

Pontifícia Universidade Católica de Goiás
Programa de Mestrado em Engenharia de Produção e Sistemas

**Caracterização do desempenho do semicondutor
Sulfeto de Zinco (ZnS) na aplicação em dispositivos
semicondutores**

Agamenon Lima do Vale

2016

Caracterização do desempenho do semicondutor Sulfeto de Zinco (ZnS) na aplicação em dispositivos semicondutores

Agamenon Lima do Vale

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção e Sistemas da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, como parte do requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Produção e Sistemas.

Orientador: Clóves G. Rodrigues, Dr.

Goiânia
2016

Dados Internacionais de Catalogação da Publicação (CIP)
(Sistema de Bibliotecas PUC Goiás)

V149c Vale, Agamenon Lima do.
Caracterização do desempenho do semicondutor Sulfeto de Zinco (ZnS) na aplicação em dispositivos semicondutores [manuscrito] / Agamenon Lima do Vale – Goiânia, 2016.
66 f. : il. ; 30 cm.

Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica de Goiás, Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Engenharia de Produção e Sistemas, 2016.

“Orientador: Dr. Clóves G. Rodrigues”.

Bibliografia.

1. Semicondutores. 2. Sulfeto de Zinco. I. Título.

CDU 621.315.592(043)

CARACTERIZAÇÃO DO DESEMPENHO DO SEMICONDUTOR SULFETO DE ZINCO (ZnS) NA APLICAÇÃO EM DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES

Agamenon Lima do Vale

Esta Dissertação julgada adequada para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Produção e Sistemas, e adequada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção e Sistemas da Pontifícia Universidade Católica de Goiás em dezembro de 2016.



Prof. Ricardo Luiz Machado, Dr.
Coordenador do Programa de Pós-Graduação
em Engenharia de Produção e Sistemas

Banca Examinadora:



Prof. Clóves Gonçalves Rodrigues, Dr.
Orientador



Prof. Wesley Pacheco Calixto, Dr.
Avaliador Externo - UFG



Prof. José Elmo de Menezes, Dr.
Avaliador Interno - PUC Goiás

GOIÂNIA - GO
DEZEMBRO DE 2016.

*Dedico este trabalho a Deus que me inspirou a abrir a minha mente.
Dedico à minha esposa, Esther Eugênia Benchimol Ferreira, e aos meus filhos, que sempre me apoiaram, acreditaram no meu esforço e abriram mão de passar um tempo comigo para a concretização deste trabalho.*

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Dr. Clóves Gonçalves Rodrigues, que me acompanhou em todo tempo da minha jornada.

Aos meus colegas e companheiros do MEPROS que sempre me incentivaram.

Ao Programa de Mestrado em Engenharia de Produção e Sistemas que me possibilitou realizar este trabalho.

Resumo

Neste trabalho foi deduzido 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.

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.

Lista de ilustrações

Figura 1.1 – Aspectos gerais de engenharia e ciência dos materiais.	15
Figura 2.1 – Elétrons movendo-se livremente em um condutor e corrente elétrica dentro do condutor.	20
Figura 2.2 – Esquema de banda para a condutividade intrínseca num semiconductor: 2.2a) isolante, 2.2b) condutor e 2.2c) semiconductor.	21
Figura 2.3 – Impureza doadora de elétrons no cristal semiconductor.	21
Figura 2.4 – Cargas associadas com um átomo de impureza de boro no silício.	22
Figura 2.5 – Estrutura cristalina do semiconductor ZnS em suas duas fases: (a) <i>zincblende</i> e (b) <i>wurtzite</i>	24
Figura 2.6 – TV e Smartphone usando tecnologia de telas transparentes.	24
Figura 3.1 – Esquema das forças que atuam sobre o elétron quando um campo elétrico \vec{E} passa a atuar sobre o elétron. Note que o movimento do elétron é oposto à direção do campo elétrico \vec{E} . Os vetores não estão em escala.	28
Figura 4.1 – Velocidade do elétron no estado transiente no sulfeto de zinco (ZnS). A figura (a) refere-se ao semiconductor ZnS com estrutura WZ. A figura (b) refere-se ao semiconductor ZnS com estrutura ZB.	32
Figura 4.2 – Posição do elétron no semiconductor sulfeto de zinco, na forma WZ (figura (a)) e na forma ZB (figura (b)).	33
Figura 4.3 – Comparação do deslocamento do portador de carga entre as duas formas do ZnS para um campo elétrico de 3 kV/cm.	34
Figura 4.4 – A velocidade de deriva do elétron cresce de forma linear com o aumento da intensidade do campo elétrico.	35
Figura 4.5 – Mobilidade eletrônica do semiconductor ZnS em suas duas formas: WZ e ZB.	35
Figura 4.6 – Velocidade estacionária dos portadores de carga elétrica em função da temperatura da rede cristalina.	37
Figura 4.7 – Redução da mobilidade eletrônica com o aumento da temperatura.	38

