



国家出版基金项目
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

纳米科学与技术

压电电子学与 压电光电子学

王中林 张 岩 武文倬 著
王中林 张 岩 武文倬 译



科学出版社



国家出版基金项目
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

纳米科学与技术

压电电子学与压电光电子学

王中林 著

王中林 张岩 武文倬 译

科学出版社

北京

内 容 简 介

压电电子学和压电光电子学的基本概念和原理由王中林教授研究组分别于 2007 年和 2010 年首次提出。在人机界面、主动式传感器、主动式柔性电子学、微型机器人、智能电子签名、智能微纳机电系统以及能源技术等领域中,压电电子学和压电光电子学具有广阔的应用前景。本书介绍压电电子学和压电光电子学的物理原理、基本理论以及基本器件单元的设计、制造、测试和应用;共分 11 章,包括压电电子学和压电光电子学导论、纤锌矿结构半导体材料中的压电势、压电电子学基本理论、压电电子学晶体管、压电电子学逻辑电路及运算操作、压电电子学机电存储器、压电光电子学理论、压电光电子学效应在光电池中的应用、压电光电子学效应在光电探测器中的应用、压电光电子学效应对发光二极管的影响、压电光电子学效应在电化学反应和能源存储中的应用等内容。

本书是一部系统性强、深入浅出、图文并茂的专业著作,可供相关领域的科研工作者参考使用,同时也可以用作高年级本科生和研究生专业课程的教科书。

图书在版编目(CIP)数据

压电电子学与压电光电子学 / 王中林著;王中林,张岩,武文倬译. —北京:科学出版社,2012

(纳米科学与技术 / 白春礼主编)

ISBN 978-7-03-035790-8

I. 压… II. ①王… ②张… ③武… III. ①纳米技术-应用-电子学; ②纳米技术-应用-光电子学 IV. ①TN01 ②TN201

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 245608 号

责任编辑:顾英利 杨 震 / 责任校对:刘小梅

责任印制:钱玉芬 / 封面设计:陈 敬

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京通州皇家印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2012 年 10 月 第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2012 年 10 月 第一次印刷 印张: 15 1/2

字数: 292 000

定价: 68.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

《纳米科学与技术》丛书编委会

顾 问 韩启德 师昌绪 严东生 张存浩

主 编 白春礼

常务副主编 侯建国

副主编 朱道本 解思深 范守善 林 鹏

编 委 (按姓氏汉语拼音排序)

陈小明 封松林 傅小锋 顾 宁 汲培文 李述汤

李亚栋 梁 伟 梁文平 刘 明 卢秉恒 强伯勤

任咏华 万立骏 王 琛 王中林 薛其坤 薛增泉

姚建年 张先恩 张幼怡 赵宇亮 郑厚植 郑兰荪

周兆英 朱 星

作者简介

王中林博士是佐治亚理工学院终身校董事讲席教授、Hightower 终身讲席教授，中国科学院北京纳米能源与系统研究所(筹)首席科学家。他是中国科学院外籍院士和欧洲科学院院士。王教授荣获了美国显微镜学会 1999 年巴顿奖章，佐治亚理工学院 2000 年和 2005 年杰出研究奖，2001 年 S. T. Li 奖(美国)，2009 年美国陶瓷学会 Purdy 奖，2011 年美国材料研究学会奖章(MRS Medal)，2012 年美国陶瓷学会爱德华·奥尔顿奖。王教授是美国物理学会会士(fellow)，美国科学促进会(AAAS)会士，美国材料研究学会会士，美国显微镜学会会士。王教授在氧化物纳米带与纳米线的合成、表征与基本物理性质的理解，纳米线在能源科学、电子学、光电子学和生物学方面的应用等方面做出了原创性的贡献。他对于纳米发电机的发明及在该领域发展过程中所取得的突破性进展为从环境和生物系统中收集机械能给个人电子器件供电这一思想提供了基本原理和技术路线图。他关于自驱动纳米系统的研究激发了世界学术界和工业界对于微纳系统电源问题的广泛研究，这已成为能源研究与未来传感器网络研究中的特色学科。通过在新型的电子器件和光电子器件中引入压电势控制的电荷传输过程，他开创了压电电子学和压电光电子学学科并引领其发展，这在智能微机电系统或纳机电系统、纳米机器人、人与电子器件的交互界面以及传感器等方面具有重要的应用。王教授的著作已被引用超过 52 000 次，其论文被引用的 h 因子(h -index)是 110。详细信息见主页(<http://www.nanoscience.gatech.edu>)。

