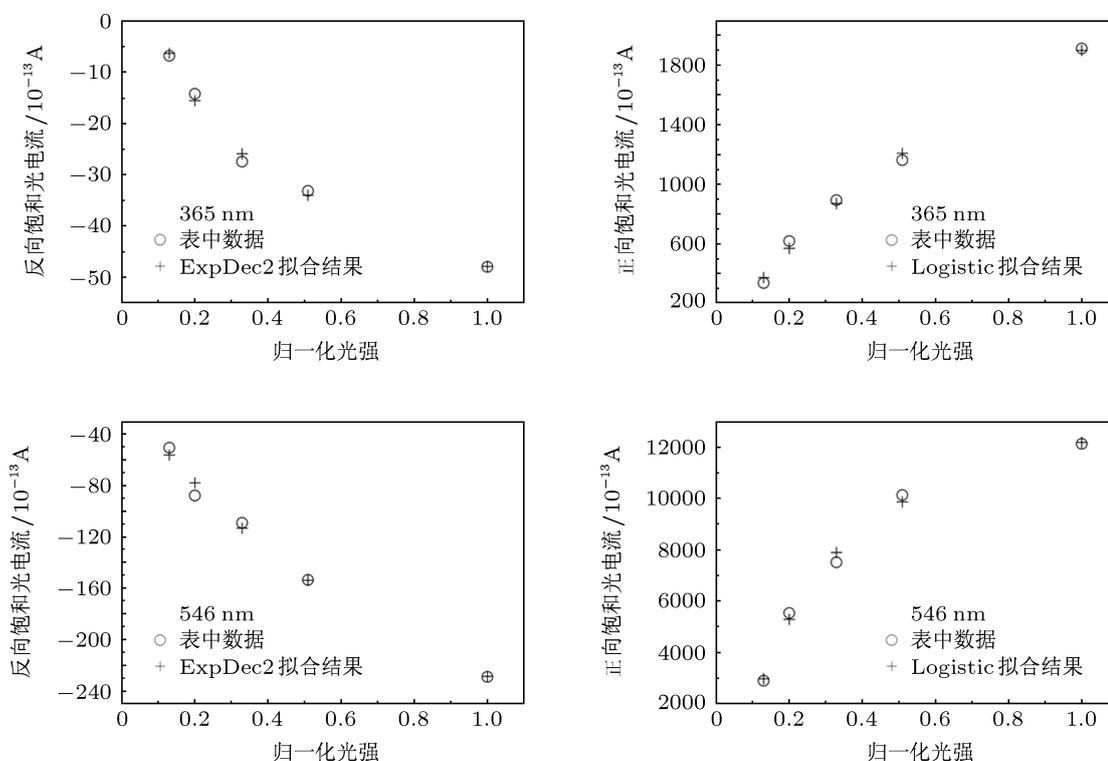


图 3 表 1 中的反向和正向饱和光电流的理论结果随归一化入射光强变化及它们之间的数学关系

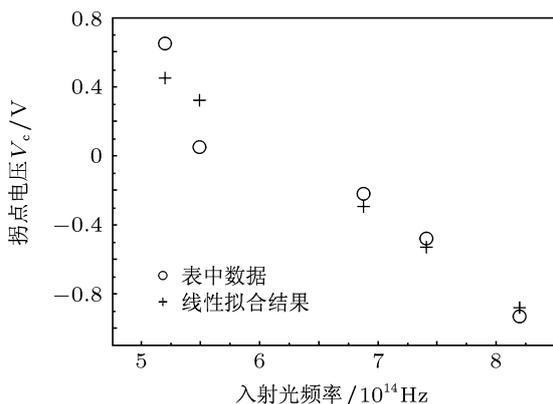


图4 表1中的拐点电压 V_c 与入射光频率 ν 的函数分布及其模拟结果

将方程 (2) 中的主变量由电压 V 改成频率 ν , 则方程 (2) 的另外一种形式是

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{(eV + h\nu - e\delta - e\phi)1}{kT}\right)} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\nu - \nu_c}{\nu_0}\right)}, \quad (22)$$

