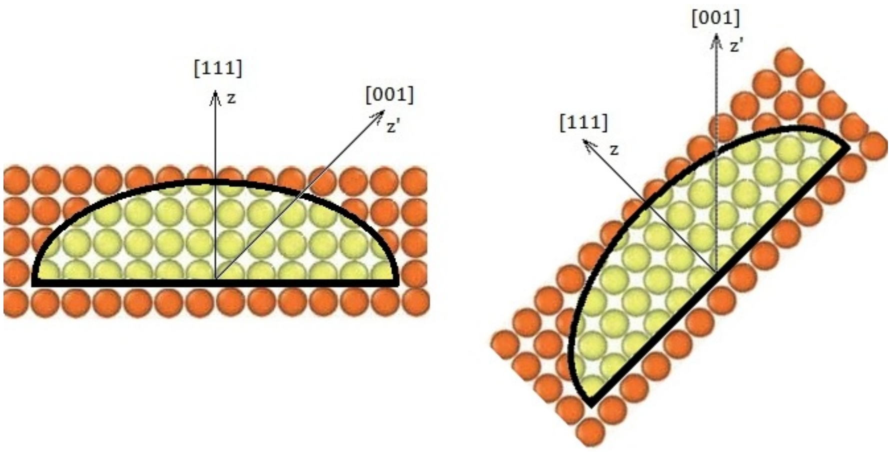
Tensors de stiffness i piezoelèctric en estructures cristal·lines creixcudes en direccions arbritràries continuacio: Rotació de l'Hamiltonià LK amb strain

Josep Planelles

September 13, 2014

1 El sistema i formes alternatives de calcular-lo

Hem creiscut un QD de forma lenticular en la direcció [111] enterrat en una matriu semiconductora que considerem infinita. El QD descansa sobre una base plana i els plànols d'atoms paral.lels a la base són perpendiculars a la direcció cristal·lina [111] (vegeu esquema a la dreta en la Figura 1). A aquesta direcció de creixement li fem correspondre l'eix z. Aquest mateix sistema pot contemplar-se però com un QD que ha crescut a partir d'un costat en la direcció [001] (vegeu la part dreta d'aquesta mateixa figura). És a dir, que els planols d'atoms que trobem a mesura que pujem en la nova direcció que anomenem z' són perpendiculars a la direcció cristal·lina [001]. Òbviament les dues formes de descriure el sistema han de ser equivalents, malgrat que estiguen descrites amb coordenades diferents.



Podem calcular en el sistema de coordenades x', y', z', en les quals el potencial confinant V_c' té forma de lent que descansa en un costat, com en "equilibri inestable". Aquests eixos es corresponen amb el creixement cristal·lí standard [001] per al qual coneixem la forma de l'Hamiltonià H_k corresponent a l'energia cinètica, que té la mateixa estructura que l'Hamiltonià H_ϵ de strain, de manera que tenim:

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_k^{[001]} + \mathbb{H}_\epsilon^{[001]} + V_c' \, \mathbb{I} \tag{1}$$

L'hamiltonià $\mathbb{H}_k^{[001]}$ podem convertir-lo formalment en $\mathbb{H}_\epsilon^{[001]}$ amb les substitucions formals:

$$\begin{array}{ccc} k_i \, L \, k_j & \rightarrow & \ell \, \epsilon_{ij} \\ k_i \, M \, k_j & \rightarrow & m \, \epsilon_{ij} \\ k_i \, N \, k_j & \rightarrow & n \, \epsilon_{ij} \end{array} \tag{2}$$

Cal fer notar que si la massa és variable aleshores $\mathbb{H}_k^{[001]}$ es converteix en $\mathbb{H}_{BF}^{[001]}$ (Ham iltonià de Burt-Foreman) on el paràmetre N desapareix i apareixen dos paràmetres nous N_1 i N_2 amb $N = N_1 + N_2$.

Si imposem massa constant en $\mathbb{H}_{BF}^{[001]}$, hom pot comprovar que hi ha termes on parareix $(N_1 - N_2)$ que es cancel·len i altres en que N_1 i N_2 acaben sumant-se fent apareixer N, recuperant l'Hamiltonia de Luttinger-Kohn $\mathbb{H}_k^{[001]}$.

En el cas de $\mathbb{H}_\epsilon^{[001]}$ no importa que hi hagi massa constant o depenent de la posició, atès que no hi ha derivacions, cosa que fa que els termes que en que apareix $(n_1 - n_2)$ acaben cancelant-se sempre i els altres termes amb n_1 i n_2 acaben sumant-se donant n i recuperant $\mathbb{H}_\epsilon^{[001]}$, encara que estiguem en un sistema de massa depenent de la posició.

Doncs be, una forma de resoldre el problema és fent ús de l'equació (1). El càlcul del tensor de strain ϵ_{ij} que entra en $\mathbb{H}_\epsilon^{[001]}$ es calcula amb els coeficients elàstics $C_{ijkl}^{[001]}$ i amb la geometria de lent que descansa en un costat, com en "equilibri inestable".

De vegades pot interessar usar el sistema coordenat x, y, z. En aquestes coordenades el QD té forma de lent que descansa sobre la seua base, i el corresponent potencial de confinament espacial és V_c. A l'hora de calcular l'strain usarem aquesta geometria però atès que l'eix z ara va en la direcció de creixement [111] caldrà usar els coeficients elàstics $C_{ijkl}^{[111]}$. Aquests se poden obtenir per simple rotació de coordenades:

$$C_{ijkl}^{[111]} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} u_{i\alpha} u_{j\beta} u_{k\gamma} u_{l\delta} \, C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{[001]} \tag{3}$$

d'aquesta manera obtenim el tensor de strain del sistema[1] de components ϵ_{xx}, ϵ_{xy} etc. en la direcció dels eixos x, y, z en els quals el QD descansa sobre la seua base.