《纳米科学与技术》丛书序

在新兴前沿领域的快速发展过程中,及时整理、归纳、出版前沿科学的系统性专著,一直是发达国家在国家层面上推动科学与技术发展的重要手段,是一个国家保持科学技术的领先权和引领作用的重要策略之一。

科学技术的发展和应用,离不开知识的传播:我们从事科学研究,得到了“数据”(论文),这只是“信息”。将相关的大量信息进行整理、分析,使之形成体系并付诸实践,才变成“知识”。信息和知识如果不能交流,就没有用处,所以需要“传播”(出版),这样才能被更多的人“应用”,被更有效地应用,被更准确地应用,知识才能产生更大的社会效益,国家才能在越来越高的水平上发展。所以,数据→信息→知识→传播→应用→效益→发展,这是科学技术推动社会发展的基本流程。其中,知识的传播,无疑具有桥梁的作用。

整个 20 世纪,我国在及时地编辑、归纳、出版各个领域的科学技术前沿的系列专著方面,已经大大地落后于科技发达国家,其中的原因有许多,我认为更主要的是缘于科学文化的习惯不同:中国科学家不习惯去花时间整理和梳理自己所从事的研究领域的知识,将其变成具有系统性的知识结构。所以,很多学科领域的第一本原创性“教科书”,大都来自欧美国家。当然,真正优秀的著作不仅需要花费时间和精力,更重要的是要有自己的学术思想以及对这个学科领域充分把握和高度概括的学术能力。

纳米科技已经成为 21 世纪前沿科学技术的代表领域之一,其对经济和社会发展所产生的潜在影响,已经成为全球关注的焦点。国际纯粹与应用化学联合会(IUPAC)会刊在 2006 年 12 月评论:“现在的发达国家如果不发展纳米科技,今后必将沦为第三世界发展中国家。”因此,世界各国,尤其是科技强国,都将发展纳米科技作为国家战略。

兴起于 20 世纪后期的纳米科技,给我国提供了与科技发达国家同步发展的良好机遇。目前,各国政府都在加大力度出版纳米科技领域的教材、专著以及科普读物。在我国,纳米科技领域尚没有一套能够系统、科学地展现纳米科学技术各个方面前沿进展的系统性专著。因此,国家纳米科学中心与科学出版社共同发起并组织出版《纳米科学与技术》,力求体现本领域出版读物的科学性、准确性和系统性,全面科学地阐述纳米科学技术前沿、基础和应用。本套丛书的出版以高质量、科学性、准确性、系统性、实用性为目标,将涵盖纳米科学技术的所有领域,全面介绍国内外纳米科学技术发展的前沿知识;并长期组织专家撰写、编辑出版下去,为我国

纳米科技各个相关基础学科和技术领域的科技工作者和研究生、本科生等,提供一套重要的参考资料。

这是我们努力实践“科学发展观”思想的一次创新,也是一件利国利民、对国家科学技术发展具有重要意义的大事。感谢科学出版社给我们提供的这个平台,这不仅有助于我国在科研一线工作的高水平科学家逐渐增强归纳、整理和传播知识的主动性(这也是科学研究回馈和服务社会的重要内涵之一),而且有助于培养我国各个领域的人士对前沿科学技术发展的敏感性和兴趣爱好,从而为提高全民科学素养做出贡献。

我谨代表《纳米科学与技术》编委会,感谢为此付出辛勤劳动的作者、编委会委员和出版社的同仁们。

同时希望您,尊贵的读者,如获此书,开卷有益!



中国科学院院长

国家纳米科技指导协调委员会首席科学家

2011年3月于北京

前 言

我的研究组分别在 2007 年和 2010 年引入创立了压电电子学和压电光电子学的基本概念。当具有非中心对称性的纤锌矿结构材料(如氧化锌、氮化镓和氮化铝等)受到外加应力时,由于晶体中离子的极化而在材料内产生压电电势(亦称压电势)。由于压电半导体材料同时具有压电和半导体特性,所以晶体中产生的压电势可显著影响界面/结区的载流子传输。压电电子学器件是利用压电势作为“门”电压调节/控制接触处或结区载流子传输过程的电子器件。压电光电子学器件则利用了压电势来控制载流子的产生、分离、传输和/或复合过程,从而提高诸如光电探测器、太阳能电池和发光二极管等光电器件的性能。压电电子学和压电光电子学器件提供的功能是对传统互补金属-氧化物-半导体(CMOS)技术的补充。压电电子学和压电光电子学器件与硅基技术的有效集成可望在人机接口、纳米机器人的传感和驱动、智能化与个人化的电子签名、智能微纳机电系统、纳米机器人和能源科学等领域提供独特的应用。本书将介绍压电电子学和压电光电子学的基本理论、原理和器件。本书的英文版由施普林格出版社同步出版。