这里 ν_c 为 $\frac{e}{h}(\phi + \delta - V)$ 而 ν_0 是 $\frac{kT}{h}$. 于是, 光电流与光频率之间的定量关系为下面的函数形式

$$I(V) = I_{\max} + \frac{I_{\min} - I_{\max}}{1 + \exp((\nu - \nu_c)/\nu_0)}. \quad (23)$$

表2 处于三个电场中的阴极在同一光强入射时所产生光电流随着入射光频率变化的拟合结果及评价

电场强度/ $V \cdot \text{cm}^{-1}$	函数形式	相关系数
6.31×10^4	$I(\nu) = 14.41 + \frac{0.94 - 14.41}{1 + \exp((\nu - 5.60)/0.087)}$	0.999
3.62×10^4	$I(\nu) = 48.56 - \frac{48.56 + 0.48}{1 + \exp((\nu - 5.95)/0.18)}$	0.999
9.00×10^3	$I(\nu) = 18.72 - \frac{18.72 + 0.18}{1 + \exp((\nu - 5.78)/0.12)}$	0.999

把 (15) 和 (18) 及 (21) 式代入 (14) 式就得到光电流随阴、阳极电压和归一化入射光强, 频率变化的函数形式为

$$I(V, S, \nu) = I_{\max}(S) + \frac{I_{\min}(S) - I_{\max}(S)}{1 + \exp((V - (a\nu + b))/V_0)}, \quad (24)$$

(24) 式说明能够以阴、阳极电压, 入射光的强, 入射光频率应用 (24) 函数式预报光电流. 表 1 中的 V_0 在

本文将用图 5 展示的光电流随光频率变化的实验结果 [19], 检验方程 (23) 给出的光电流同光频率之间的关系是否真实. 应用文献 [19] 中的实验数据可以得到表 2 中在不同电场中光电流作为光频率函数的最优化参数和具体的拟合函数, 同时, 表 2 也给出了理论结果与实验结果之间的相关系数以评价拟合结果. 图 5 直观地表现了光电流-光频率实验和预测结果之间的符合程度. 由此可以认为能够相当准确地由光频率预报光电流. 因为表 2 中的 ν_c 几乎不变, 所以 ν_c 可能与阴极处的电场无关.

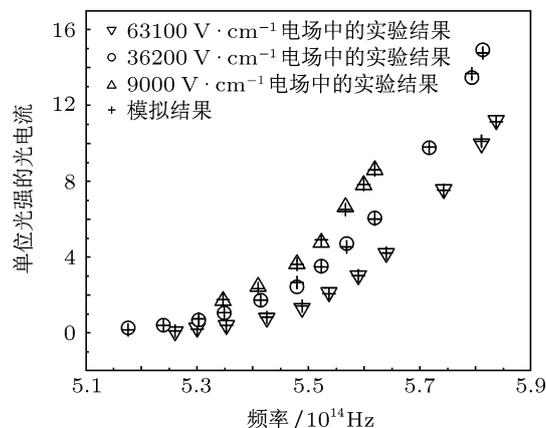


图5 相同入射光强在处于不同电场中的阴极产生的光电流随入射光频率变化的实验 [19] 与理论结果

其平均值 0.2 伏特附近发生幅度不大的变化, 表明前面室温中的 $V_0 = \frac{kT}{e}$ 计算结果是有实验根据的.

3 结论

旨在精确和可靠地由阴、阳极电压, 入射光强, 入射光频率从反向到正向饱和光电流计算光电效应中的光电流. 根据费米-狄拉克统计的物理意义

及作用, 本文直接以阴、阳极电压为自变量, 而以光电流为因变量, 寻找到一个四参数方程. 应用这个四参数方程能够从反向饱和光电流到正向饱和光电流给出阴、阳极电压同光电流之间的定量关系. 不仅如此, 完全能够建立起光强与本文建议的四参数方程中的两个参数之间的数学关系, 于是能够定量理解光强对光电流的贡献, 最后, 本文合理地找到了入射光频率同本文建议的四参数方程中的一个参数之间的函数关系. 从而能够由阴、阳极之间的电压及入射光的性质预测光电流. 由于现代

计算机的普及加上科技数据分析处理软件的丰富, 可以认为本文所提供的方法能够非常精确、方便、快速地定量理解各种材料的光电性能.

