材料、结构及工艺

DOI：10.16818/j.issn1001－5868.2021110503

考虑尺度效应的压电半导体纳米纤维力电耦合特性

王　蕾[1]，秦国帅[2*]

（1. 河南省计量科学研究院，郑州 450018；2. 郑州大学 力学与安全工程学院，郑州 450001）

摘　要： 文章基于挠曲电和应变梯度效应的共同影响，建立了静拉伸下一维压电半导体力电耦合计算模型，数值分析了挠曲电和应变梯度效应对位移、电势、电位移、载流子分布等物理场的影响。结果表明：两种效应对机械位移场没有影响，但对各电相关物理场的分布影响显著；挠曲电效应对压电结构本身的压电性能有抑制作用，而应变梯度效应却增强了其压电特性。本研究为压电类微纳结构的机电特性分析提供了理论指导。

关键词： 压电半导体纳米纤维；挠曲电效应；应变梯度效应；力电性能；计算模型

中图分类号： TN304.9　**文章编号：** 1001－5868(2022)02－0363－06

Electro-Mechanical Coupling Properties of Piezoelectric Semiconductor Nanofibers Considering Scale Effect

WANG Lei[1]，QIN Guoshuai[2]

（1. Henan Institute of Metrology，Zhengzhou 450018，CHN；
2. School of Mechanics and Safety Engineering，Zhengzhou University，Zhengzhou 450001，CHN）

Abstract： By utilizing a developed electromechanical coupling model considering the coupled flexoelectric and strain gradient effect，the dimension-dependent physical fields such as displacement，electric potential，electric displacement and carrier distribution were systematically investigated. It is shown that the flexoelectricity and strain gradient have a significant influence on the electrical related physical fields，but less effect on the mechanical displacement. Furthermore，in contrast to the strain gradient enhancing effect，the piezoelectric properties of micro-nano structures are suppressed by flexoelectricity. This study provides a theoretical guidance for analysis of the electromechanical characteristics of piezoelectric micro-nanostructures.

Key words： piezoelectric semiconductor nanofibers；flexoelectric effect；strain gradient effect；electro-mechanical properties；computational model

0　引言

压电半导体是一种兼具压电性质的先进半导体材料，在人工智能、可穿戴器件、微机电系统、新能源、智能传感器等领域应用广泛[1-4]。与传统材料不同，在外力作用下，压电半导体晶体中产生的压电电势可显著影响器件电流传输[5]。其卓越的多场耦合性能已引起学者们的广泛研究和关注，并据此提出了一些原创性和革命性的概念[6-9]。

随着微纳技术的进步，智能构件正朝着小尺度、自供电、智能化的方向发展。在压电半导体研究领域，研究者们已经制备出了纳米纤维、纳米环、纳米带等一维纳米材料[10-11]，并发展成为微纳电子元件中重要的结构形式。然而，当构件几何尺寸接近于自身微结构时，其材料本身特性与宏观尺度有明显不同，即呈现出很强的尺寸依赖性。对于微纳尺度

收稿日期：2021－11－05.

基金项目：国家自然科学基金项目(12002316)；河南省科技攻关计划项目(192102210012).

* **通信作者：**秦国帅　**E-mail：** qinguoshuai@zzu.edu.cn

下的压电构件，在机械载荷作用下，除压电效应外，还存在一种特殊的力电耦合效应，即挠曲电效应，该效应随着尺度的减小急剧增强。在一维压电半导体构件服役过程中，轴向拉伸是其最基本的受载形式。目前，关于微纳结构在受拉作用下的研究基本是基于连续介质力学理论模型，例如 Zhang 等[12]应用简化的压电半导体一维方程，得到了 n 型 ZnO 纳米线在轴向拉伸情况下电相关物理场的解析解；Chen 等[13]计算了一种半导体复合纤维在拉伸条件下移动电荷的重新分布；Wang 等[14]研究了简谐力驱动下的伸缩振动，发现周期运动下产生的有效极化电荷对压电效应起到削弱作用；Yang 等[15]采用摄动方法，得到了一类压电半导体纳米线二阶和三阶问题的非线性解。可以看到，研究人员对于一维压电半导体在机械载荷作用下的力电特性开展了许多深刻细致的分析工作，但绝大部分研究是基于传统连续统力学模型的线性化分析，理论中不含任何与尺度相关的参量。然而，在微纳尺度下，应变梯度效应相比于宏观尺度显著增大，且与尺寸密切相关。因此，发展含有尺寸参量的连续统理论模型，来进一步解释压电微纳构件的力电耦合特性对尺寸的依赖性十分必要。