Lista de tabelas

Tabela 1.1 – Condutividade elétrica à temperatura ambiente ($T = 290K$).	17
Tabela 2.1 – Energia de ionização E_d dos doadores de impurezas pentavalentes no germânio e no silício, em meV.	22
Tabela 2.2 – Energia de ionização E_a dos receptores de impurezas trivalentes no germânio e no silício, em meV.	23
Tabela 2.3 – Dados do Sulfeto de Zinco.	24
Tabela 4.1 – Mobilidade eletrônica no ZnS (ZB).	36

Lista de códigos

A.1	vel_trans.f08	46
B.1	dist_trans.f08	49
C.1	dist_trans.f08	52
D.1	vel_est.f08	55
E.1	mobil_est.f08	58
F.1	dist_est.f08	61
G.1	dist_est.f08	64

Sumário

INTRODUÇÃO	13	
1	MATERIAIS	14
2	OS SEMICONDUTORES	19
2.1	Definição e Propriedades dos Semicondutores	19
2.2	O Semicondutor ZnS	23
3	EQUAÇÕES DE MOVIMENTO PARA UM ELÉTRON EM UM SEMICONDUTOR SUBMETIDO A UM CAMPO ELÉTRICO	25
3.1	Introdução	25
3.2	Momento Total Quântico	25
3.3	Resolução da Equação (3.1)	28
4	CHARACTERIZAÇÃO DO TRANSPORTE ELETRÔNICO DO SEMICONDUTOR SULFETO DE ZINCO (ZNS)	31
4.1	Estado Transitório	31
4.2	Estado Estacionário	34
4.3	Influência da Temperatura da Rede na Velocidade Estacionária e na Mobilidade Eletrônica	36
5	CONCLUSÃO	39
APÊNDICE A	PARÂMETRO α	40
REFERÊNCIAS		42
	ANEXOS	45
ANEXO A	– ROTINA COMPUTACIONAL PARA A OBTENÇÃO DA VELOCIDADE EM FUNÇÃO DO TEMPO	46
ANEXO B	– ROTINA COMPUTACIONAL PARA O CÁLCULO DO DESLOCAMENTO EM FUNÇÃO DO TEMPO	49
ANEXO C	– ROTINA COMPUTACIONAL PARA O CÁLCULO DA COMPARAÇÃO DO DESLOCAMENTO EM FUNÇÃO DO TEMPO	52
ANEXO D	– ROTINA COMPUTACIONAL PARA O CÁLCULO DA VELOCIDADE EM FUNÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO	55

ANEXO E	-	ROTINA COMPUTACIONAL PARA O CÁLCULO DA MOBILIDADE ELETRÔNICA EM FUNÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO	58
ANEXO F	-	ROTINA COMPUTACIONAL PARA O CÁLCULO DA VELOCIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA	61
ANEXO G	-	ROTINA COMPUTACIONAL PARA O CÁLCULO DA MOBILIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA	64

Introdução

O ser humano é um ser que procura meios de melhorar a sua condição de vida. Para isso, faz uso dos recursos naturais disponíveis. Além disso, tornou-se necessário compreender como 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 nas indústrias.

Entre os diversos grupos de materiais com propriedades elétricas interessantes, os **semicondutores** foram observados, inicialmente, por Alessandro Volta (1745 – 1827), sendo estudados intensamente no início do século XX, alavancando intensamente a indústria eletrônica e promovendo uma grande revolução da computação e da eletrônica. Dentre os dispositivos criados com materiais semicondutores podemos citar: diodos, *light emitting diodes* (LEDs), transistores, detectores diversos etc.

Atualmente existe um grande interesse em semicondutores de *gap* largo pois heteroestruturas destes materiais podem emitir luz num espectro largo (verde, azul, vermelho, e também no infravermelho e ultravioleta). Tais materiais tem sido utilizados em diversas aplicações tecnológicas como no armazenamento óptico de dados, produção de displays com as três cores básicas, lâmpadas, diodos lasers, diodos emissores de luz, dispositivos eletrônicos que operam em campos elétricos muito altos (~ 100 kV/cm), detecção e emissão óptica, imagens de alta definição em painéis de tela plana etc. Dentre os principais semicondutores de *gap* largo podemos destacar o nitreto de gálio (GaN), o nitreto de alumínio (AlN), o nitreto de índio (InN), o seleneto de zinco (ZnSe) e o sulfeto de zinco (ZnS).

