

CARACTERIZAÇÃO DO TRANSPORTE DE PORTADORES DE CARGA NO SEMICONDUTOR SULFETO DE ZINCO DOPADO TIPO N

CHARACTERIZATION OF THE TRANSPORT OF CARRIERS IN THE SEMICONDUCTOR ZINC SULFIDE DOPED TYPE N

Agamenon Lima do Vale ¹
Clóves Gonçalves Rodrigues ²

Resumo: Neste trabalho foi deduzida teoricamente a velocidade de deriva, o deslocamento e a mobilidade dos portadores de carga em um semicondutor dopado tipo *n*. Para tanto, utilizamos uma equação semi-clássica baseada na segunda lei de Newton. A aplicação se deu no semicondutor Sulfeto de Zinco (ZnS) nas fases *wurtzite* (WZ) e *zincblende* (ZB), dopado tipo *n* e submetido a campos elétricos de baixa intensidade. A dependência destas propriedades de transporte em função da intensidade do campo elétrico e da temperatura foi analisada. O principal resultado obtido é que a mobilidade na fase WZ é maior que na fase ZB.

Palavras-chaves: Semicondutores. Mobilidade eletrônica. Velocidade de deriva. Sulfeto de zinco.

Abstract: *In this work the drift velocity, the displacement and the mobility of the charge carriers in a n-type doped semiconductor were theoretically deduced. For this, we use a semi-classical equation based on Newton's second law. The application was carried out in the Zinc Sulfide semiconductor (ZnS) in the wurtzite (WZ) and zincblende (ZB) phases, doped type n and submitted to low intensity electric fields. The dependence of the transport properties as a function of the electric field strength and the temperature was analyzed. The main result obtained is that the mobility in the WZ phase is greater than in the ZB phase.*

Keywords: *Semiconductors. Electron mobility. Drift velocity. Zinc sulfide.*

¹Pontifícia Universidade Católica de Goiás, MEPROS, email: agamenon.lv@gmail.com

²Pontifícia Universidade Católica de Goiás, ECEC, email: cloves@pucgoias.edu.br

1 INTRODUÇÃO

O ser humano sempre procurou meios de melhorar a sua condição de vida. Para isso, faz uso dos recursos naturais disponíveis e procura transformar os recursos naturais em produtos cada vez mais eficientes, criando novas possibilidades de aplicações. Dessa forma, os materiais passaram a ser classificados conforme as suas principais características, o que possibilitou observar propriedades comuns e interessantes para as mais diversas aplicações (Braithwaite & Weaver, 1990), (Swart, 2008), (Dias et al., 2005).

Materiais são substâncias cujas propriedades os tornam utilizáveis em máquinas, dispositivos, estruturas, ou produtos consumíveis. Assim, é fundamental conhecer as propriedades dos materiais. Exemplos de materiais com propriedades distintas são: metais, cerâmicas, semicondutores, supercondutores, polímeros, plásticos, vidros, fibras, madeira, areia, pedra, vários conjugados, etc. Praticamente em todas as atividades humanas existe a dependência de materiais. Esses materiais são utilizados nos meios de transporte, residências, no vestuário, nos meios de comunicação, no processamento de dados, no comércio, no lazer, na produção de alimentos, nos itens de saúde e de ensino, na geração e transporte de energia e em muitas outras áreas, atividades e segmentos. Dessa forma, o conhecimento e a habilidade em produzir e manipular materiais afetam diretamente a qualidade de vida da população (Braithwaite & Weaver, 1990), (Swart, 2008), (Dias et al., 2005).

As características dos materiais empregados na manufatura de produtos influenciam na qualidade do produto final. Além disso, a forma como esses materiais reagem ao meio ambiente ao qual estarão expostos também determinam a qualidade do produto final. De forma geral, especialistas em engenharia e ciência de materiais tratam da geração e aplicação do conhecimento que relaciona composição, estrutura e processamento de materiais com suas propriedades e seus usos. A pesquisa, a produção e o uso de materiais não são domínios exclusivos dos profissionais de ciência e engenharia de materiais. Não importando a especialidade, o engenheiro lidará com materiais que serão usados em produtos e cuja especificação, aquisição e qualificação deverá conhecer, mesmo que não participe diretamente da confecção do produto (Braithwaite & Weaver, 1990), (Swart, 2008), (Dias et al., 2005).

Ressaltamos que é importante que o engenheiro conheça as propriedades dos materiais de sua área e a microestrutura deles, bem como a dependência dessas propriedades em relação às condições de processamento e o uso desses materiais. Esse conhecimento permite a escolha mais adequada dos materiais, o desenvolvimento de processos adequados e otimizados de fabricação dos materiais e dos produtos, e também o estabelecimento de parâmetros de projeto dos produtos e dos limites das condições de uso desses produtos, sem, no entanto, esquecer os aspectos sociais e econômicos associados. O conhecimento dos princípios básicos e dos fundamentos dos materiais é fundamental também para que o progresso do desenvolvimento de novos materiais e processos de fabricação possam ter continuidade.

Pode-se afirmar que o nível de desenvolvimento de um povo está diretamente relacionado à sua habilidade em produzir e manipular os materiais, sendo que as culturas passadas foram classificadas de acordo com essa habilidade, como, por exemplo, a idade da pedra, a idade do bronze e a idade do ferro. Poderíamos dizer, talvez, que estamos hoje na “idade da eletrônica” (Braithwaite & Weaver, 1990), (Swart, 2008), (Dias et al., 2005).