压电电子学已成为目前纳米科学和技术研究的前沿和热点,引起了国际学术界以至企业界的广泛关注。2009 年,美国著名的《麻省理工学院技术综述》(*MIT Technology Review*)期刊把压电电子学评选为十大新兴科技之一。美国材料研究学会 2013 年春天近万人的会议把压电电子学作为一个分会的主题(<http://www.mrs.org/s13-cfp-w/>)。今年秋季香山会议将专题讨论该领域的发展和应用。

在本书中文版出版之际,我要感谢那些对压电电子学和压电光电子学发展做出贡献的我的研究组的成员和合作者,包括(排名不分先后):周军、武文倬、胡又凡、杨青、张岩、刘莹、王旭东、潘曹峰、何志浩、高一凡、温肖楠、韩卫华、周瑜昇、王思泓、吴志明、刘卫华、薛欣宇及其他研究者。同时我也感谢来自下列机构慷慨的财政支持,包括: DARPA、NSF、DOE、NASA、美国空军、NIH、三星、MANA、中国科学院和中国国家留学基金管理委员会。此外,我还要感谢佐治亚理工学院和纳米结构表征中心在设备和基础设施方面提供的支持。

最后也是最重要的,我要感谢我的妻子和女儿们多年来对我的支持和理解。没有她们的支持我不可能完成这些研究。

王中林

美国佐治亚理工学院

中国科学院北京纳米能源与系统研究所(筹)

目 录

《纳米科学与技术》丛书序

前言

第 1 章 压电电子学和压电光电子学导论	1
1.1 以多样性和多功能性超越摩尔定律	1
1.2 人机交互界面	2
1.3 压电电子学和压电光电子学的物理基础:压电势	3
1.4 压电电子学领域的创立	6
1.5 压电电子学效应	6
1.5.1 压电电子学效应对金属-半导体接触的作用	7
1.5.2 压电电子学效应对 p-n 结的作用	10
1.6 压电光电子学效应	11
1.7 适用于压电电子学研究的一维纤锌矿纳米结构	12
1.8 展望	14
参考文献	16
第 2 章 纤锌矿结构半导体材料中的压电势	19
2.1 支配方程	19
2.2 前三阶微扰理论	20
2.3 垂直纳米线的解析解	22
2.4 横向弯曲纳米线的压电势	24
2.5 横向弯曲纳米线的压电电势测量	26
2.6 轴向应变纳米线内的压电势	27
2.7 掺杂半导体纳米线中的平衡电势	30
2.7.1 理论框架	30
2.7.2 考虑掺杂情况时压电势的计算	32
2.7.3 掺杂浓度的影响	36
2.7.4 载流子类型的影响	40
2.8 压电势对局域接触特性的影响	40
2.8.1 理论分析	41
2.8.2 实验验证	43
2.9 电流传输的底端传输模型	45

参考文献	46
第 3 章 压电电子学基本理论	48
3.1 压电电子学晶体管与传统场效应晶体管的比较	48
3.2 压电势对金属-半导体接触的影响	50
3.3 压电势对 p-n 结的影响	51
3.4 压电电子学效应的理论框架	53
3.5 一维简化模型的解析解	54
3.5.1 压电 p-n 结	55
3.5.2 金属-半导体接触	57
3.5.3 金属-纤锌矿结构半导体接触	59
3.6 压电电子学器件的数值模拟	60
3.6.1 压电 p-n 结	60
3.6.2 压电晶体管	63
3.7 总结	66
参考文献	66
第 4 章 压电电子学晶体管	68
4.1 压电电子学应变传感器	68
4.1.1 传感器的制备和测量	68
4.1.2 压电纳米线内应变的计算	70
4.1.3 传感器的机电特性表征	70
4.1.4 应用热电子发射-扩散理论的数据分析	72
4.1.5 压阻和压电效应效果的区分	73
4.1.6 压电电子学效应引起的应变系数剧增	74
4.2 压电二极管	75
4.2.1 压电电子学效应引起的欧姆接触到肖特基接触的转变	76
4.2.2 肖特基势垒变化的定量分析	78
4.2.3 压电电子学二极管工作机制	80
4.2.4 压电电子学机电开关	81
4.3 基于垂直纳米线的压电晶体管	82
4.3.1 反向偏置接触	82
4.3.2 正向偏置接触	84
4.3.3 两端口压电电子学晶体管器件	85
4.4 总结	87
参考文献	87