基于上述背景，本文综合考虑了挠曲电效应和应变梯度效应的共同影响，对一维压电半导体纳米线在受拉载荷作用下的力电特性进行了分析，系统研究了构件内部的压电效应、应变梯度效应和挠曲电效应间的相互影响和内在关联，为该类材料的性能研究和工程应用提供指导。

1 考虑挠曲电与应变梯度效应的压电半导体一维计算模型

受拉变形是最为常见的受力形式，对于受拉伸的细长杆，可采用一维模型，考虑如图 1 所示压电半导体纤维杆，两端受轴向拉伸。本文以 GaN 压电半导体为研究对象，其本身为 n 型半导体，根据力平衡方程、挠曲电及应变梯度理论、静电高斯方程和电荷守恒方程，一维 n 型压电半导体平衡方程可表示为[12,16-17]

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_z}{\mathrm{d}z}-\frac{\mathrm{d}^2\tau_z}{\mathrm{d}z^2}=0$$

$$\frac{\mathrm{d}D_z}{\mathrm{d}z}=q(n_0-n)$$

$$\frac{\mathrm{d}J_z}{\mathrm{d}z}=0 \tag{1}$$

其中，σ 表示应力，τ 表示高阶应力项，D 为电位移，J_z 表示电子电流密度。n 为半导体电子浓度，n_0 表示初始电子浓度，q 为元电荷（$q=1.602\times10^{-19}$ C）。

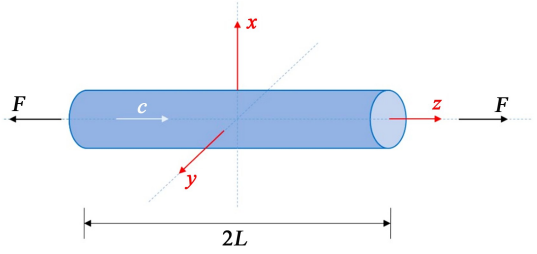


图 1 两端受拉作用下的压电半导体纳米纤维示意图

连续统理论认为，应力仅由应变所决定，而在应变梯度理论中，等效应力（$\hat{\sigma}$）同时还受到应变梯度的影响（应变梯度效应），其形式为[12]

$$\hat{\sigma}=\sigma_z-\frac{\mathrm{d}\tau_z}{\mathrm{d}z} \tag{2}$$

在一维应变梯度理论中，应变梯度通过 $c_{33}g^2\frac{\mathrm{d}\tau_z}{\mathrm{d}z^2}$ 项对高阶应力产生影响，其中，c_{33} 是弹性系数，g 为与材料特征尺寸有关的内禀尺度参数。

对于一维结构，由于挠曲电效应的存在，应变梯度可以引起电极化：

$$P_z=f_3\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2} \tag{3}$$

其中，P_z 为电极化强度，f_3 代表挠曲电系数。

结合挠曲电和应变梯度理论，n 型一维 GaN 纤维本构方程可用以下形式表示[12,18-19]：

$$\begin{aligned}
\sigma_z&=c_{33}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}+e_{33}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}\\
\tau_z&=c_{33}g^2\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+f_3\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}\\
D_z&=e_{33}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}-\kappa_{33}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}+P_z\\
J_z&=-qn\mu_{33}^n\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}+qd_{33}^n\frac{\mathrm{d}\Delta n}{\mathrm{d}z}
\end{aligned} \tag{4}$$

其中，u 和 φ 表示模型内沿 z 轴方向的位移和电势。e_{ij} 为压电系数，κ_{ij} 为介电系数。μ_{ij}^n 和 d_{ij}^n 分别表示 n 型半导体的电子扩散系数和迁移系数。$f_3\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}$ 代表挠曲电对高阶应力的影响项。

对于非简并半导体，电子迁移系数和扩散系数间存在以下关系[18]：

$$d^n = V_{\mathrm{th}}\mu^n \tag{5}$$

其中，$V_{\mathrm{th}}=k_{\mathrm{B}}T_0/q$，表示热复合速率，$T_0$ 表示绝对温度，k_{B} 为玻尔兹曼常数。

对于如图 1 所示的一维模型，其力电边界条件为

$$\hat{\sigma}(\pm L)=\frac{F}{A},\tau_z(\pm L)=0,D_z(\pm L)=0,$$
$$J_z(\pm L)=0 \tag{6}$$