Componentes eletrônicos estão presentes na maioria das atividades humanas como, por exemplo, transporte (rodoviário, aéreo, naval ou espacial), comunicação, computação, controle de processos industriais, instrumentos de análise e de pesquisa, esporte, medicina e muitas outras atividades. É difícil imaginar alguma atividade humana que não dependa, direta ou indiretamente, de algum sistema eletrônico. Dessa forma, a eletrônica está se tornando o maior mercado mundial, tendo um valor atual estimado acima de um trilhão de dólares,

lembrando que todos os dispositivos eletrônicos são baseados em materiais (Braithwaite & Weaver, 1990), (Swart, 2008), (Dias et al., 2005).

Sendo a propriedade elétrica uma característica muito importante dos materiais é de extrema importância a pesquisa e o estudo desta propriedade. Entre os diversos grupos de materiais com propriedades elétricas interessantes destacam-se os semicondutores. Os materiais semicondutores provocaram um alavancando formidável na indústria eletrônica e promoveram uma grande revolução da computação e da eletrônica. Dentre os dispositivos criados com materiais semicondutores podemos citar: diodos, light emitting diodes (LEDs), transistores, detectores e emissores diversos, etc.

Um material semicondutor que tem recebido grande atenção atual é o sulfeto de zinco (ZnS) (Ruda & Lai 1990), (Singh et al., 1991), (Schreiber & Fitting, 2003), (Yang et al., 2008), (Abadi, 2010), (Arabshahi, 2010), (Magomadov et al., 2012), (Dey et al., 2016), o qual possui duas fases distintas: zinc blende (ZB) e wurtzite (WZ) (veja Fig. 1), as quais possuem propriedades diferentes, acarretando que para uma determinada aplicação tecnológica uma fase pode ser mais conveniente que a outra. O ZnS tem sido investigado em uma série de novos materiais para aplicações tecnológicas como, por exemplo, em películas finas e dispositivos eletroluminescentes (Morton & Williams, 1979), (Okamoto & Hamakawa, 1979), (Bryant et al., 1985). Os dispositivos eletroluminescentes oferecem vantagens significativas sobre outras tecnologias existentes, como os antigos tubos de raios catódicos, e as telas de plasma e de cristal líquido. Os dispositivos eletroluminescentes de película fina tornaram-se de grande interesse, uma vez que oferecem um possível meio de alcançar uma alta resolução de imagem, com aplicação em painéis de monitores de vídeo compacto para terminais de computadores ou monitores de tela plana, tendo a grande vantagem de serem leves (Perry & Wallich, 1985), (Ono, 1995). Um estudo atual a respeito do ZnS é a sua possível aplicabilidade em telas (displays) transparentes (Faghaninia et al., 2016).

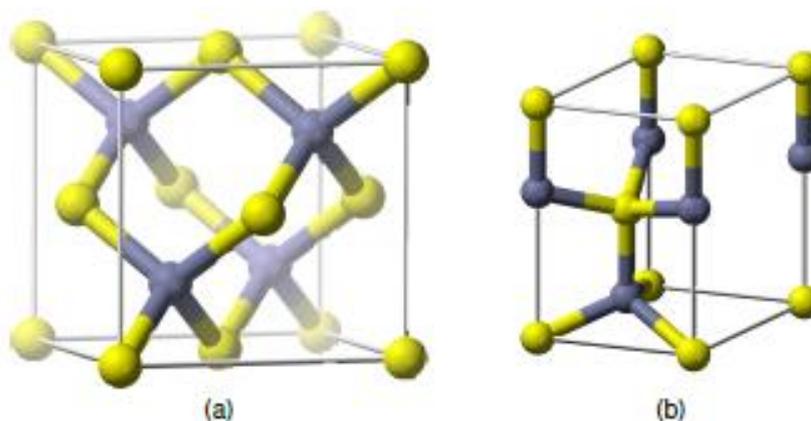


Figura 1. Estrutura cristalina do ZnS em suas duas fases: (a) zincblende e (b) wurtzite.

Neste trabalho realizamos um estudo sobre o deslocamento, a velocidade e a mobilidade dos portadores no semicondutor sulfeto de zinco (ZnS) dopado tipo n submetido a campos elétricos não muito intensos. Para tanto utilizamos uma equação semi-clássica baseada na segunda lei de Newton. O texto está organizado da seguinte maneira: na Seção 2 obtemos as equações de movimento dos portadores (elétrons livres) em um semicondutor dopado tipo *n* submetido a campos elétricos de baixa intensidade. Na Seção 3 as equações de movimento obtidas na Seção 2 são aplicadas ao caso específico do semicondutor de gap largo sulfeto de zinco (ZnS) em suas duas fases: zinc blende (ZB) e wurtzite (WZ). A Seção 4 se reserva a comentários finais.