É nosso intuito neste trabalho realizar um estudo sobre o deslocamento, a velocidade e a mobilidade dos portadores no semicondutor sulfeto de zinco (ZnS) submetido a campos elétricos de baixa intensidade.

O texto está organizado da seguinte maneira: no Capítulo 1 definimos o que vem a ser materiais, quais as suas características e tipos. No Capítulo 2 apresentamos as propriedades fundamentais dos semicondutores. A contribuição acadêmica deste trabalho começa no Capítulo 3 onde obtemos as equações de movimento do elétron em um semicondutor dopado tipo *n* submetido a um campo elétrico. No Capítulo 4 as equações de movimento obtidas no Capítulo 3 são aplicadas ao caso específico do semicondutor de *gap* largo sulfeto de zinco (ZnS). O Capítulo 5 se reserva à conclusão e comentários finais.

Capítulo 1

Materiais

Materiais são substâncias cujas propriedades os tornam utilizáveis em estruturas, máquinas, dispositivos ou produtos consumíveis. Portanto, há a necessidade de conhecer as propriedades dos materiais. Exemplos de materiais com propriedades distintas são: metais, cerâmicas, semicondutores, supercondutores, polímeros ou plásticos, vidros, fibras, madeira, areia, pedra, vários conjugados etc. [1–4].

Em todas as atividades humanas há a dependência de materiais. Esses materiais são utilizados nos meios de transporte, nas 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 o nível de vida da população. Historicamente, 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 [1–4].

Componentes eletrônicos estão presentes na maioria das atividades humanas, incluindo transporte, seja rodoviário, aéreo, naval ou espacial, comunicação, computação, controle de processos industriais, instrumentos de análise e de pesquisa, esporte, medicina e muitas outras atividades. Para a grande maioria das pessoas é difícil imaginar alguma atividade humana que não dependa, direta ou indiretamente, de algum sistema eletrônico. Entende-se a dependência indireta como sendo a produção de utensílios utilizados nas atividades humanas, a análise de seus resultados, o transporte de bens e a comercialização de bens. Dessa forma, a eletrônica está se tornando o maior mercado mundial, podendo ultrapassar o mercado automobilístico e o químico, tendo um valor atual estimado acima de um trilhão de dólares. No entanto, todos os dispositivos eletrônicos são baseados em materiais [1–4].

A qualidade e 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. Podemos citar o caso da aplicação de uma capa de revestimento de plástico nos fios da rede elétrica. Em aproximadamente um ano, o plástico estava todo despedaçado e no chão, ou seja, a escolha do tipo de plástico nesse caso não foi adequada para suportar a exposição aos raios solares. Essa má escolha foi um prejuízo grande para a empresa [1–4].

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. Essa ciência e essa engenharia englobam os seguintes aspectos dos materiais:

- a) a ciência e o entendimento básico dos materiais;
- b) a relação entre a estrutura, as propriedades e o desempenho de um material com seu processamento durante a confecção ou durante seu uso;
- c) as necessidades e as experiências sociais do uso dos materiais na confecção de produtos.

A Figura 1.1 sintetiza os aspectos dos materiais com os tipos de conhecimentos sobre os materiais e a relação entre o produto e o processamento de materiais.

