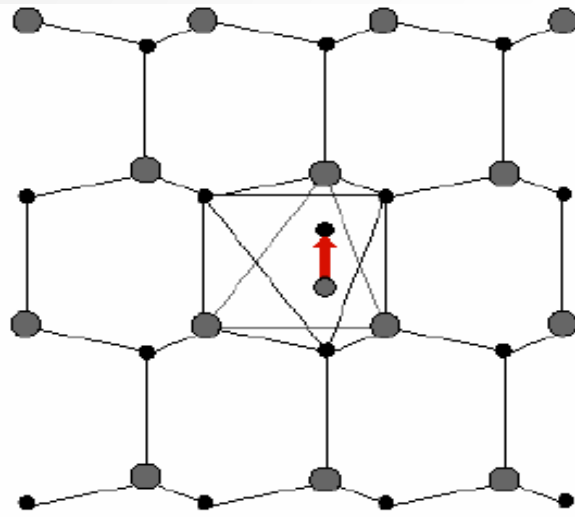


Effets de polarisation dans la structure wurtzite

Polarisation spontanée :



Les barycentres des charges électroniques ne coïncident pas dans l'espace direct → Création de dipôles dans les mailles et naissance de la polarisation spontanée.

Polarisation piézoélectrique :

$$\mathbf{P}^{piez} = \sum_j e_{ij} \varepsilon_j$$

Champ de polarisation électrique

Tenseur piézoélectrique

Tenseur de déformation

Effets de polarisation dans la structure wurtzite

Cas de symétrie wurtzite :

$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$P_z = 2 \left(e_{31} - \frac{C_{13}}{C_{33}} e_{33} \right) \varepsilon_{\perp}$$

Les polarisations selon les axes **x** et **y**, dues à des contraintes de cisaillement sont généralement nulles.

Effets de polarisation dans la structure wurtzite

Résultats :

	InP	InAs	GaN
$e_{15}(C/m^2)$	-0.211	-0.028	–
$e_{31}(C/m^2)$	-0.026	-0.081	-0.35
$e_{33}(C/m^2)$	0.091	0.012	1.27
$P(C/m^2)$	-0.011	-0.013	-0.029

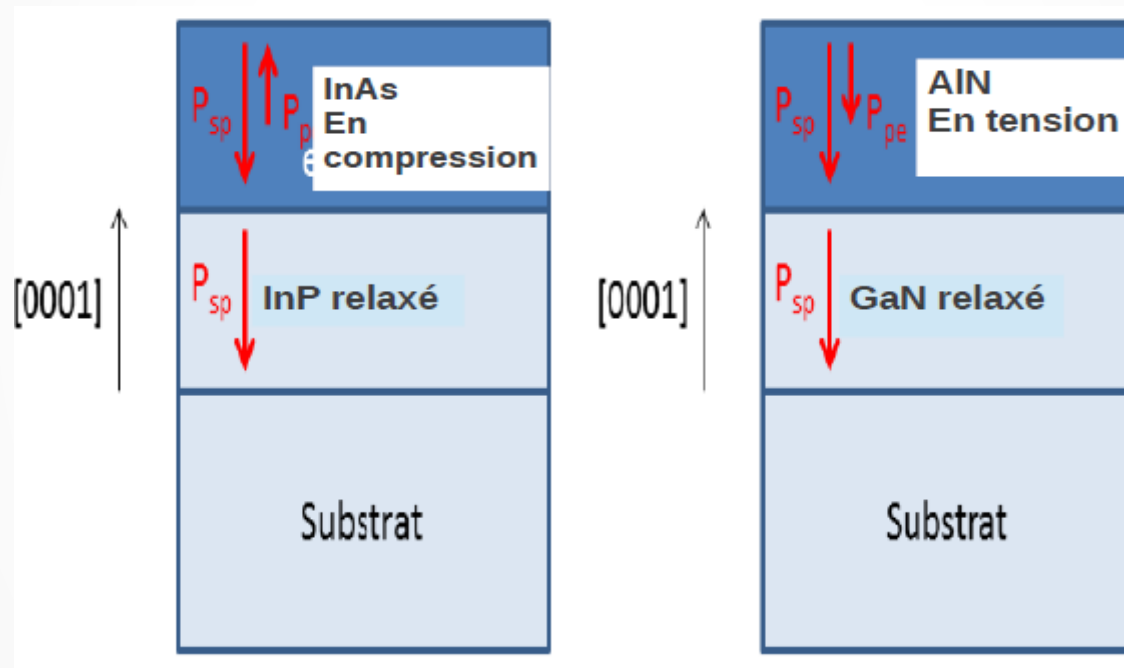
Table 1 : Valeurs des coefficients piézoélectriques et de la polarisation spontanée.