第 5 章 压电电子学逻辑电路及运算操作	89
5.1 应变门控晶体管	89
5.1.1 器件制备	89
5.1.2 基本原理	92
5.2 应变门控反相器	93
5.3 压电电子学逻辑运算	96
5.3.1 与非门和或非门(NAND 和 NOR)	96
5.3.2 异或门(XOR)	98
5.4 总结	100
参考文献	100
第 6 章 压电电子学机电存储器	103
6.1 器件制备	103
6.2 机电存储器原理	105
6.3 温度对存储器性能的影响	108
6.4 机电存储器中的压电电子学效应	111
6.5 可复写的机电存储器	114
6.6 总结	116
参考文献	116
第 7 章 压电光电子学理论	119
7.1 压电光电子学效应的理论框架	119
7.2 压电光电子学效应对发光二极管的影响	120
7.2.1 压电发光二极管简化模型的解析解	121
7.2.2 压电 p-n 结发光二极管器件的数值模拟	123
7.3 压电光电子学效应对光电传感器的影响	125
7.3.1 正偏肖特基接触的电流密度	126
7.3.2 反偏肖特基接触的电流密度	126
7.3.3 光激发模型	126
7.3.4 压电电荷和压电势方程	127
7.3.5 压电光电子学效应对双肖特基接触结构的影响	128
7.3.6 金属-半导体-金属光电探测器的数值模拟	129
7.4 压电光电子学效应对太阳能电池的影响	131
7.4.1 基本方程	132
7.4.2 基于 p-n 结的压电太阳能电池	133
7.4.3 金属-半导体肖特基接触型太阳能电池	138
7.5 总结	139

参考文献	140
第 8 章 压电光电子学效应在光电池中的应用	142
8.1 金属-半导体接触光电池	142
8.1.1 实验方法	142
8.1.2 基本原理	143
8.1.3 光电池输出的优化	145
8.1.4 理论模型	147
8.2 p-n 异质结太阳能电池	149
8.2.1 压电势对太阳能电池输出的影响	150
8.2.2 压电电子学模型	153
8.3 增强型硫化亚铜(Cu ₂ S)/硫化镉(CdS)同轴纳米线太阳能电池	154
8.3.1 光伏器件设计	155
8.3.2 压电光电子学效应对输出的影响	158
8.3.3 理论模型	160
8.4 异质结核壳纳米线的太阳能转换效率	162
8.5 总结	165
参考文献	166
第 9 章 压电光电子学效应在光电探测器中的应用	168
9.1 测量系统设计	168
9.2 紫外光传感器的表征	169
9.3 压电光电子学效应对紫外光灵敏度的影响	171
9.3.1 实验结果	171
9.3.2 物理模型	173
9.4 压电光电子学效应对可见光探测器灵敏度的影响	177
9.4.1 实验结果及与计算结果的比较	177
9.4.2 压阻效应的影响	179
9.4.3 串联电阻的影响	179
9.5 压电光电子学光电探测的评价标准	180
9.6 总结	180
参考文献	181
第 10 章 压电光电子学效应对发光二极管的影响	182
10.1 发光二极管的制备和测量方法	182
10.2 发光二极管的表征	184
10.3 压电效应对发光二极管效率的影响	185
10.4 压电极化方向的效应	187