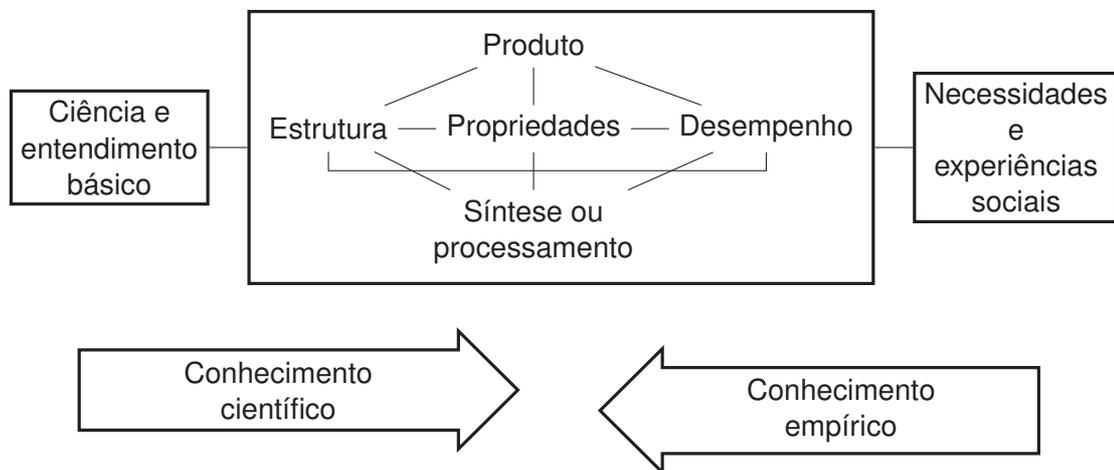


Figura 1.1 – Aspectos gerais de engenharia e ciência dos materiais.

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 pesquisador 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. Em todo o processo produtivo, o pesquisador deve considerar os seguintes aspectos na escolha do material para uma dada aplicação: as propriedades do material, a agressividade do meio onde será utilizado o produto e os aspectos econômicos do processo produtivo [1–4].

Frisamos que é importante que o pesquisador 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 [1–4].

Há um princípio básico de materiais que diz: “As propriedades de um material originam-se na sua estrutura interna”, ou seja, existe uma relação biunívoca entre propriedade e estrutura do material. A estrutura do material, no entanto, apresenta uma dependência estreita com a forma de seu processamento. Assim, há também uma relação das propriedades do material com as condições de seu processamento. A estrutura interna dos materiais envolve não apenas o tipo de átomo de sua constituição, mas também como eles se associam entre si, formando cristais, moléculas ou microestruturas. Como exemplo, temos:

- a) a molécula básica C_2H_4 (etileno) constitui um gás à temperatura ambiente;
- b) a polimerização em cadeia de 13 das mesmas moléculas básicas forma uma cera (sólido mole que se funde a $55^\circ C$);
- c) a polimerização de milhares das mesmas moléculas básicas resulta em um plástico chamado polietileno (sólido flexível).

Qualquer ação que cause uma modificação da estrutura interna do material afetará suas propriedades. Essas ações podem ocorrer durante o processamento, como parte deste, ou durante o uso do produto, por esforços e/ou condições ambientais. Como exemplo, temos:

- borracha e plásticos expostos à luz e ao ar por longo tempo sofrem um endurecimento;
- um semicondutor sofre danos, ou rompimentos de ligações químicas, quando exposto a radiação tipo nuclear ou espacial;
- um ímã perde sua polaridade magnética sob ação prolongada de um campo elétrico tipo radiofrequência;
- um fio elétrico é fortalecido por processo de trefilamento;
- processamentos térmicos dos materiais tais como recozimentos ou resfriamentos bruscos podem romper o material;
- metal rompe por fadiga sob esforço mecânico cíclico;
- uma trilha de interconexão elétrica pode sofrer um rompimento sob ação prolongada de uma corrente elétrica de alta densidade.

A propriedade física que apresenta a maior variação é a condutividade elétrica dos materiais, justamente a propriedade de maior interesse do pesquisador em eletricidade ou eletrônica. Esta propriedade pode variar de $10^{-18}\Omega^{-1}m^{-1}$ (quartzo, poliestireno) a $10^8\Omega^{-1}m^{-1}$ (prata, cobre), ou várias ordens de grandeza maiores que isso, no caso de supercondutores. Valores típicos são apresentados na Tabela 1.1, retirada de [5]; valores exatos dependem da temperatura, da estrutura interna e do processo de fabricação.

Para finalizar, apresentamos em seguida uma classificação dos materiais, com suas propriedades gerais:

Tabela 1.1 – Condutividade elétrica à temperatura ambiente ($T = 290K$).

Material	Substância	Condutividade $\Omega^{-1}\text{m}^{-1}$
Condutores	Prata	$6,30 \times 10^7$
	Cobre	$5,95 \times 10^7$
	Ouro	$4,52 \times 10^7$
	Alumínio	$3,77 \times 10^7$
	Ferro	$1,04 \times 10^7$
	Mercúrio	$1,04 \times 10^6$
	Nicromo	$1,00 \times 10^6$
	Manganês	$6,94 \times 10^5$
	Grafite	$7,14 \times 10^4$
Semicondutores	Água salgada (saturada)	$2,27 \times 10^1$
	Germânio	2,17
	Silício	$4,00 \times 10^{-4}$
Isolantes	Água (pura)	$4,00 \times 10^{-6}$
	Madeira	$10^{-8} - 10^{-11}$
	Vidro	$10^{-10} - 10^{-14}$
	Quartzo (fundido)	$\sim 10^{-16}$