另外，纳米纤维整体呈电中性，满足全局电中性条件：

$$\int_{-L}^{L}\Delta n\,\mathrm{d}z=0 \tag{7}$$

由于上述非线性问题的复杂性，解析求解挑战巨大。本文利用 COMSOL 多物理场软件，将本构方程(4)作为 PDE 模块的向量场代入平衡方程(1)，基于各边界条件数值求解一维压电半导体纳米线在拉伸载荷下的力电耦合问题，同时研究挠曲电效应和应变梯度的影响。

2　结果与讨论

本节基于上述一维计算模型，分析受拉情况下考虑挠曲电与应变梯度效应的一维 GaN 纤维内部位移、电势与载流子浓度等物理场分布，并与不考虑两个效应的传统压电理论结果进行对比，深入研究了挠曲电系数和内禀尺度参数对受拉情况下纳米纤维内部电势分布的影响。

假设如图 1 所示的 GaN 压电半导体纳米纤维长度 $2L=1.2\ \mu\mathrm{m}$，初始电子浓度为 $n_0=10^{21}\ \mathrm{m}^{-3}$，纳米纤维两端受到的拉力 $F=8.5\ \mathrm{nN}$。本文中使用的 GaN 的材料参数如表 1 所示[19]。

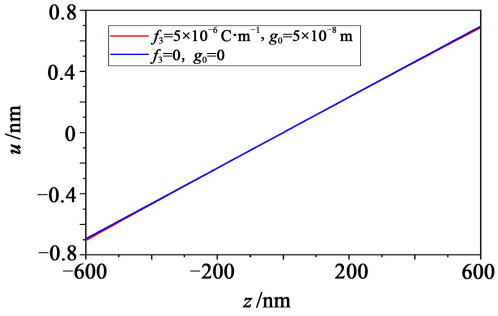
现有文献中关于 GaN 挠曲电问题少有研究，本文参考铁电/压电材料的挠曲电系数[20-21]和内禀尺度参数[22-23]进行研究，将 GaN 压电半导体挠曲电系数取值范围定为 $5\times10^{-8}\sim5\times10^{-5}\ \mathrm{C/m}$，内禀尺度参数取值为 $5\times10^{-9}\sim5\times10^{-6}\ \mathrm{m}$。

表 1　GaN 的材料参数[19]

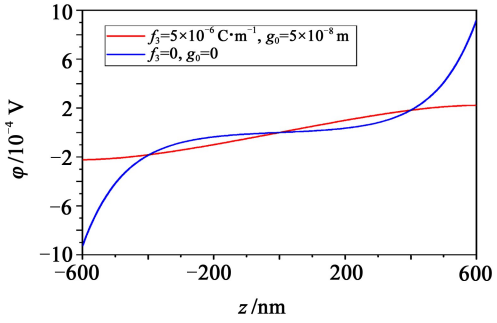
弹性系数/GPa	压电系数/($\mathrm{C\cdot m^{-2}}$)	介电系数/($\mathrm{C\cdot V^{-1}\cdot m^{-1}}$)	电子迁移系数/($\mathrm{m^2\cdot V^{-1}\cdot s^{-1}}$)	电子扩散系数/($\mathrm{m^2\cdot s^{-1}}$)
$c_{11}=293.7$	$e_{15}=-0.31$	$\kappa_{11}=9.6\kappa_0$	$\mu^n_{11}=0.096\,2$	$d^n_{11}=2.5\times10^{-3}$
$c_{12}=124.1$	$e_{31}=-0.52$	$\kappa_{33}=10.6\kappa_0$	$\mu^n_{33}=0.096\,2$	$d^n_{33}=5\times10^{-3}$
$c_{13}=158.5$	$e_{33}=0.61$			
$c_{33}=282.0$				
$c_{44}=22.3$				