10.5	注入电流与施加应变之间的关系	188
10.6	发光光谱和激发过程	188
10.6.1	异质结能带图	188
10.6.2	受应变发光二极管的发光光谱	189
10.7	压电光电子学效应对发光二极管的影响	190
10.7.1	基本物理过程	190
10.7.2	应变对异质结能带的影响	192
10.8	应变对光偏振的影响	195
10.9	p型氮化镓薄膜的电致发光特性	198
10.9.1	压电光电子学效应对发光二极管的影响	199
10.9.2	理论模型	201
10.9.3	发光特性分析	202
10.10	总结	205
	参考文献	206
第 11 章	压电光电子学效应在电化学过程和能源存储中的应用	208
11.1	光电化学过程的基本原理	208
11.2	压电势对光电化学过程的影响	209
11.3	光电化学太阳能电池	210
11.3.1	电池设计	210
11.3.2	压电光电子学效应对光电化学过程的影响	211
11.4	压电势对机械能到电化学能量转化过程的影响	212
11.4.1	自充电功率源器件的工作原理	212
11.4.2	自充电功率源器件的设计	215
11.4.3	自充电功率源器件的性能	217
11.5	总结	219
	参考文献	220
附录		221
附录 1	王中林小组 2006~2012 年间发表的有关纳米发电机、压电 电子学和压电光电子学方面的文章	221
附录 2	缩写词	230

第 1 章 压电电子学和压电光电子学导论

1.1 以多样性和多功能性超越摩尔定律

过去几十年来,摩尔定律作为半导体技术的路线图一直在成功地指引和驱动着信息科技的发展。随着单个硅芯片上的器件密度每十八个月就增加一倍,提升 CPU 速度以及集成片上系统功能成为 IT 技术的主要发展方向。然而随着微电子工艺的不断进步,当器件中的最小线宽尺度趋近 10 nm 时,人们不禁会问,在维持大规模工业化生产的前提下,器件还能做得多小?如此之小的器件尺寸对于器件的稳定性和可靠性有哪些利弊和影响?晶体管的运算速度是否还能作为我们所追求的衡量判断器件性能优异的唯一驱动性指标?随着晶体管等器件的尺寸趋近物理极限,终究有一天摩尔定律会遇到瓶颈甚至失效,这只是个时间的问题。那么,问题的关键是我们如何才能超越摩尔定律的局限?

传感器网络和个性化医疗服务预计将成为近期产业界的主要驱动力。正如我们在当前的电子产品中所观察到的,电子设备正朝着个人电子产品、便携式电子设备和有机柔性电子器件等方向不断发展。人们正在探索具备功能集成化和多样化的电子设备。以手机为例,在手机中添置运算处理速度超快的处理器也许不会成为将来市场的主流推动力。相比之下,消费者更关心产品是否具备更多的功能,比如在手机中集成用于监测血压、体温和血糖浓度的医护传感器,或者是与环境接口检测气体、紫外线和有害化学物质的传感器。如图 1.1 中横轴所示,在这种情况下,信息科技将沿着新的方向发展以满足后摩尔定律时代对于个人和便携式电子设备多样性和多功能性的需求。更快的运算速度和更多样化的集成功能之间的有机结合与协调发展将会是未来电子技术发展的趋势。通过将多功能传感系统和自供能技术紧密结合,电子技术应用正在朝着实现个人化、便携化和基于聚合物(有机柔性电子材料)的电子器件等方向发展,以期在不远的将来实现电子器件系统与人体自身或者人所处的环境直接交互作用的目标。中央处理器的运算处理速度、存储器的容量和逻辑单元的功能性之间的有机结合与发展将推动智能化系统和自供能系统的发展和实现,这将成为电子技术发展的重要技术路线。