- **Metais:** podem ser formados por combinação de elementos químicos metálicos; são bons condutores elétricos e térmicos, pois seus elétrons possuem boa mobilidade; são opacos, porque os elétrons absorvem a energia dos fótons de luz; são robustos, porém moldáveis.
- **Cerâmicas:** são compostas por combinação de elementos químicos metálicos e não-metálicos, como óxidos, nitretos e carbetos; como exemplo, temos argila, cimento, vidro, e outros; são bons isolantes elétricos e térmicos por não possuírem elétrons livres para condução; apresentam boa resistência a altas temperaturas e a ambientes adversos, pela alta estabilidade química; são materiais duros, porém quebradiços.
- **Polímeros:** são compostos orgânicos tipo $C + H +$ elemento não-metálico; apresentam estrutura molecular muito extensa; baixa densidade e alta flexibilidade; como exemplo temos plásticos, borracha e teflon.
- **Conjugados:** são compostos por mais de um dos materiais descritos acima; como exemplo, temos a fibra de vidro, que é formada por vidro embebido por material polimérico; dessa forma, obtém-se um material relativamente robusto, devido ao vidro, e relativamente flexível, devido ao polímero; permite explorar uma combinação das propriedades de diferentes materiais.
- **Biomateriais:** são aqueles, entre os materiais acima apresentados, biocompatíveis, ou seja, podem ser implantados num ser vivo sem sofrer reações com os tecidos e/ou produzir elementos tóxicos. Esses materiais podem substituir partes do corpo danificadas ou doentes. Como exemplos clássicos, temos a obturação e as próteses dentárias. Muitos outros materiais existem e outros novos vêm sendo desenvolvidos para serem utilizados na medicina, na veterinária e até mesmo na biologia de modo geral.
- **Semicondutores:** são compostos por materiais específicos e similares aos das cerâmicas; apresentam condutividade entre a dos metais e a dos isolantes; sua condutividade

pode ser moldada pela adição localizada de impurezas, o que permitiu a fabricação dos dispositivos e circuitos integrados eletrônicos. Os materiais semicondutores serão mais detalhados no próximo capítulo.

Capítulo 2

Os Semicondutores

2.1 Definição e Propriedades dos Semicondutores

Do ponto de vista da propriedade da condutividade elétrica os materiais podem ser agrupados em:

- a) isolantes ou dielétricos;
- b) condutores;
- c) supercondutores;
- d) semicondutores.

Os materiais pertencentes ao grupo a), são os materiais que, em condições padrão de pressão e temperatura, praticamente não apresentam elétrons livres em sua estrutura cristalina, ou seja, todos os elétrons estão fortemente ligados aos seus átomos ou as suas moléculas, não tendo liberdade de sair desta estrutura quando um campo elétrico externo é aplicado ao material. A Figura 2.2a ilustra as bandas de energia de um isolante típico, onde o tamanho da banda proibida revela que é necessário uma quantidade de energia muito grande para que um portador de carga possa saltar do nível mais alto da banda de valência para o nível mais baixo da banda de condução.

Ao grupo b) pertencem os materiais que, nas condições padrão de pressão e temperatura, apresentam uma quantidade grande de elétrons livres. Quando um campo elétrico externo é aplicado ao material, surge uma corrente elétrica que é o fluxo de elétrons, ou de portadores de carga, conforme o caso, em função do tempo que atravessa certa área de referência no material, conforme ilustrado na Figura 2.1.

A Figura 2.2b ilustra que a banda de condução de um condutor é muito pequena, por isso, os elétrons podem saltar da banda de valência para a banda de condução com facilidade.

Poucos materiais apresentam quase nenhuma resistência ao movimentos dos elétrons. Esses materiais pertencem ao grupo c). O fenômeno da supercondutividade ocorre quando certos materiais são resfriados a temperaturas muito baixas. Há um grande esforço para encontrar materiais que apresentam essa propriedade a temperatura ambiente.

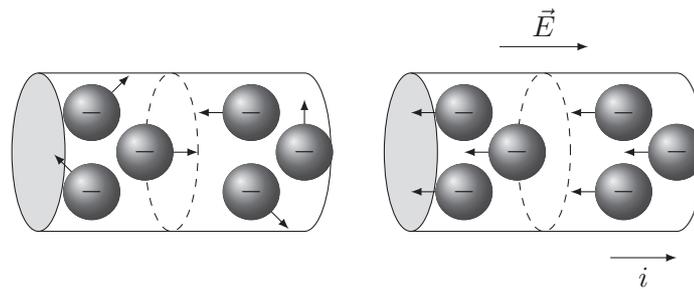


Figura 2.1 – Elétrons movendo-se livremente em um condutor e corrente elétrica dentro do condutor.