2 EQUAÇÕES DE MOVIMENTO PARA O ELÉTRON NO SEMICONDUTOR SUBMETIDO A CAMPO ELÉTRICO

Consideraremos um semicondutor polar de gap direto dopado tipo n submetido à ação de um campo elétrico externo aplicado de baixa intensidade e com uma concentração de impurezas não muito elevada. Nesta condição de baixa concentração de impurezas não é necessário levar em consideração o espalhamento dos portadores de carga (neste caso elétrons) pelas impurezas (Rodrigues, 2012) e na condição de baixos campos elétricos aplicados não existe a necessidade de introduzir elementos que levam em conta os fenômenos não lineares que surgem em campos elétricos intensos (Rodrigues et al., 2006). Para descrever tal situação utilizaremos a segunda lei de Newton

$$d\mathbf{P}/dt = \Sigma \mathbf{F} \quad (1)$$

introduzindo elementos quânticos visto que a segunda lei de Newton é clássica e não dá conta dos efeitos quânticos em semicondutores. O movimento dos portadores será governado por uma força elétrica \mathbf{F}_{el} originada por um campo elétrico aplicado ao semicondutor e por uma força de resistência ao movimento dos portadores \mathbf{F}_R . Assim a segunda lei de Newton se torna:

$$d\mathbf{P}/dt = \mathbf{F}_{el} + \mathbf{F}_R(t) \quad (2)$$

Na Equação (2) aplicaremos a forma quântica do momento total \mathbf{P} e utilizaremos a expressão quântica para \mathbf{F}_R . Devemos ainda utilizar a “massa efetiva” de portadores. A massa efetiva de portadores é uma massa que permite usar a segunda lei de Newton da Física Clássica. Isto porque a massa efetiva engloba os efeitos quânticos do potencial interno da rede cristalina sobre o portador. Desta forma a definição de massa efetiva permite tratar os portadores como partículas clássicas de massa igual à sua massa efetiva.

Em 1924, Louis de Broglie postulou que partículas também possuíam comprimentos de onda tendo, portanto, comportamento ondulatório. Assim, o momento \mathbf{p} de uma partícula pode ser calculado pela relação de Louis de Broglie. Considerando que um elétron livre tem uma função de onda plana, o momento total \mathbf{P} dos portadores no semicondutor, usando o formalismo quântico, é dado por (Rodrigues et al., 2000)

$$\mathbf{P} = \Sigma_{\mathbf{k}} (h/2\pi) \mathbf{k} f_{\mathbf{k}}(t) \quad (3)$$

onde h é a constante de Planck, \mathbf{k} o vetor de onda do elétron, e $f_{\mathbf{k}}$ a função de distribuição dos elétrons dada por (Rodrigues et al., 2000)

$$f_{\mathbf{k}}(t) = A \exp\{-c(\mathbf{k} - 2\pi m^* \mathbf{v}(t)/h)^2\} \quad (4)$$

onde $A = 4(\pi c)^{3/2}$ e $c = h^2/(8\pi^2 m^* k_B T)$, sendo k_B a constante de Boltzmann, m^* a massa efetiva do elétron, T a temperatura e V o volume da amostra. A Equação (4) é chamada de função de distribuição do tipo Maxwell-Boltzmann. Substituindo a Equação (4) na Equação (3) e realizando o somatório obtemos

$$\mathbf{P}(t) = m^* \mathbf{v}(t) \quad (5)$$

com a velocidade $\mathbf{v}(t)$ na direção do campo elétrico \mathbf{E} . Substituindo a Eq. (5) na Eq. (2) temos então:

$$m^* d\mathbf{v}(t)/dt = \mathbf{F}_{el} + \mathbf{F}_R(t) \quad (6)$$

Pelo fato do elétron ter uma carga elétrica negativa a força elétrica \mathbf{F}_{el} que atua sobre um elétron é oposta à orientação do vetor campo elétrico \mathbf{E} que atua sobre o elétron, conforme ilustra a Figura 2. A força elétrica sobre o elétron será:

$$\mathbf{F}_{el} = q\mathbf{E} = (-e)(-E\mathbf{z}) = eE\mathbf{z} \quad (7)$$

onde \mathbf{z} é o vetor unitário na direção do eixo Z escolhido de forma arbitrária.

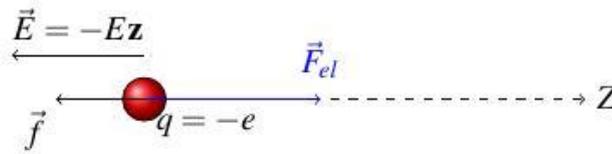


Figura 2. Esquema das forças que atuam sobre o elétron quando um campo elétrico \mathbf{E} atua sobre o elétron. Note que o movimento do elétron é oposto à direção do campo elétrico. Os vetores não estão em escala.

Quando o elétron está se movendo no material pela ação do campo elétrico aplicado, há uma força de resistência \mathbf{F}_R contrária ao movimento do elétron. Consideraremos que essa força é proporcional à velocidade \mathbf{v} do elétron, ou seja,

$$\mathbf{F}_R(t) = -b\mathbf{v}(t) \quad (8)$$

onde b é um parâmetro que está associado à resistência elétrica do semiconductor. Substituindo as Equações (7) e (8) na Equação (6), temos

$$m^*dv(t)/dt = eEz - b\mathbf{v}(t) \quad (9)$$

Pelo fato do movimento ocorrer somente ao longo de um único eixo podemos considerar a equação anterior sem a necessidade de notação vetorial ficando o sentido do movimento determinado pelo sinal positivo ou negativo. A Equação (9) pode ser solucionada de forma exata da seguinte maneira:

$$m^*dv(t) = [eE - b\mathbf{v}(t)]dt$$

que após ser integrada nos fornece a velocidade dos portadores no semiconductor:

$$\mathbf{v}(t) = eE (1 - e^{-bt/m^*})/b \quad (10)$$

Utilizando a Equação (10) podemos encontrar a equação do deslocamento $x(t)$ do portador usando que $\mathbf{v} = dx/dt$. Dessa forma,

$$x(t) = eE [t - m^*(1 - e^{-bt/m^*})/b]/b \quad (11)$$

Nas Equações (10) e (11) o parâmetro b , o qual foi obtido de forma quântica (Rodrigues et al., 2000), é dado por:

$$b = \frac{e^2 w^2 \Gamma}{3} \sqrt{\frac{2(m^*)^2}{\pi(k_B T)^3}} \frac{2e^y K_1(y)}{e^{2y} - 1} \quad (12)$$

sendo $\Gamma = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0$ e $y = \hbar w / 4\pi k_B T$, onde e é a carga elementar do elétron, w a frequência dos fônons ópticos, m^* a massa efetiva do elétron, ε_0 a constante eletrostática estática, ε_∞ a constante eletrostática de alta frequência, T a temperatura da rede cristalina, $K_1(y)$ a função modificada de segunda espécie de Bessel, k_B a constante de Boltzmann cujo valor é aproximadamente $1,38 \times 10^{-16}$ erg/kelvin, $\hbar = 6,626 \times 10^{-17}$ erg.s a constante de Planck. O parâmetro b refere-se ao espalhamento dos portadores pelos fônons ópticos, o qual é o mecanismo de espalhamento mais importante para os semicondutores polares, que é o caso considerado aqui.

Ressaltamos que as equações de movimento (10) e (11) são restritas às seguintes condições: 1) o campo elétrico externo aplicado deve ser de baixa intensidade (< 5 kV/cm) e a temperatura não deve ser muito alta ($< 150^\circ\text{C}$), pois para campos elétricos e temperaturas acima destes valores surgem efeitos não lineares de forma que devem ser introduzidos elementos que dêem conta destes fenômenos não lineares (Rodrigues et al., 2006); 2) a concentração de impurezas não deve ser muito elevada ($< 10^{16} \text{cm}^{-3}$), pois, para concentração de impurezas acima deste valor devemos levar em consideração o espalhamento dos portadores de carga (neste caso elétrons) pelas impurezas (Rodrigues, 2012).

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

O Semicondutor ZnS (sulfeto de zinco) é um semicondutor polar de gap direto e largo (Ruda & Lai 1990), (Singh et al., 1991), (Schreiber & Fitting, 2003), (Yang et al., 2008), (Abadi, 2010), (Arabshahi, 2010), (Magomadov et al., 2012), (Dey et al., 2016) que se cristaliza na forma estrutural wurtzite (WZ) ou zinblende (ZB), como mostra a Fig. 1. Nas últimas décadas temos assistido a uma grande expansão no estudo de semicondutores de gap largo. Esta é uma consequência da realização em laboratórios de crescimentos de amostras satisfatórias, levando ao aumento do desenvolvimento de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos de grande interesse tecnológico e industrial. A Tabela 1 contém alguns parâmetros fundamentais do sulfeto de zinco nas formas wurtzite (WZ) e zinblende (ZB). Na Tabela 1 m_0 é a massa de repouso do elétron.

Tabela 1 - Dados do sulfeto de zinco (Nag, 1980), (Madelung, 1987).

FASE	ϵ_0	ϵ_∞	w (THz)	m^*
WZ	9,60	5,70	64,7	$0,28m_0$
ZB	8,32	5,15	66,2	$0,34m_0$

Consideraremos aqui o semicondutor sulfeto de zinco (ZnS), em suas duas fases (ZB e WZ) dopado tipo n submetido a campos elétricos não muito intensos (< 5 kV/cm), com baixa concentração de impurezas ($< 10^{16}$ cm $^{-3}$) e temperaturas não muito elevadas ($< 150^\circ\text{C}$). Com a aplicação de um campo elétrico externo \mathbf{E} no instante $t = 0$ passa a haver uma força atuando sobre os elétrons de condução. Como consequência da aplicação desta força, os elétrons de condução reduzem o seu movimento aleatório e começam a acelerar na direção oposta à direção do campo elétrico aplicado \mathbf{E} . Ao mesmo tempo, o elétron passa a sofrer a ação de forças dissipativas devido às colisões com a rede cristalina do semicondutor.

Utilizamos a Equação (10) e os dados contidos na Tabela 1 para plotar a velocidade dos portadores em função do tempo no semicondutor ZnS em suas duas fases: wurtzite (WZ) e zinblende (ZB), como mostra a Fig. 3. Observando a Figura 3 notamos que a velocidade do elétron no semicondutor ZnS (ZB) é menor que na forma WZ. Além disso, nos primeiros 0.25 ps (estado transiente), a velocidade cresce rapidamente e, após 0.25 ps, a velocidade se torna constante (estado estacionário).

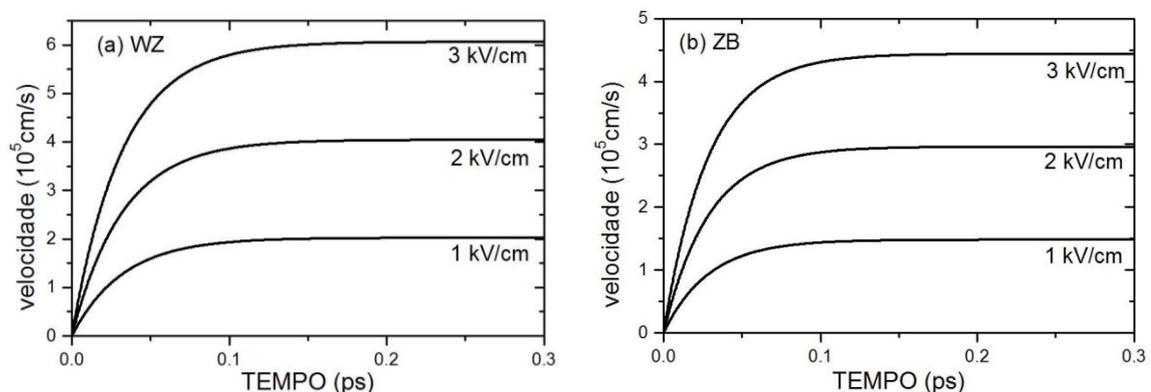


Figura 3. Velocidade do elétron no estado transiente no ZnS em suas duas fases: (a) WZ e (b) (ZB).