A l'hora de calcular l'energia partirem de l'hamiltonià que coneixem que correspon amb una estructura cristal·lina que creix en la direcció [001]. Açò en obliga a usar els eixos x', y', z'. En aquests eixos, en termes de matrius de moment angular i les seues combinacions, l'Hamiltonià és

$$\mathbb{H} = \sum_i f(k'_j, \epsilon'_{kl}) \mathbb{M}'_i + V'_c \, \mathbb{I} \tag{4}$$

on e.g. ϵ'_{xy} representa la component de strain en la direcció dels eixos x', y'. De la mateixa manera, V'_c representa el potencial confinant en aquests mateix eixos de QD en "equilibri inestable".

Ara be, com nosaltres volem treballar en els eixos x, y, z farem una rotació. És a dir, subtituirem:

$$\begin{aligned} k'_i &= \sum_j u_{ij} k_j \\ \epsilon'_{ij} &= \sum_{kl} u_{ik} u_{jl} \epsilon_{kl} \\ \mathbb{M}'_i &= \sum_j u_{ij} \mathbb{M}_j \end{aligned} \tag{5}$$

i V'_c per V_c (que és el potencial confinant en els eixos x, y, z).

Pot ser ens interesse calcular piezoelectricitat. Aquesta genera un potencial V_p que és diagonal (és a dir entra en l'Hamiltonià en forma d'un terme $V_p \, \mathbb{I}$ que se suma). Per tant, podem calcular aquest potencial en els eixos x, y, z, cosa que ens obligarà a usar coeficients piezoelèctrics en la direcció [111],

$$e_{ijk}^{[111]} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} u_{i\alpha} u_{j\beta} u_{k\gamma} \, e_{\alpha\beta\gamma}^{[001]} \tag{6}$$

Aleshores la polarització piezoelèctrica ve donada per:

[1] Cal fer notar que el resultat seria el mateix, excepte que estaria expressat en altres coordeandes, si calculem l'strain amb una geometria de QD en "equilibri inestable" i coeficients elàstics $C_{ijkl}^{[001]}$.

$$p_i = \sum_k e_{ijk}^{[111]} \epsilon_{jk} \tag{7}$$

on ϵ_{jk} és l'strain calculat en els eixos x, y, z i p_i el vector de polarització piezoelèctrica en aquests mateixos eixos.

De la mateixa manera, cas de ser la constant dielectrica anisotròpica, ens caldrà rotar-la,

$$\varepsilon_{ij}^{[111]} = \sum_{\alpha,\beta} u_{i\alpha} u_{j\beta}\, \varepsilon_{\alpha\beta}^{[001]} \tag{8}$$

encara que en el cas de ZB, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_0\ \mathbb{I}$ i la rotació no la canvia:

$$\varepsilon_{ij}^{[111]} = \sum_{\alpha,\beta} u_{i\alpha} u_{j\beta}\, \varepsilon_0 \delta_{\alpha,\beta} = (\sum_{\alpha} u_{i\alpha} u_{j\alpha}) \varepsilon_0 = \varepsilon_0 \tag{9}$$

El potencial elèctric $V_p(x, y, z)$ que resulta en incorporar la polarització piezoelèctrica i la constant dielèctrica en l'equació de Poisson sobre la geometria de QD estable sobre la seua base(eixos x, y, z) l'afegim directament a l'Hamiltonià en la forma $V_p\ \mathbb{I}$.

2 Apèndix: Invariança de l'energia elàstica

La relació entre l'strain en un i altre sistema d'eixos ve determinat per la matriu de rotació u. Les components del tensor de strain en les coordenades x', y', z' (direcció [111]) ϵ'_{ij} ve relacionat amb les components del tensor en les coordandes x, y, z (direcció [001]) per una rotació

$$\epsilon'_{ij} = \sum_{kl} u_{ik} u_{jl} \epsilon_{kl} \tag{10}$$

L'energia elàstica en els eixos x, y, z és:

$$E = \frac{\mathcal{V}}{2} \sum_{ijkl} C_{ijkl}^{[111]} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \tag{11}$$

on $\mathcal{V}$ és el volum, mentre que en els eixos x', y', z' és:

$$\begin{aligned}
E &= \frac{\mathcal{V}}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta}^{[001]} \epsilon'_{\alpha\beta} \epsilon'_{\gamma\delta} && (12)\\
&= \frac{\mathcal{V}}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{ijkl} u_{i\alpha} u_{j\beta} u_{k\gamma} u_{l\delta}\, C_{ijkl}^{[111]} \sum_{mnpq} u_{m\alpha} u_{n\beta} \epsilon_{mn} u_{p\gamma} u_{q\delta} \epsilon_{pq} && (13)\\
&= \frac{\mathcal{V}}{2} \sum_{ijklmnpq} C_{ijkl}^{[111]} \epsilon_{mn} \epsilon_{pq} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} u_{i\alpha} u_{j\beta} u_{k\gamma} u_{l\delta} u_{m\alpha} u_{n\beta} u_{p\gamma} u_{q\delta} && (14)\\
&= \frac{\mathcal{V}}{2} \sum_{ijklmnpq} C_{ijkl}^{[111]} \epsilon_{mn} \epsilon_{pq} \delta_{im} \delta_{jn} \delta_{kp} \delta_{lq} && (15)\\
&= \frac{\mathcal{V}}{2} \sum_{ijkl} C_{ijkl}^{[111]} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} && (16)
\end{aligned}$$

que demostra la invariança de l'energia elàstica en front de rotacions, com no podeia ser d'altra manera per ser l'energia E un escalar.