Por fim, os materiais pertencentes ao grupo d) têm suas características elétricas situadas entre as características dos dielétricos e as características dos condutores. Os semicondutores possuem resistividade elétrica no intervalo entre 10^{-4} a $10^7 \Omega \cdot \text{m}$, que são valores intermediários entre os bons condutores ($10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$) e bons isolantes (entre 10^{12} e $10^{20} \Omega \cdot \text{m}$). A Figura 2.2c ilustra o esquema de bandas de energia para a condutividade intrínseca de um semicondutor.

Na prática, um semicondutor puro perfeito torna-se isolante no zero absoluto (0 K), pois todos os elétrons estão na banda de valência e estão ligados aos átomos e moléculas que constituem o cristal semicondutor. Logo, não há condutividade e a resistividade é máxima. A Figura 2.2 ilustra a existência da lacuna de energia E_g , que é a diferença de energia entre o ponto superior da banda de valência e o ponto inferior da banda de condução. As propriedades de um semicondutor dependem das impurezas, das excitações térmicas, dos defeitos da rede ou dos desvios de suas composições químicas. A medida que a temperatura do cristal aumenta, os elétrons que estão nos estados da banda de valência de maior energia adquirem energia suficiente para saltar a lacuna de energia E_g e ocupar os estados menos energéticos da banda de condução, deixando espaços vazios na banda de valência. Esses espaços são denominados de buracos [6].

Em um semicondutor a condutividade é zero a 0 K, porque todos os estados da banda de valência estão cheios e todos os estados da banda de condução estão vazios. À medida que a temperatura cresce, os elétrons ficam termicamente excitados, pulando da banda de valência para a banda de condução, na qual eles se tornam móveis.

Além da energia térmica, podemos controlar a densidade de portadores de carga mediante a adição de impurezas na rede cristalina. Essas impurezas são átomos com valência maior ou menor do que o átomo que forma a rede cristalina do cristal semicondutor. Como exemplo, a adição de boro (B) ao silício (Si), na proporção de um átomo de boro para 10^5 átomos de silício, provoca um aumento de um fator de 10^3 na condutividade do silício puro para a temperatura ambiente. O processo de adição de impureza é denominado dopagem [6].

Para compreendermos o efeito da dopagem nos cristais semicondutores, consideraremos o silício e o germânio (Ge) que se cristalizam com a estrutura do diamante, ou seja, cada átomo forma quatro ligações covalentes com seus vizinhos mais próximos, que corresponde a valência química quatro. Se colocarmos um átomo de valência química igual a cinco como, por exemplo, o fósforo (P), o arsênio (As) ou o antimônio (Sb), no lugar de um átomo de silício ou germânio, existirá um elétron de valência libertado após as quatro ligações covalentes serem feitas, como