为确定两类与尺寸相关的效应对 GaN 纳米线内各物理场是否产生影响，本文取挠曲电系数 $f_3=5\times10^{-6}\ \mathrm{C/m}$ 和内禀尺度参数 $g_0=5\times10^{-8}\ \mathrm{m}$，与传统压电半导体连续介质理论结果进行对比分析。由图 2(a)可以看出，在相同力载荷作用下，两类效应对 GaN 纳米线轴向位移没有影响。由图 2(b)可知，挠曲电和应变梯度效应压电半导体纳米纤维靠近两端的电势显著影响，对远离两端部的区域则影响较小，这是由于在靠近端部纳米纤维形变量较大的缘故，与压电效应的影响类似。然而，在考虑两类效应时纳米纤维两端的电势相对于不考虑两类效应时却明显减小(见图 2(b)中红线)，而材料内部压电效应的机制始终没变，因此，可以认为，对于含有压电特性的纳米纤维结构，挠曲电和应变梯度效应对原本的压电效应会产生重大影响，在该类结构分析中若舍弃两种效应的影响，很可能会偏离该结构的物理力学本质。

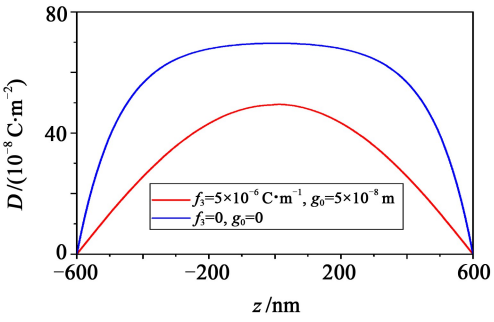
同样地，两种效应对纳米纤维中间部分的电位移起到一定的抑制作用，见图 2(c)。以上充分表明了在一维压电微纳结构分析中考虑两种物理效应的必要性。对于压电半导体结构，外力作用会使结构产生电极化，与极化相关的电场驱动载流子(自由电子)运动使其重新分布，见图2(d)。在外力作用下压



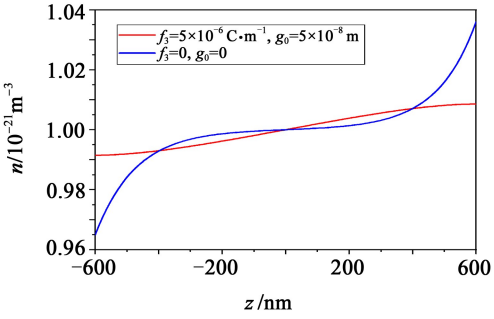
(a)　位移



(b)　电势



(c) 电位移



(d) 载流子分布

图 2 考虑和不考虑挠曲电与应变梯度作用下纳米纤维的参数

电极化电荷向纳米纤维两端聚集，使得端部载流子浓度明显增大(图 2(d)中蓝线)。然而，当采用考虑挠曲电和应变梯度效应的本构关系重新计算时，两端载流子浓度明显降低，中间部分则变化不大，说明在轴向受拉作用下挠曲电和应变梯度效应对载流子的分布影响与压电效应相反。该结果表明：对于一维 GaN 压电半导体纳米纤维结构，在外力作用下若不考虑挠曲电和应变梯度效应，载流子浓度分布计算将明显失真，这将对该结构的性能分析和器件设计产生严重影响。

挠曲电效应和应变梯度具备明显的尺寸效应，随着几何特征的减小，其影响会显著增大。为验证这一特性，本文在 $f_3=5\times10^{-6}$ C/m，$g_0=5\times10^{-8}$ m 不变的情况下，通过增加纳米纤维模型长度 L 和半径(保持纳米纤维正应力为定值)研究纳米纤维内最大电位移 $D_{z\max}$ 相对于纳米纤维几何尺寸的变化来确定其尺寸效应。由图 3 可以看出，纳米纤维模型的几何尺寸大到一定程度后，尺寸效应的影响将不再明显，但是在临界值以内时，随着尺寸的减小，$D_{\max}/D_{0\max}$ 会显著减小($D_{0\max}$ 为不考虑两类效应时纳米纤维沿轴向分布的电位移最大值)，显然，压电半导体纳米纤维越小，尺寸效应将越明显。