人类已经得到了许多材料的电压-电流实测曲线^[9-15], 随着时间的推移, 将会有更多新材料的电压-电流实测曲线出现. 本文所设计方案即有普通物理原理作基础, 又进行了数学上的合理模拟, 相信该方法能在探知已有及新材料的光电性能知识方面发挥积极的作用.

- [1] Hertz H 1887 *Annalen der Physik* **31** 983
- [2] Nordling C, Sokolowski E, Siegbahn K 1957 *Phys. Rev.* **105** 1676
- [3] Siegbahn K, Nordling C, Johansson G, Hamrin K, Gelius U, Bergmark T, Werme L O, Manne R, Baer Y 1969 *ESCA applied to free molecules* (Amsterdam, The Netherlands: North-Holland)
- [4] Ref to URL of Karl Siegbahn's picture: <http://nobelprize.org/physics/laureates/1924/siegbahn-bio.html>
- [5] Karl Siegbahn's Nobel Lecture <http://nobelprize.org/physics/laureates/1924/siegbahn-lecture.pdf>
- [6] Ref to URL of Kai Siegbahn's picture: http://www.nobel-winners.com/Physics/kai_manne_borje_siegbahn.html
- [7] Ref to Kai Siegbahn's Nobel Lecture <http://nobelprize.org/physics/laureates/1981/siegbahn-lecture.pdf>
- [8] Ref for C 1s ESCA <http://cmm.mrl.uiuc.edu/techniques/xps.htm>
- [9] Sze S 1999 *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd ed. (New York: Wiley)
- [10] Huang Shaoyan, Liu Minbo, Tang Benqi 2011 *High Power Laser and Particle Beams* **23** 801 (in Chinese) [黄绍艳, 刘敏波, 唐本奇 2011 强激光与粒子束 **23** 801]
- [11] Riad S 2000 *Thin Solid Film* **370** 253
- [12] Duan Li, Lin Bixia, Fu Zhuxi 2005 *Chin. J. Sem.* **26** 1963 (in Chinese) [段理, 林碧霞, 傅竹西 2005 半导体学报 **26** 1963]
- [13] Luo Jun, Liao Bin, Hen Yi Ming 2010 *J. Inorganic Materials* **25** 557
- [14] El Amrani A, Lucas B, Ratier B 2011 *Synthetic Metals* (in press)
- [15] Liang H, Liao B, Wu X Y 2011 *Vacuum* **48** 25 (in Chinese) [梁宏, 廖斌, 吴先映 2011 真空 **48** 25]
- [16] Liu C S 2011 *Opto-Electronic Engineering* **38** 48 (in Chinese) [刘昶时 2011 光电工程 **38** 48]
- [17] Einstein A 1905 *Annal der Physik* 17132
- [18] Fan Tian Xiu Yi, Shen Qian Xi, Da Ya He Long, (translated by Qu Chang Zhi from Japanese into Chinese) 1987 *Values Table in Common use for Physics* Beijing: Science Press. p44 [饭田修一, 神前熙, 大野和郎等合编, 曲长芝译, 郭永江校 1987 物理学常用数表 (第一版) (北京: 科学出版社) 第 44 页]
- [19] Lawrence E O, Lindord L B 1930 *Phys. Rev.* **36** 482

Determination of photoelectric current by voltage between anode and cathode, intensity and frequency of light*

Liu Chang-Shi^{1)†} Liu Wen-Li²⁾

1) (*Nan Hu College, Jiaxing University, Zhejiang 314001, China*)

2) (*College of mathematics, physics and information engineering, Jiaxing University, Zhejiang 314001, China*)

(Received 18 May 2012; revised manuscript received 1 August 2012)

Abstract

Based on the Fermi-Dirac distribution, a typical numerical method to calculate photoelectric current by voltage between anode and cathode in vacuum is developed. The results of simulations agree very well with the observed curves consisting of photoelectric current and voltage. Then, the contribution of intensity of incident light to photoelectric current is obtained mathematically. Finally, the wavelength of incident light is related to photoelectric current theoretically. Hence, photoelectric current can be predicted.

Keywords: photoelectric current, simulation, voltage, intensity of incident light

PACS: 84.60.Jt, 42.79.Ek

DOI: 10.7498/aps.62.028401

* Project supported by the Science & Technology Program of Department of Education in Zhejiang, China (Grant No. Y201122757).

† Corresponding author. E-mail: liucs4976@sohu.com