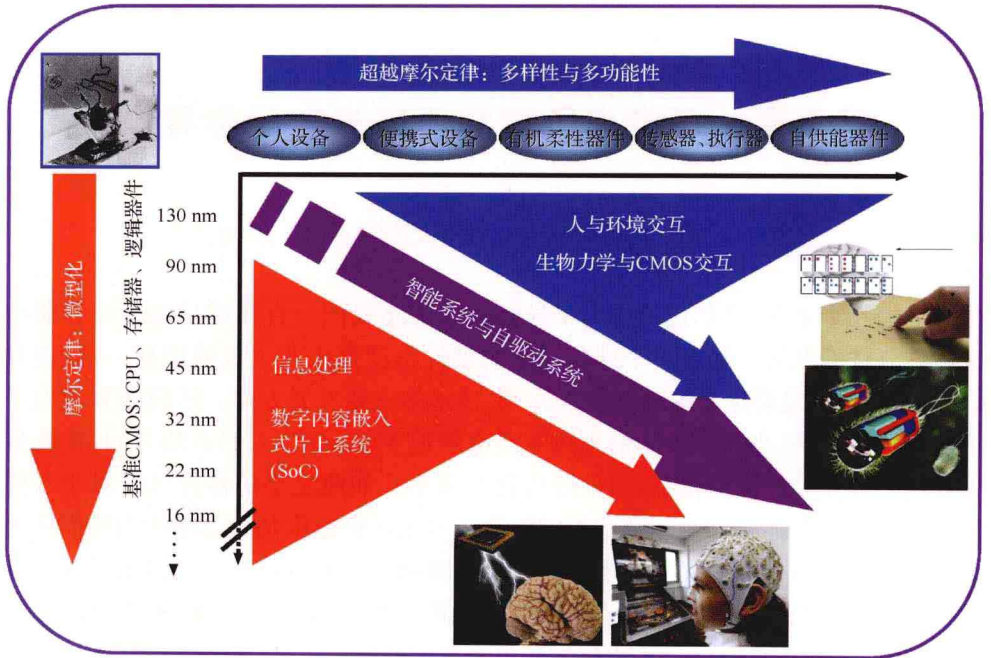


图 1.1 后摩尔定律时代的电子学发展展望。竖轴方向代表延续摩尔定律的电子学发展。随着器件的小型化，器件密度、中央处理器(CPU)速度和存储器的容量得到不断地提升。横轴代表后摩尔定律时代个人和便携式电子设备的多样性和多功能性。未来电子学的发展需要将中央处理器的速度和器件的功能多样性有机集成。预计通过压电电子学器件将机械激励信号集成到电子系统中将是未来人与 CMOS 接口技术的重要方面

1.2 人机交互界面

当人与电子器件通过接口设备连接进行交互时，不可避免地需要考虑人的动作以及由人体的动作产生的相关信号和电子器件间的交互作用。人体产生的这些信号大多是机械运动信号，也有少部分是电信号。过去几十年里对神经系统中电信号传输的研究已经取得显著的进展。在应用硅基场效应晶体管探测神经元细胞电信号等技术领域也已经获得诸多成果。然而如果没有革新性的设计和方法，现有的硅工艺器件很难直接与机械信号交互作用。传统上最为常见的方法是利用传感器来探测机械应变的变化。传感器中由应变引起的信号变化可以被传统电子设备监测和记录，这是一个被动式的监测过程，并且这些由机械应变产生的信号不能被用来进一步控制硅电子器件。目前柔性电子学的研究重点之一是致力于减少或者消除基底的机械应变对集成于基底上的电子器件性能的影响，因此可以称之为

被动式柔性电子学。另一方面,也可以利用基底形变引入的机械应变所产生的电信号来直接控制硅基电子器件。为了实现这类机械应变和电子器件之间的直接交互功能,需要一个“中介传递器件”或“信号转译器”将生物机械运动与硅基电子器件关联起来。压电电子学与压电光电子学的发明和研究就是为了实现上述目的和应用。与传统的柔性电子学器件不同的是,压电电子学与压电光电子学器件是主动式的柔性电子学器件(active flexible electronics)和生物信号(衍生)驱动的电子学器件(bio-driven electronics),这类器件可以利用机械信号来直接产生数字控制信号。

压电电子学器件在未来电子系统中扮演的角色类似生理学中的机械感受器^[1]。机械感受(mechanosensation)是一种感受机械刺激的生理响应机制。触觉、听觉、身体平衡感知和痛觉的生理学基础是将机械刺激转换为神经信号;前者是机械激励而后者是电信号激发。皮肤中的机械应激感受器对触觉的产生具有重要的作用,内耳的微小神经细胞(一种机械应激感受器)则负责听觉和身体的平衡能力。

1.3 压电电子学和压电光电子学的物理基础:压电势

压电效应是材料在所受应力改变时产生电势差的效应,对于这一效应的认识和研究可以追溯到几个世纪前。最常见的压电材料是具有钙钛矿结构的锆钛酸铅(PZT)[$\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$]。锆钛酸铅被广泛应用于机电传感器、执行器和能量采集设备。然而锆钛酸铅是绝缘体,因此不适合电学器件应用。传统意义上,对于压电材料和压电效应的研究主要局限于陶瓷材料领域。另一方面,纤锌矿结构材料[如氧化锌(ZnO)、氮化镓(GaN)、氮化铟(InN)和硫化锌(ZnS)等]也具有压电性质,但是由于这些材料的压电系数相对较小,因此在压电传感和执行驱动等方面的应用不如锆钛酸铅那么普遍和广泛。由于这些纤锌矿结构半导体材料具有半导体和光激发等性质,所以一直以来对于它们的研究主要集中在电子学和光学领域。