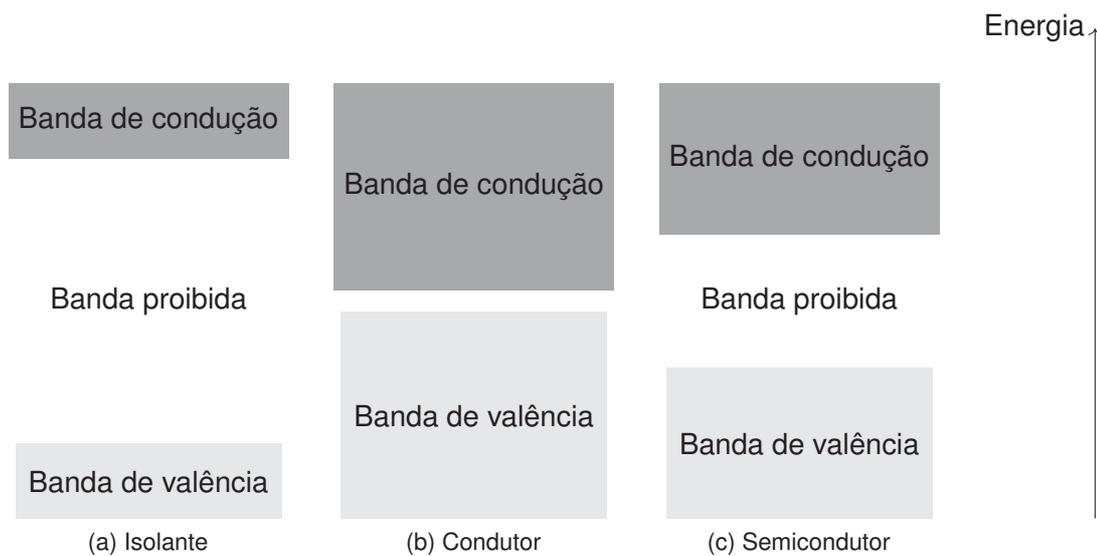


Figura 2.2 – Esquema de banda para a condutividade intrínseca num semicondutor: 2.2a) isolante, 2.2b) condutor e 2.2c) semicondutor.

indicado na Figura 2.3a.

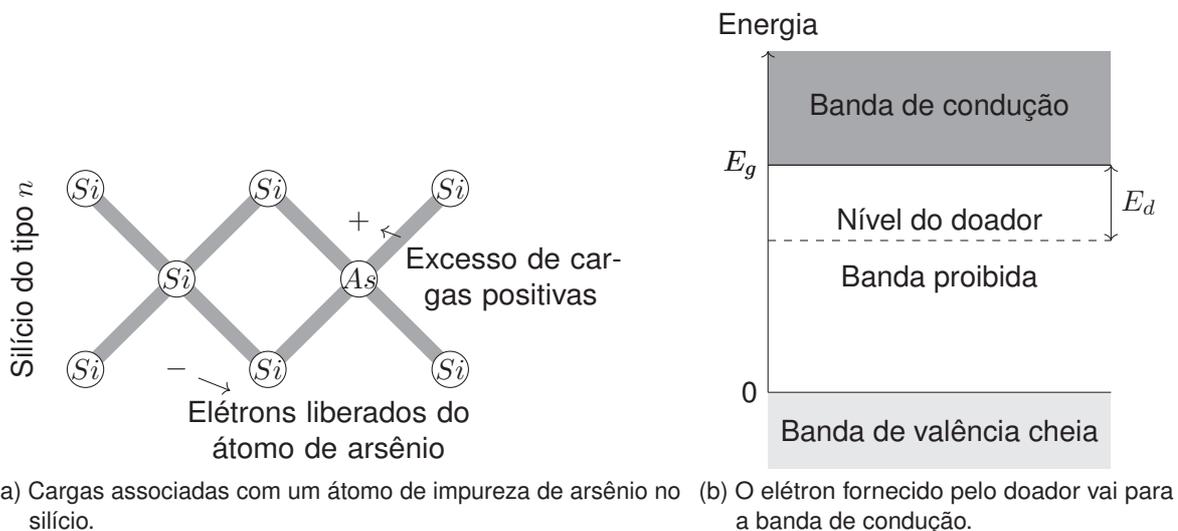


Figura 2.3 – Impureza doadora de elétrons no cristal semicondutor.

Na Figura 2.3a, o silício tem quatro elétrons na camada de valência e o arsênio tem cinco. Assim, os quatro elétrons do arsênio formam ligações covalentes tetraédricas e o quinto elétron torna-se disponível para condução. Desta forma, percebemos que o cristal semicondutor dopado com um átomo doador de elétrons passa a ficar com excesso de elétrons, esses elétrons são elétrons livres, melhorando a condutividade do cristal semicondutor. Esse cristal é denominado *tipo n*. Notemos que, eletricamente falando, o cristal continua neutro pois ele conta com a mesma quantidade de elétrons e de prótons.

Em um semicondutor dopado tipo *n* o nível de energia introduzido por uma impureza doadora

está a uma pequena distância E_d da banda de condução (veja a Figura 2.3b), dada por:

$$E_d = \frac{e^4 m_e^*}{2 \epsilon^2 \hbar^2}, \tag{2.1}$$

onde e é a carga elétrica elementar, m_e^* é a massa efetiva do elétron, ϵ é a constante eletrostática do meio e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ (h é a constante de Planck).

A Tabela 2.1, retirada de [6] (p. 228), dispõe as energias de ionização dos doadores de impurezas pentavalentes no germânio e no silício.

Tabela 2.1 – Energia de ionização E_d dos doadores de impurezas pentavalentes no germânio e no silício, em meV.