Les nitrures possèdent une polarisation spontanée et des coefficients piézoélectriques beaucoup plus importants que InAs et InP.

- ◆ Caractère peu ionique des liaisons In-P In-As.
- ◆ État de contrainte du matériau : désaccord de maille de 3 % pour le système InAs/InP et 7 % pour un système InN/GaN.

Conséquences de l'existence d'une polarisation

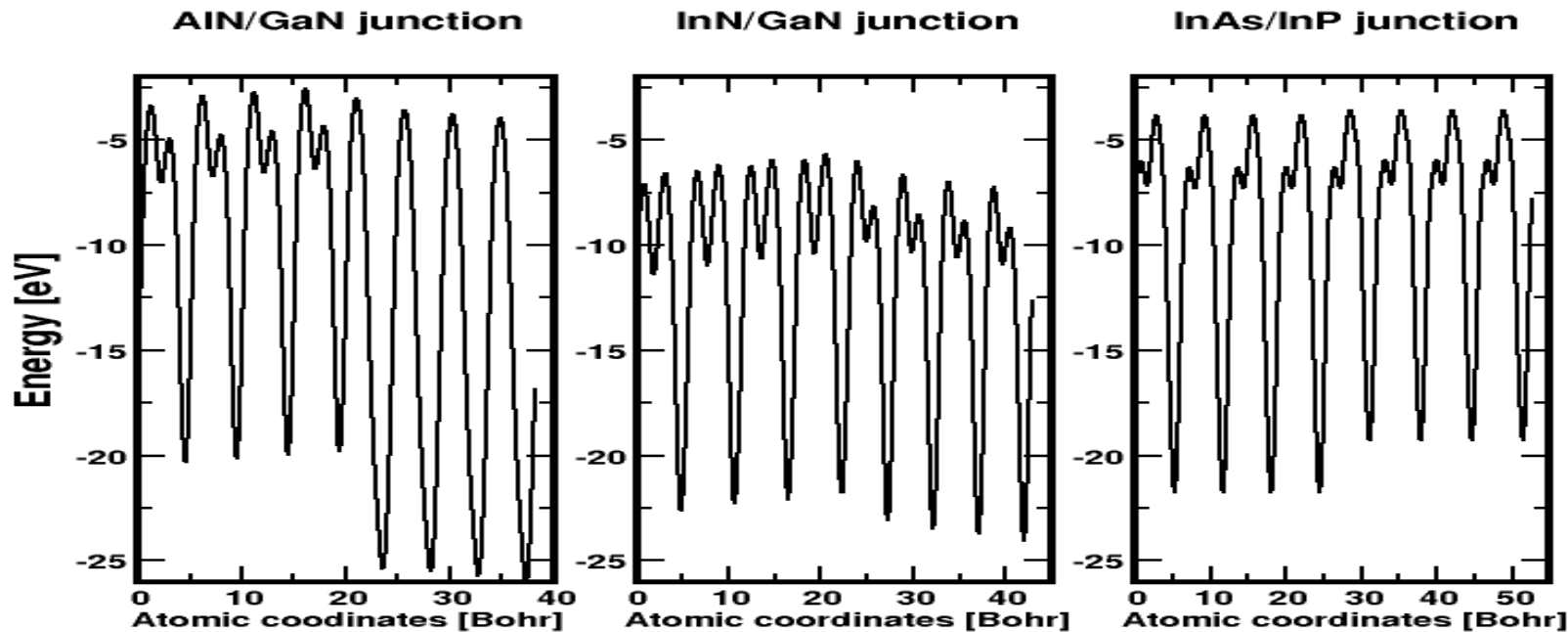
- ◆ Les polarisations spontanée et piézoélectrique peuvent être dans un même sens ou non.
- ◆ À l'interface : $\sigma = (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2) \cdot \mathbf{n}$



Configuration 1 : pas de charges à l'interface et donc pas de champ électrique créé. Donc favorable aux applications optoélectroniques.

Conséquences de l'existence d'une polarisation

Vérification de l'absence de champ électrique (calcul *ab initio*):



Pour les hétérostructures nitrures, l' amplitude du potentiel moyen décroît en fonction des positions atomiques ce qui témoigne de l'existence d'un champ électrique interne.

Dans le cas InAs/InP, l'amplitude du potentiel reste constante d'où l'absence d'un champ électrique pour ce système.

Comme conséquence, on s'attend donc à ne pas avoir d'effets de champ piezoélectrique dans les fils wurtzite InAsP/InP.

26/09/14