硅基 CMOS 器件是通过外加电场驱动器件中载流子传输过程来实现操作的。为了能够利用机械信号来直接调控硅基 CMOS 器件的工作,我们需要将机械信号转换成电信号。最自然的选择是利用压电效应。为了实现上述目的,我们选择同时具有压电性质和半导体性质的纤锌矿结构半导体材料,如氧化锌(ZnO)、氮化镓(GaN)、氮化铟(InN)和硫化锌(ZnS)等。以氧化锌为例,氧化锌具有非中心对称的晶体结构,在受到外加应力作用下将自然表现出压电效应。纤锌矿结构晶体具有六角结构,在 c 轴方向和垂直于 c 轴的方向存在明显的各项异性。简单地讲, Zn^{2+} 阳离子与相邻的 O^{2-} 阴离子组成以阳离子为中心的正四面体结构。在没有外应力作用时,阳离子和阴离子的电荷中心互相重合。如图 1.2(a)所示,当应力施

加在正四面体的顶点时,阳离子和阴离子的电荷中心会发生相对位移并产生一个偶极矩。晶体中所有单元产生的偶极矩叠加后会在宏观上产生沿应力方向的电势分布。这就是压电电势(亦称压电势, piezopotential)[图 1.2(b)]^[2]。当施加机械形变时,具有压电性质的材料内产生的压电电势可以驱动外电路负载中的电子流动,这就是纳米发电机的基本原理^[3,4,5,6]。

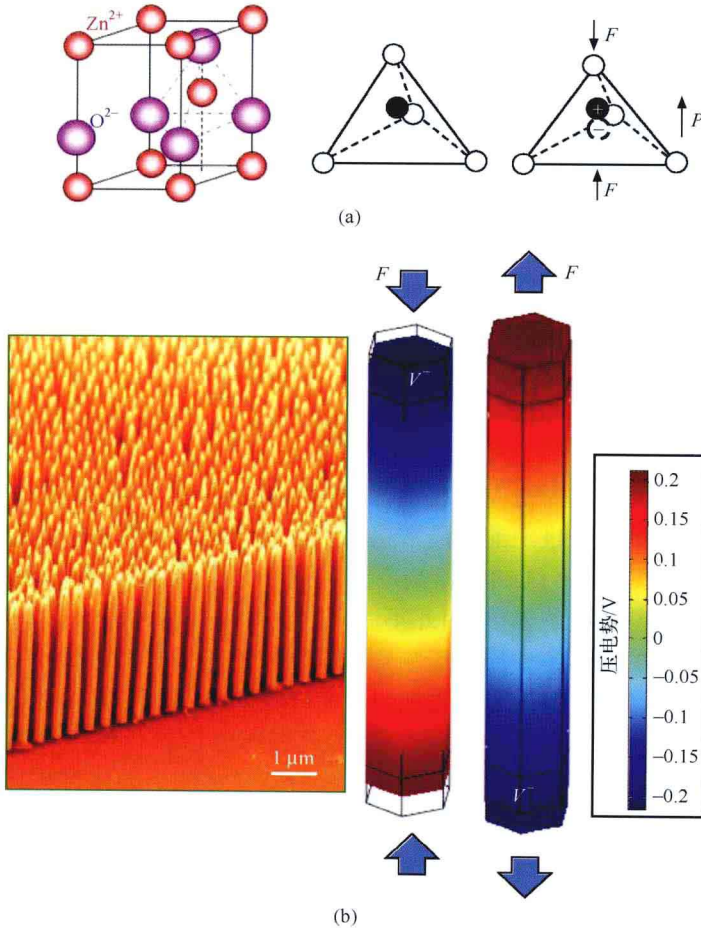


图 1.2 纤锌矿晶体中的压电势分布。(a) 纤锌矿结构氧化锌晶体的原子结构模型。(b) 溶液法合成的竖直氧化锌纳米线阵列。受轴向应变的氧化锌纳米线内压电势分布的数值计算结果。纳米线生长沿 c 轴方向,纳米线长度为 600 nm,边长为 25 nm;外力 $F=80$ nN

当不考虑氧化锌材料中的掺杂时,沿 c 轴生长的氧化锌纳米线受外应力作用时的压电势分布可以利用 Lippman 理论计算得到^[7,8,9]。例如,对一根沿 $+c$ 方向