Unes notes breus i urgents sobre potencial Piezoelèctric
JP

La deformació (*strain*) suposa canviar els nuclis de lloc i com aquests tenen càrrega neta, s'indueix una polarització P^{st} proporcional a la deformació o *strain*:

$$P_i^{st}(\mathbf{r}) = \sum_k^6 e_{ik} \cdot \varepsilon_k(\mathbf{r}) \tag{1}$$

on 1,2,3,4,5,6 vol dir xx,yy,zz,yz,xz,xy. Els tensors piezoelèctrics per a wurtzita i ZnBlenda són

$$e_{ik}^{wr} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$e_{ik}^{znbl} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} \end{pmatrix} \tag{3}$$

Aleshores, en wurtzita

$$\begin{aligned} P_x^{st} &= e_{15}\varepsilon_{xz} \\ P_y^{st} &= e_{15}\varepsilon_{yz} \\ P_z^{st} &= e_{31}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + e_{33}\varepsilon_{zz} \end{aligned} \tag{4}$$

Per tant, l'*strain* biaxial unicament genera $P_z^{st} \neq 0$.

En ZnBlenda,

$$\begin{aligned} P_x^{st} &= e_{14}\varepsilon_{yz} \\ P_y^{st} &= e_{14}\varepsilon_{xz} \\ P_z^{st} &= e_{14}\varepsilon_{xy} \end{aligned} \tag{5}$$

l'*strain* biaxial no produeix polaritzabilitat.

Si tenim un objecte amb simetria axial, unicament podem generar $P_z^{st} \neq 0$.

Les estructures wurtzite creixcudes en la direcció de l'eix princial (C), la pròpia polaritzabilitat del material general una polarització espontània (*pyroelectric*). Aquesta únicament depen del material (de la seua polaritzabilitat). Per exemple $P_{SP}(GaN) = -0.034\,C/m^2$, $P_{SP}(InN) = -0.042\,C/m^2$.

La polarització total és $\mathbf{P} = \mathbf{P}^{st} + \mathbf{P}_{SP}$. Aquesta genera un camp elèctric equivalent al que genera una càrrega $\rho(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r})$ (veure apunts que vaig prepara per al master de Física). Aquest camp deriva d'un potencial $\phi(\mathbf{r})$, d'acord amb l'equació de Poisson:

$$\epsilon_0 \nabla \left[\epsilon_r(\mathbf{r}) \cdot \nabla\phi(\mathbf{r})\right] = 4\pi\rho(\mathbf{r}) \tag{6}$$

on ϵ_0 és la constant dielèctrica del buit i ϵ_r el tensor dielèctric, que en el cas ZnBlenda no és més que la constant dielècrica relativa multipicada per la matriu unitat 3 x 3, i en el de wurtzita és diagonal amb els dos primers elements de la diagonal iguals $\epsilon_r(xx) = \epsilon_r(yy)$ i el tercer diferent $\epsilon_r(zz)$.

El potencial elèctric axial entra en l'hamiltonià electrònic (o el de forats) com un potencial escalar més:

$$\hat{H}_e = \hat{T} + V_C + \hat{H}_\varepsilon - e\phi(\mathbf{r}) \tag{7}$$

on V_C és el potencial confinant i $\hat{H}_\varepsilon = a_c^{zz}\varepsilon zz + a_c^{xx}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$ l'hamiltonià d'*strain*.

Anàlogament, en forats, cal afegir el potencial $V_p = +e\phi(\mathbf{r})$ en els elements de la diagonal de la matriun hamiltoniana.

Referencies bàsiques:

B Jogai, JAP 90 (2001) 699
VA Fonoberov and Balandin, J. Vac. Sci. Technol. B 22 (2004) 2190
J Wang, Jeon,Sirenko i Kim, IEEE Photonics Tech. Lett 9 (1997) 728
M Winkeelnkemper ... Bimberg PRB 74 (2006) 155322