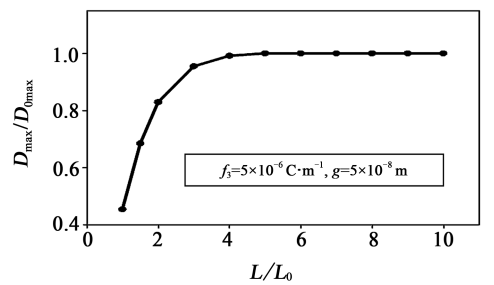
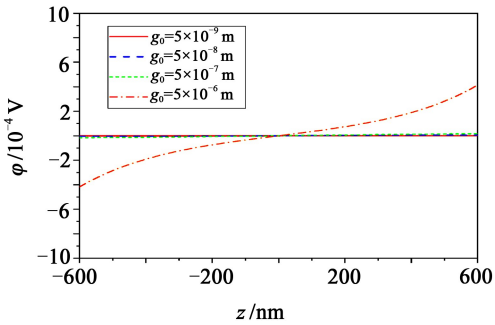
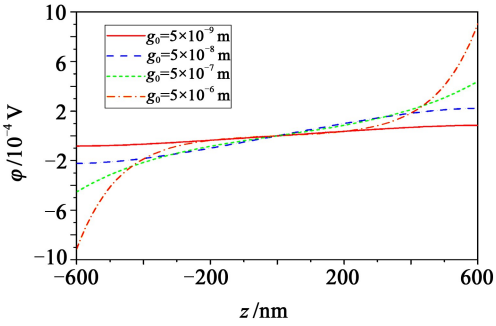


图 3 纳米纤维模型的尺寸效应

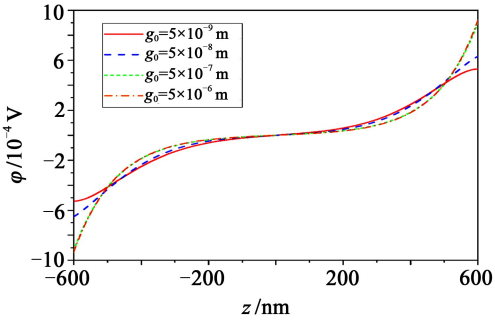
为明晰挠曲电与应变梯度效应在一维微纳结构中的作用，特别是压电半导体中挠曲电效应与压电效应间的关系，在沿轴向拉力 $F=8.5$ nN 的条件下，分别取挠曲电系数 f_3 为 5×10^{-5}，5×10^{-6}，5×10^{-7} 和 5×10^{-8} C/m，对比不同内禀尺度参数 g_0 为 5×10^{-6}，5×10^{-7}，5×10^{-8} 和 5×10^{-9} m 情况下电势的分布，计算结果如图 4 所示。可以看到，挠曲电效应主要影响一维纳米线靠近两端边界处的电势，对中间部分影响较小；在同样力载荷下，电势随



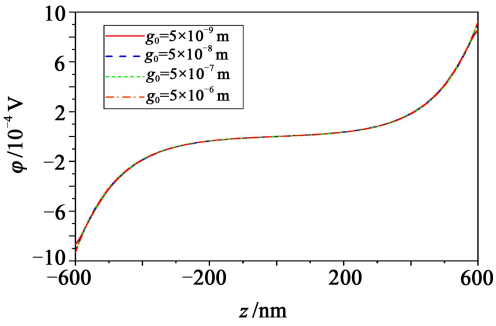
(a) $f_3=5\times10^{-5}$ C/m



(b) $f_3=5\times10^{-6}$ C/m



(c) $f_3=5\times10^{-7}$ C/m

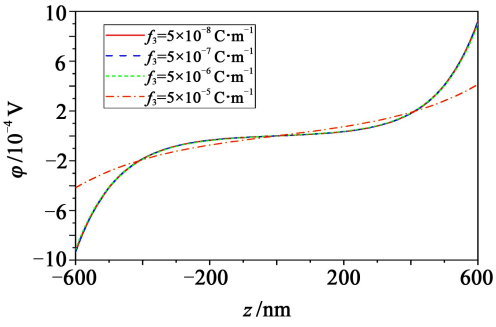


(d)　$f_3=5\times10^{-8}$ C/m

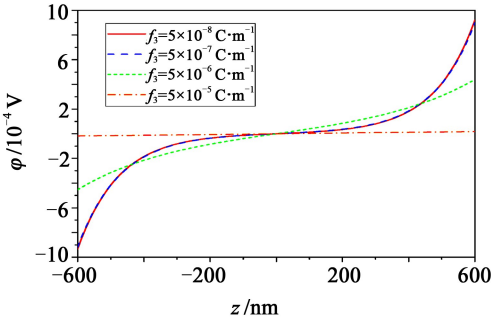
图 4　不同挠曲电系数 f_3 在不同内禀尺度参数下 GaN 纳米纤维内部电势分布