Utilizando a Equação (11), determinamos a posição do elétron no semicondutor, em função do tempo, conforme ilustrado na Figura 4. Analisando a Figura 4, notamos que o

elétron percorre uma maior distância no cristal semiconductor ZnS na forma WZ. Essas informações possibilitam construir dispositivos com tamanhos específicos que podem levar a um dimensionamento mais eficiente na produção destes dispositivos. Na Figura 5 notamos que, para um campo elétrico de 3 kV/cm, um elétron no cristal semiconductor de sulfeto de zinco na forma ZB percorre uma distância menor que no semiconductor na forma WZ.

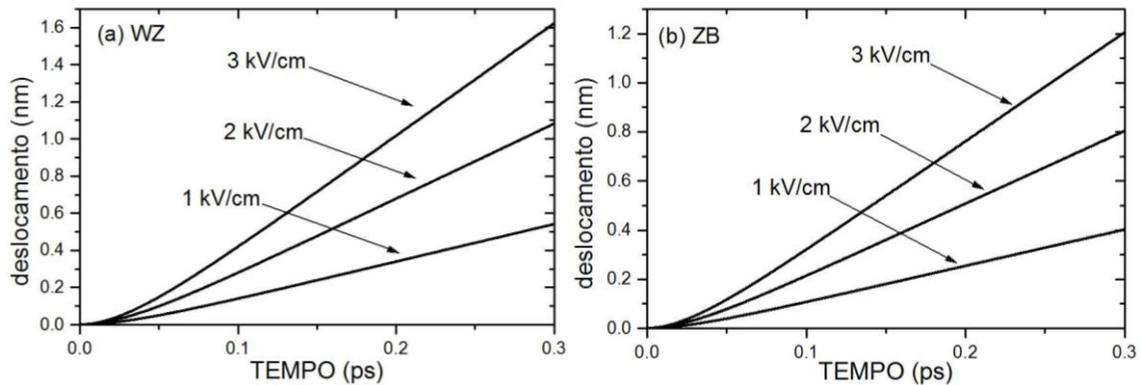


Figura 4. Deslocamento do elétron no ZnS na forma WZ, figura (a), e na forma ZB, figura (b).

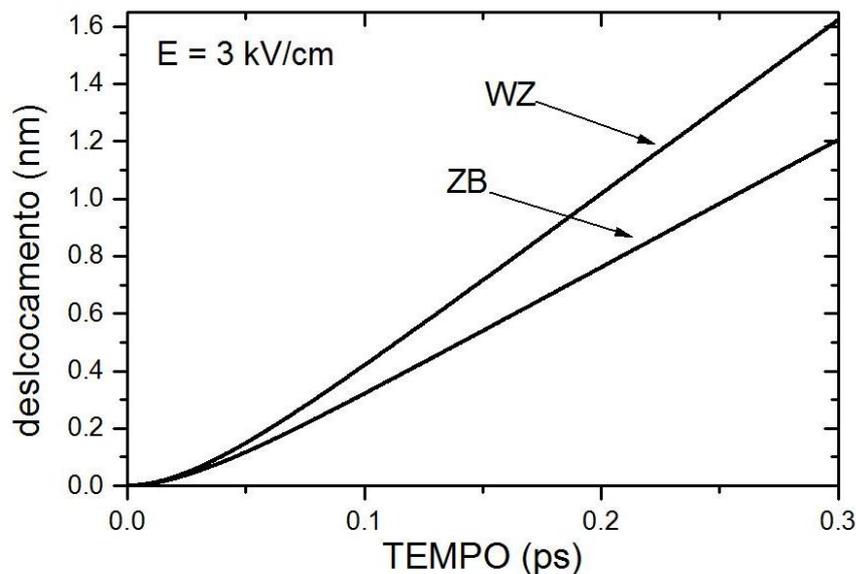


Figura 5. Deslocamento dos portadores para as duas formas do ZnS para um campo elétrico de 3 kV/cm.

No estado estacionário a velocidade de deslocamento do elétron torna-se constante (a aceleração do elétron é nula), ou seja, $dv/dt = 0$. Dessa forma a Equação (9) torna-se $0 = eE - bv_{est}$, que nos fornece:

$$v_{est} = eE/b \quad (13)$$

onde v_{est} é a velocidade do portador no estado estacionário.

Utilizando os dados do semiconductor Sulfeto de Zinco da Tabela 1, plotamos o comportamento da velocidade de deriva do elétron no estado estacionário em função do campo elétrico, fornecido pela Equação (13), conforme mostra a Figura 6. Observamos que na forma WZ a velocidade do elétron é maior que na forma ZB refletindo o comportamento do elétron no estado transitório, conforme vimos na Figura 3. Este comportamento se deve,

principalmente, ao fato da massa efetiva do elétron na fase WZ ser menor que na fase ZB (veja Tabela 1).

