

# 1 Apèndix 4 (continuació apèndix 3): Signe de la polarització espontània en WZ

Començarem constatant una obvietat: no té sentit parlar de sentit o signe de la polarització espontània si no la comparem amb un eix (el qual usem per definir una determinada direcció i sentit). Triem doncs l'eix  $c$  de la wurtzita apuntant en la direcció de creixement  $[0001]$ . En la Figura 1 mostrem l'estructura WZ i l'eix  $c$ .

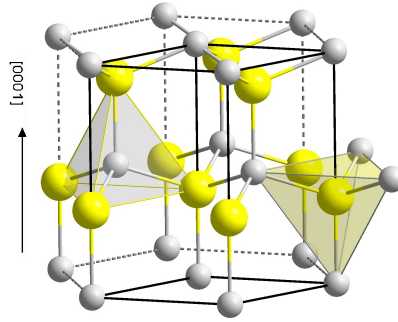


Figure 1: Estructura WZ en la direcció de creixement  $[0001]$

La primera cosa que podem observar és que tant les boles grogues com les grises tenen coordinació tetraèdrica. La segona cosa que observem és que el tetraedre de coordinació de les boles grises està invertit respecte del de les boles grogues. La tercera cosa a remarcar, tot i ser una obvietat, és que no importa començar la figura amb la capa de boles grises o en la de boles grogues, en els dos casos la orientació dels tetraedres de coordinació de les boles grises descansa sobre la base mentre que el de les boles grogues ho fa sobre el vèrtex.

En la Figura 2 (dreta) mostrem, en el cas del GaN, la cel·la unitària de la WZ i a l'esquerra representem la suma de moments d'enllaç en cadascun dels dos tetraedres de coordinació. En un tetraedre perfecte la suma de moments d'enllaç és zero (com e.g. en el cas del metà).

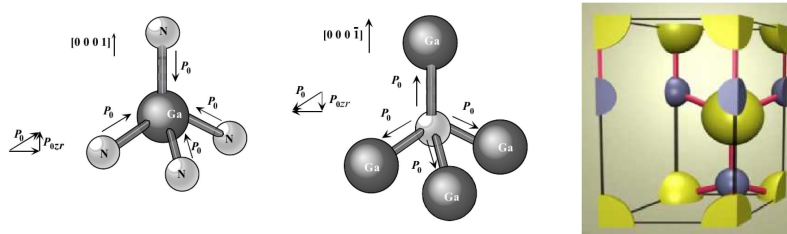


Figure 2: WZ cel·la unitària (dreta) i suma dels moments dipolars d'enllaç en els tetraedres de coordinació del GaN (esquerra)

L'altra cosa que ens diu la Figura 2 és que, en cas d'estar distorsionats els tetraedres, tenint en compte que els tetraedres apunten en direccions oposades i que també els moments dipolars d'enllaç són oposats, els dos tetraedres generen un dipol net *en la mateixa direcció* i, per tant, els efectes se sumen. I una cosa més, *la direcció del moment dipolar és independent de quin és la "primera" capa d'àtoms en el cristall*, és a dir, és independent d'haver fet créixer el cristall a partir d'una primera capa d'anions o de cations.

En la Figura 3 mostrem la WZ en la direcció de creixement  $[0001]$  i direcció del moment dipolar (polarització espontània) que s'origina a partir de la distorsió dels tetraedres de coordinació com a conseqüència de l'atracció entre segons veïns (veure Figura 4).

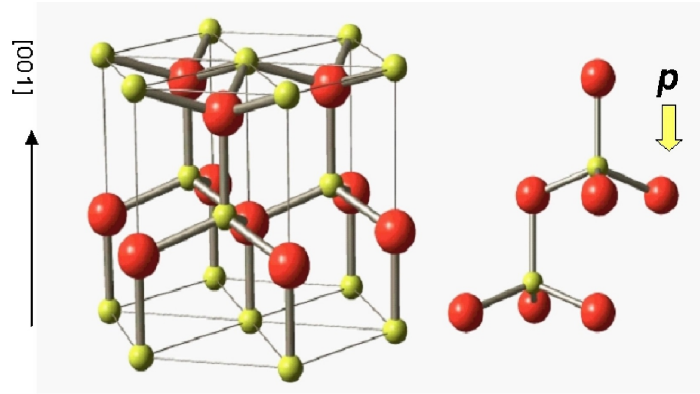


Figure 3: Estructura WZ en la direcció de creixement [0001] i direcció del moment dipolar que s'origina de la distorsió dels tetraèdres de coordinació.