着挠曲电系数的增加而变大，说明挠曲电效应正比于挠曲电系数；另外，随着挠曲电系数的减小，内禀尺度参数对纳米纤维内部电势分布的影响急剧降低，当挠曲电系数 $f_3=5\times10^{-8}$ C/m 时，见图 4(d)，内禀尺度参数对电势分布将不再产生影响，而当挠曲电系数为某一定值时，纳米纤维内部电势随内禀尺度参数的增大而增大，由结果可以判定，应变梯度效应对纳米纤维内部的压电效应起增强作用。

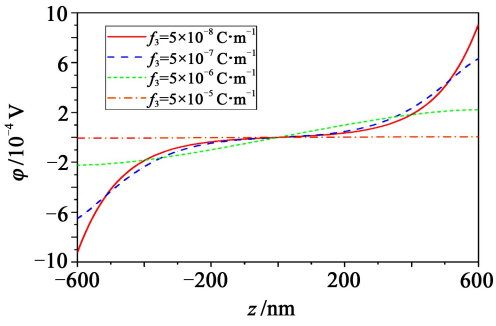
同理，为明确应变梯度效应对压电纳米纤维的电势分布的影响，我们在保持材料参数不变的情况下，基于不同内禀尺度参数 g_0 分别为 5×10^{-6}，5×10^{-7}，5×10^{-8} 和 5×10^{-9} m 时，研究不同挠曲电系数对压电半导体纳米纤维内电势的影响。从图 5 可以看出，在相同内禀尺度参数下，挠曲电系数越大，



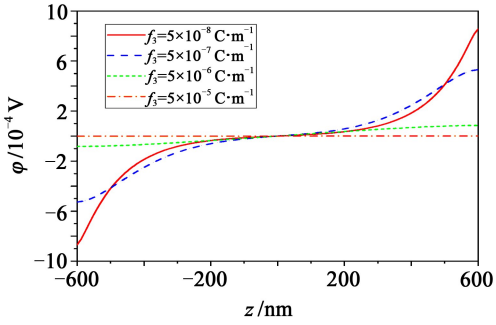
(a)　$g_0=5\times10^{-6}$ m



(b)　$g_0=5\times10^{-7}$ m



(c)　$g_0=5\times10^{-8}$ m



(d)　$g_0=5\times10^{-9}$ m

图 5　不同内禀尺度参数 g_0 在不同挠曲电系数下 GaN 纳米纤维内部电势分布

GaN 压电半导体纳米纤维两端电势差越小。因此，可以确定，挠曲电效应对一维压电半导体纳米纤维的压电效应起削弱作用；在同样力载荷下，两端电势随内禀尺度参数的降低而降低，表明应变梯度效应对其本身的压电效应影响一致。

综合图 4、图 5 结果可知，挠曲电效应与应变梯度效应对一维压电半导体纳米纤维本身的压电效应均存在关联。当内禀尺度参数的数量级大于挠曲电系数时，两类效应对压电效应的影响并不明显，其结果接近于不考虑两种效应时的数值，而当挠曲电系数的数量级大于内禀尺度参数时，挠曲电效应对压电效应的削弱才较为显著。

3　结论

本文建立了受拉情况下考虑挠曲电与应变梯度效应的压电半导体一维非线性耦合力学模型，基于该模型，对一维 GaN 压电半导体纳米纤维受轴向拉力作用下的各物理场分布进行了数值计算。结果表明，在拉伸情况下挠曲电与应变梯度效应对轴向位移不产生影响，但对电势、电位移、载流子分布等各电相关物理场影响显著，因此，在一维压电类纳米纤维结构分析中，必须对挠曲电和应变梯度效应予以充分考虑。另外，挠曲电和应变梯度效应都具备明

显的尺寸效应，随着几何尺寸的降低，其影响显著增大。对于一维压电半导体纳米纤维结构，挠曲电效应对其本身的压电性能起到抑制作用，而应变梯度效应增强了其压电性能。本文研究结果为微纳尺度下的一维压电半导体结构设计及性能分析提供了理论基础。

参考文献：

[1] Yang J S, Zhou H G. Amplification of acoustic waves in piezoelectric semiconductor plates[J]. Inter. J. of Solids & Structures, 2005, 42(11/12): 3171-3183.

[2] Rees G J. Strained layer piezoelectric semiconductor devices [J]. Microelectronics J., 1997, 28(8/10): 957-967.

[3] Withers R S. Electron devices on piezoelectric semiconductors: A device model[J]. IEEE Trans. on Sonics & Ultrasonics, 1984, 31(2):117-122.