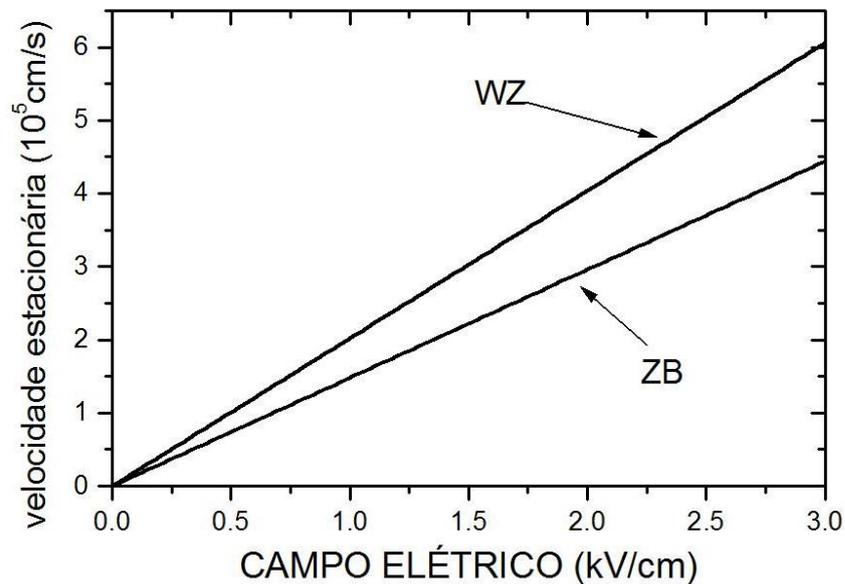


Figura 6. A velocidade de deriva do elétron cresce de forma linear com o aumento da intensidade do campo elétrico.

Analisando a Figura 7 notamos que a forma WZ do semiconductor ZnS oferece uma maior mobilidade eletrônica ($M = |\mathbf{v}|/|\mathbf{E}|$) que a forma ZB do semiconductor ZnS. Para a fase WZ foi encontrada uma mobilidade de aproximadamente $202 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ e para a fase ZB um valor aproximado de $148 \text{ cm}^2/\text{V.s}$.

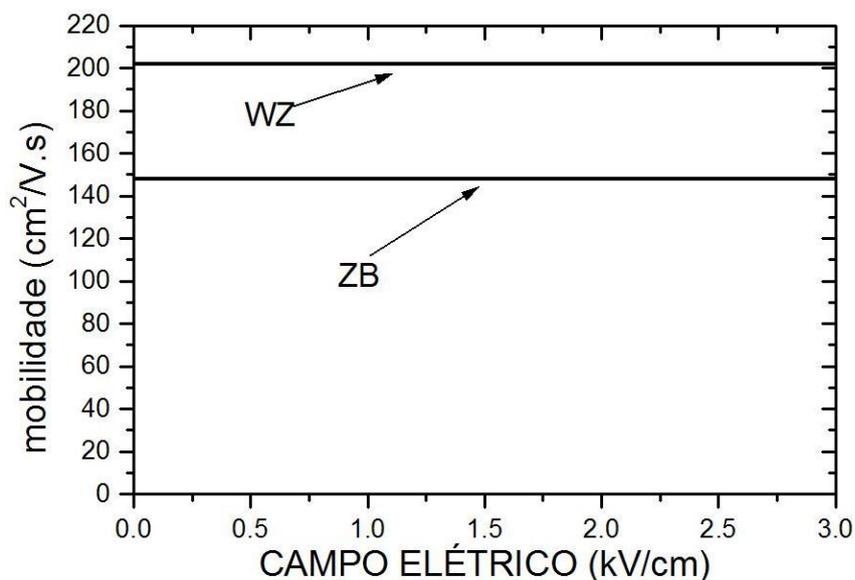


Figura 7. Mobilidade eletrônica do semiconductor ZnS em suas duas formas: WZ e ZB.

A Tabela 2 mostra o resultado que obtivemos neste trabalho para a mobilidade eletrônica para o ZnS na fase (ZB) comparado a outros resultados, teóricos e experimental.

Verifica-se que o resultado obtido neste trabalho é o que mais se aproxima do resultado experimental obtido por Landoldt-Börnstein (Madelung, 1987).

Tabela 2 - Valores da mobilidade para o ZnS (ZB)

Autor	Método	Mobilidade (cm ² /V.s)
(Ruda & Lai 1990)	equação de transporte de Boltzmann (método variacional)	140
neste trabalho	semi-clássico	148
(Madelung, 1987)	Experimental	160
(Reigrotzki, 1998)	simulação de Monte Carlo	300
(Schreiber & Fitting, 2003)	simulação de Monte Carlo	370
(Brennan, 1988)	simulação de Monte Carlo	500

Nas Figuras de 3 a 7 foi utilizada uma temperatura fixa de 300 kelvin. A Eq. (12) mostra que o parâmetro b possui uma dependência com a temperatura da rede cristalina. As Figuras 8 e 9 mostram a influência da temperatura da rede na velocidade estacionária e na mobilidade eletrônica. A Figura 8 mostra o comportamento da velocidade estacionária dos portadores de carga para três diferentes valores de campos elétricos aplicados, em função da temperatura da rede para as duas formas do semicondutor sulfeto de zinco: (a) WZ e (b) ZB. Com o aumento da temperatura aumenta-se a vibração da rede cristalina, aumentando assim a taxa de colisão dos portadores de carga com os átomos da rede. Dessa forma, os portadores de carga perdem parte de sua energia de movimento, fazendo com que a intensidade da velocidade seja diminuída com o aumento da temperatura da rede. Para a forma wurtzite, a redução da velocidade de 0°C a 100°C para cada intensidade de campo elétrico é de aproximadamente 31,2%, enquanto que para a forma zinblende é aproximadamente 31,8%, para cada valor de campo elétrico.