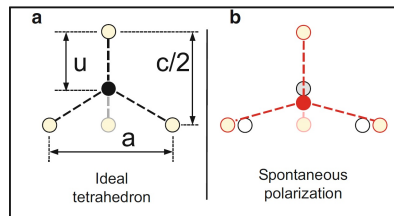


Figure 4: Estructura WZ distorsió del tetraedre de coordinació.

El càlcul del moment dipolar es pot determinar tenint en compte que la càrrega neta del tetraedre ha de ser zero. Per tant, la càrrega en l'àtom central ha de ser quàdruple de la dels lligands i, en valor absolut, la càrrega de l'anió ha de ser igual a la del catió (l'anió adquireix la càrrega que el catió li dona). Ens queda per saber la geometria. A partir de les constants de xarxa  $a$  i  $c$  podem determinar la longitud dels enllaços verticals  $b_1$  que si el tetraedre està distorsionat són diferents de les longituds dels enllaços inclinats  $b_2$ , així com l'angle entre  $b_1$  i  $b_2$  (veure e.g. T. Nann and J. Schneider, Chem Phys. Lett. 384 (2004) 150). Nann i Schneider troben, per al cas del CdSe i CdS els resultats de la taula adjunta:

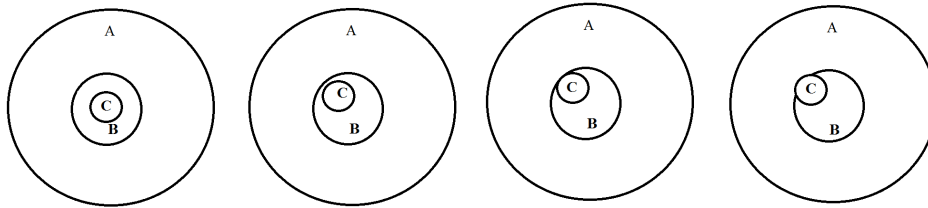
	CdSe	CdS
$c$ (nm)	0.7010	0.6717
$c/a$	1.6306	1.6240
$u$	0.37596(4)	0.37715(8)
$v = (\sqrt{3}/4)a^2c$ (nm <sup>3</sup> )	0.0561	0.0498
$\vartheta$	109.31°	109.06°
$b_1$ (nm)	0.2635	0.2533
$b_2$ (nm)	0.2630	0.2526
$\mu_0$ (Debye)	0.071	0.139
$\mu_0/v$ (Debye/nm <sup>3</sup> )	1.27	2.78
$\mu_0/v$ ( $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ )	0.42	0.93
$\mu_0/v$ (MV/cm)	0.38	0.83

From this the permanent electric dipole moment  $\mu_0$  per unit cell volume  $v$  is calculated in three equivalent units. Note that the  $\mu_0$  direction is taken opposite to the wurtzite  $c$ -axis direction.

Figure 5: Psp per a CsS i CdSe.

## 2 Apèndix 5 : Strain inicial en multishell QDs

Comencem per la pregunta quin strain inicial assignaríem al material C en cada cas esquematitzat en la figura següent



La resposta la trobem en material complementari del paper que vam fer per a revista de Revista Española Física 1 (2007) 8-11:

La estrategia consiste en considerar la inclusión de forma arbitraria y volumen  $V_0$  como superposición de inclusiones esféricas de volumen unidad y evaluar y superponer (sumar) las deformaciones y tensiones que provocan en los puntos interiores a  $V_0$ , como el punto  $P_1$ , y en los exteriores a  $V_0$  como el  $P_2$ . La suma (principio de la superposición) de todas las contribuciones provenientes de las inclusiones esféricas de volumen unidad, interiores a la inclusión arbitraria, nos dará la deformación y la tensión debidas a la totalidad de la inclusión arbitraria.

en altres paraules, hem considerar la "suma" d'elements de volum de dos materials diferents B i C enterrats en la matriu exterior (A). Per tant, els strains inicials seran:

$$\epsilon_0^{(A)} = 0 \quad ; \quad \epsilon_0^{(B)} = \frac{a_B - a_A}{a_A} \quad ; \quad \epsilon_0^{(C)} = \frac{a_C - a_A}{a_A} \quad (1)$$

Hem discutit sobre si ficar  $\epsilon_0^{(C)} = \frac{a_C - a_B}{a_B}$ . Imaginen-nos que la constant de xarxa de C fos gairebé igual a la de B i totes dues molt diferents a la del material A. Si assumim aquesta segon alternativa, l'strain inicial de: A seria zero, de B seria molt gran, C seria quasi zero.... i en el límit B=C seria zero ... quan havia de ser molt gran!