[4] Erturk A, Inman D J. Issues in mathematical modeling of piezoelectric energy harvesters [J]. Smart Materials and Structures, 2008, 17(6): 65016.

[5] Wu W, Wang Z L. Piezotronics and piezo-phototronics for adaptive electronics and optoelectronics [J]. Nat. Rev. Mater., 2016, 24(34): 23-24.

[6] Wen X N, Wu W Z, Pan C F, et al. Development and progress in piezotronics[J]. Nano Energy, 2015, 14: 276-295.

[7] Liu Y, Zhang Y, Yang Q, et al. Fundamental theories of piezotronics and piezo-phototronics[J]. Nano Energy, 2015, 14: 257-275.

[8] 谢建宏，张为公. 智能材料结构的研究与发展[J]. 传感技术学报，2004，17(1)：164-167.
Xie Jianhong, Zhang Weigong. Research and development of smart material and structure[J]. Chinese J. of Sensors and Actuators, 2004, 17(1): 164-167.

[9] 董耀文，秦海鸿，付大丰，等. 宽禁带器件在电动汽车中的研究和应用[J]. 电源学报，2016，14(4)：119-127.
Dong Yaowen, Qin Haihong, Fu Dafeng, et al. Research and application of wide bandgap devices in electric vehicles[J]. J. of Power Supply, 2016, 14(4): 119-127.

[10] Pan Z W, Dai Z R, Wang Z L. Nanobelts of semiconducting oxides[J]. Science, 2001, 291(5510): 1947-1949.

[11] Gao P X, Ding Y, Mai W, et al. Conversion of zinc oxide nanobelts into superlattice-structured nano helices [J]. Science, 2010, 309(5741): 1700-1704.

[12] Zhang C L, Wang X Y, Chen W Q, et al. An analysis of the extension of a ZnO piezoelectric semiconductor nanofiber under an axial force[J]. Smart Materials and Structures, 2017, 26(2): 025030.

[13] Cheng R, Zhang C L, Chen W Q, et al. Piezotronic effects in the extension of a composite fiber of piezoelectric dielectrics and nonpiezoelectric semiconductors[J]. J. of Appl. Phys., 2018, 124(6): 064506.

[14] Wang G L, Liu J X, Liu X L, et al, Extensional vibration characteristics and screening of polarization charges in a ZnO piezoelectric semiconductor nano-fiber [J]. J. of Appl. Phys., 2018, 124: 094502.

[15] Yang G, Du J, Wang J, et al. Extension of a piezoelectric semiconductor fiber with consideration of electrical nonlinearity[J]. Acta Mechanica, 2018, 229: 4663-4676.

[16] White D L. Amplification of ultrasonic waves in piezoelectric semiconductors[J]. J. of Appl. Phys., 1963, 63(1): 199-200.

[17] Deng F, Deng Q, Shen S P. A three-dimensional mixed finite element for flexoelectricity [J]. J. of Appl. Mechanics: Trans. of the ASME, 2018, 85: 031009.

[18] Sze S M, Ng K K. Physics of Semiconductor Devices[M]. New York: Wiley, 2006.

[19] Qin G S, Ma S J, Lu C S, et al, Influence of electric field and current on the strength of depoled GaN piezoelectric semiconductive ceramics[J]. Ceramics International, 2018, 44: 4169-4175.

[20] Tagantsev A K. Theory of flexoelectric effects in crystals [J]. Zhurnal Eksperimental'noii Teroreticheskoi Fiziki, 1985, 88: 2108-2122.

[21] Zhou W, Chen P, Chu B. Flexoelectricity in ferroelectric materials[J]. IET Nanodielectrics, 2019, 2(3): 83.

[22] Deng Q. Size-dependent flexoelectric response of a truncated cone and the consequent ramifications for the experimental measurement of flexoelectric properties [J]. J. of Appl. Mechanics-Trans. of the Asme, 2017, 84(10): 101007.

[23] Lam D C C, Yang F, Chong A C M, et al. Experiments and theory in strain gradient elasticity[J]. J. of the Mechanics & Physics of Solids, 2003, 51(8): 1477-1508.

作者简介：

王　蕾(1990—)，女，硕士，工程师，主要从事半导体电学测试与电磁技术研究；

秦国帅(1986—)，男，博士，副教授，硕士研究生导师，主要研究方向为智能材料与结构的多场性能调控与分析。