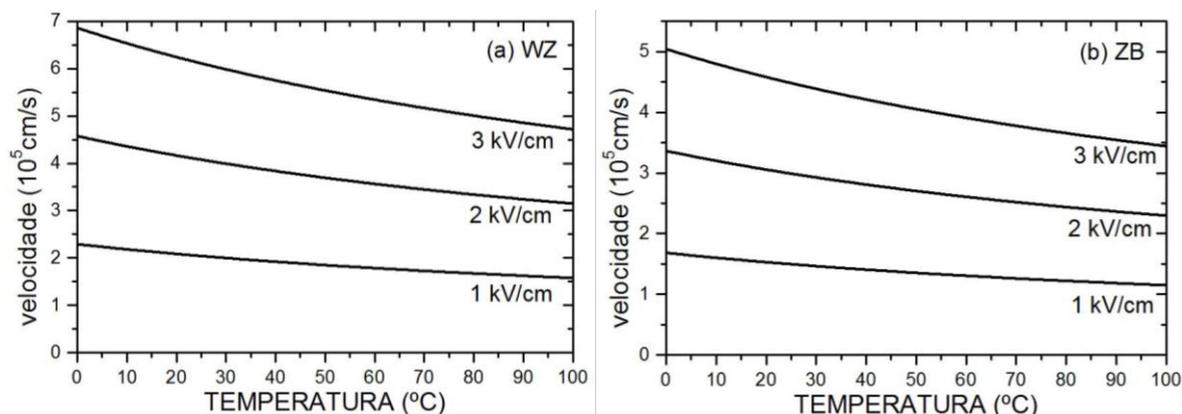


Figura 8. Velocidade estacionária dos portadores de carga elétrica em função da temperatura da rede cristalina.

Para baixos valores de campos elétricos aplicados a mobilidade eletrônica não varia com a intensidade do campo elétrico aplicado conforme vimos na Figura 7, porém, ela é influenciada pela temperatura da rede. De forma análoga à velocidade, a mobilidade eletrônica também diminui com o aumento da temperatura conforme mostra a Figura 9. A mobilidade eletrônica tem uma redução de aproximadamente 31,2% para a forma wurtzite e de aproximadamente 31,8% para a forma zinblende.

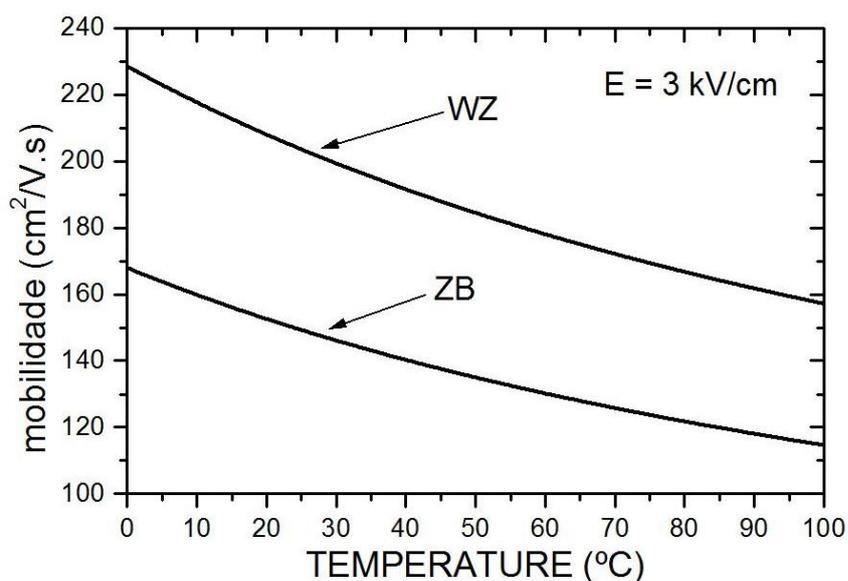


Figura 9. Redução da mobilidade eletrônica com o aumento da temperatura.

4 CONCLUSÕES

A investigação de fenômenos ultra-rápidos em semicondutores é de grande interesse, tanto do ponto de vista teórico, pois, envolve a construção de métodos e de modelos físicos que descrevem os processos que ocorrem no sistema, quanto prático uma vez que tem se tornado indispensável a utilização tecnológica de dispositivos que operem nessas condições ultra-rápidas. Hoje existem dispositivos semicondutores que apresentam tempos de trânsito eletrônico que podem ser inferiores a um picossegundo (Faghaninia, et al. 2016). Para o desenvolvimento de dispositivos de alta velocidade torna-se necessário, então, conhecer em detalhes as propriedades dinâmicas dos elétrons em semicondutores, nas escalas de tempo de picossegundos e de fentossegundos. Resumindo, neste trabalho determinamos teoricamente a velocidade de deriva, o deslocamento e a mobilidade dos elétrons no semicondutor Sulfeto de Zinco submetido a campos elétricos de baixa intensidade nas formas zincblende (ZB) e wurtzite (WZ). Para tanto utilizamos uma equação semi-clássica baseada na segunda lei de Newton a qual conduz a uma equação de evolução do tipo Newton-Langevin. Foi verificado que para o semicondutor ZnS a maior velocidade de deriva e conseqüentemente a maior mobilidade ocorre na fase wurtzite. Foi também determinada a variação da velocidade e da mobilidade em função da temperatura da rede, observando-se uma redução em ambas com o aumento da temperatura. Verifica-se que o resultado obtido neste trabalho para a mobilidade eletrônica para o ZnS na fase (ZB) possui um bom acordo com o resultado experimental obtido por Landoldt-Börnstein (Madelung, 1987).

É extremamente importante do ponto de vista de aplicações em dispositivos eletrônicos comparar as propriedades de diferentes fases de um particular material. Por exemplo, uma fase pode ser mais conveniente que a outra em algumas aplicações tecnológicas, sendo mais atrativa para certas aplicações em determinados dispositivos.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da Pró-Reitoria de Pós-Graduação e Pesquisa (PROPE) da Pontifícia Universidade Católica de Goiás.

REFERÊNCIAS

- ABADI, M.R.R. Numerical calculation of the electron mobility in ZnS and ZnSe semiconductors using the iterative method, *International Journal of the Physical Sciences*, vol. 5, pp. 1752-1756, 2010.
- ARABSHAHI, H. Calculation of the electron drift mobility in Cr²⁺:ZnS and Cr²⁺:ZnSe materials by rode iteration model, *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*, v. 1, pp. 469-475, 2010.
- ASHCROFT, N.W., MERMIN, N.D. *Solid state physics*, New York, Saunders College Publishing, 2011.
- BRAITHWAITE, N. & WEAVER, G. *Electronic materials*, Londres, Oxford: Alden Press Ltd., 1990.
- BRENNAN, K.F. Theory of high-field electronic transport in bulk ZnS and ZnSe, *Journal of Applied Physics*, v. 64, p. 4024, 1988.
- BRYANT, F.J., KRIER, A. & ZHONG, G.Z. Blue electroluminescence in reverse-biased ZnS(Zn,Al) diodes, *Solid-State Electronics*, v. 28, pp. 847-854, 1985.
- DEY, A., MIDDYA, S. & JANA, R. Light induced charge transport property analysis of nanostructured ZnS based Schottky diode, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, v. 27, pp. 6325-6335, 2016.
- DIAS, I.F.L., TEIXEIRA, R.C. & DUARTE, J.L. *Introdução aos semicondutores e suas aplicações tecnológicas*, Londrina, Paraná, Eduel, 2005.
- FAGHANINIA, A., RAJESH, K.B. & LO, C.S. Alloying ZnS in the hexagonal phase to create high-performing transparent conducting materials, *Physical Chemistry Chemical Physics*, v. 18, pp. 22628-22635, 2016.
- MADELUNG, O. *Numerical data and functional relationships in science and technology*, Berlin, Springer-Verlag, 1987.
- MAGOMADOV, R.M., DEL'MIKHANOV, R.R. & TSEBAEV, S.N. Temperature dependence of unthermalized nonequilibrium charge carrier mobility in cubic ZnS far from a phase transition, *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, v. 76, pp. 315-316, 2012.
- MORTON, D.C. & WILLIAMS, F.E. A new thin film electroluminescent material ZnF₂:Mn, *Applied Physics Letters*, v. 35, pp. 671-672, 1979.
- NAG, B.R. *Electron transport in compound semiconductors*, Berlin, Springer-Verlag, 1980.
- OKAMOTO, K. & HAMAKAWA, Y. Bright green electroluminescence in thin film ZnS TbF₃, *Applied Physics Letters*, v. 35, pp. 508-511, 1979.
- ONO, Y.A. *Electroluminescent displays*, Singapura, World Scientific, 1995.
- PERRY, T.S. & WALLICH, P. Computer displays: new choices, new tradeoffs: advances on several fronts let users and designers juggle lightness, brightness, and price as well as much-sought-after flatness, *IEEE Spectrum*, v. 22, pp. 52-53, 1985.
- REIGROTZKI, M., STOBBE, M., REDMER R. & SCHATTKE, W. Impact ionization rate in ZnS, *Physical Review B*, v. 52, p. 1456, 1995.
- RODRIGUES, C.G., VACONCELLOS, A.R. & LUZZI, R. A kinetic theory for nonlinear quantum transport, *Transport Theory and Statistical Physics*, v. 29, p. 733-757, 2000.
- RODRIGUES, C.G., VACONCELLOS, A.R. & LUZZI, R. Non-linear electron mobility in n-doped III-nitrides, *Brazilian Journal of Physics*, v. 36, pp. 255-257, 2006.
- RODRIGUES, C.G. Nonlinear electronic transport behavior in Indium Nitride, *Materials Chemistry and Physics*, v. 137, pp. 317-322, 2012.

-
- RUDA, H.E. & LAI, B. Electron transport in ZnS, *Journal of Applied Physics*, v. 68, pp. 1714-1719. 1990.
- SAKURAI, J.J. *Modern quantum mechanics*, New York, Addison-Wesley, 1982.
- SCHREIBER, E. & FITTING, H. J. Ballistic electrons in GaAs and ZnS, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, v. 131-132, pp. 87-98, 2003.
- SINGH, R.D., GAUR, A. & SHARMA, A.K. Pulsed laser induced absorption (one-four) dependence of electron mobility in CdI₂ and ZnS crystals, *Pramana - J. Phys*, v. 36, pp. 435-439, 1991.
- SWART, W.J. *Semicondutores, fundamentos técnicos e aplicações*, Campinas, Unicamp, 2008.
- YANG, X., XU, C. & GILES, N.C. Intrinsic electron mobilities in CdSe, CdS, ZnO, and ZnS and their use in analysis of temperature-dependent Hall measurements, *Journal of Applied Physics*, v. 104, n. 7, p. 073727, 2008.