	<i>P</i>	<i>As</i>	<i>Sb</i>
<i>Si</i>	45,0	49,0	39,0
<i>Ge</i>	12,0	12,7	9,6

Como um elétron pode estar ligado a uma impureza pentavalente, um buraco também pode. Para isso, basta colocar um átomo trivalente como, por exemplo, o boro (*B*), o alumínio (*Al*), o gálio (*Ga*) ou o índio (*In*), no lugar do átomo de germânio ou de silício. Essas impurezas são denominadas de impurezas aceitadoras ou receptoras porque elas podem receber um elétron da camada de valência, deixando um buraco nessa banda. Veja a Figura 2.4a.

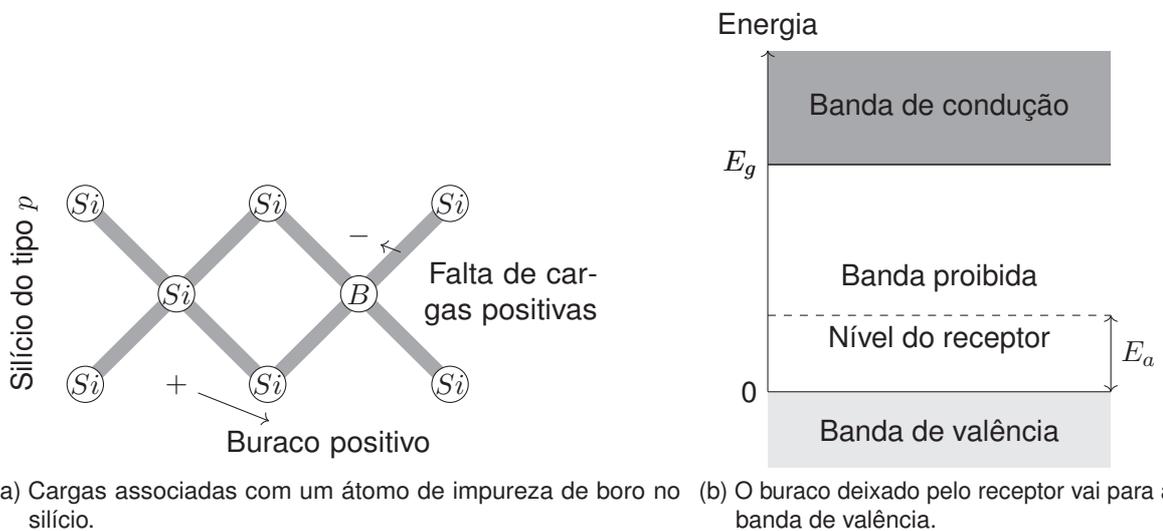


Figura 2.4 – Cargas associadas com um átomo de impureza de boro no silício.

Na Figura 2.4b, o silício tem quatro elétrons na camada de valência e o boro tem três. Assim, para realizar as ligações covalentes tetraédicas o átomo de boro deve receber um elétron da ligação $Si - Si$, deixando um buraco na camada de valência. Em um semiconductor dopado tipo *p* o nível de energia introduzido por uma impureza aceitadora está a uma pequena distância E_a da banda de valência, como ilustra a Figura 2.4b. Novamente, o cristal semiconductor permanece neutro, como um todo.

O cristal semiconductor dopado com átomos receptores é denominado *tipo p* por conter buracos com carga positiva na camada de valência. A Expressão (2.1) também é utilizada para

calcular a energia de aceitação E_a , bastando trocar a massa efetiva do elétron m_e^* pela massa efetiva do buraco m_h^* .

A Tabela 2.2, retirada de [6] (p. 228), fornece as energias típicas de ionização dos receptores trivalentes para o germânio e o silício.

Tabela 2.2 – Energia de ionização E_a dos receptores de impurezas trivalentes no germânio e no silício, em meV.

	<i>B</i>	<i>Al</i>	<i>Ga</i>	<i>In</i>
<i>Si</i>	45,0	57,0	65,0	16,0
<i>Ge</i>	10,4	10,2	10,8	11,2

Quando aplicamos um campo elétrico \vec{E} em um condutor surge uma corrente elétrica i . Analogamente ao que ocorre com o elétron dentro do condutor, o elétron dentro do semicondutor terá o mesmo comportamento, ou seja, ele mover-se-á no sentido contrário ao sentido do campo elétrico \vec{E} . Por se comportar como uma partícula positiva, o buraco deslocar-se-á no mesmo sentido do campo elétrico \vec{E} .

Em todos os casos os portadores (elétrons ou buracos) entram em movimento ordenado, criando um fluxo de cargas. Podemos definir a mobilidade eletrônica μ como a razão entre o módulo da velocidade de arrasto e o módulo do campo elétrico \vec{E} , como expresso por:

$$\mu = \frac{|v|}{E} \quad (2.2)$$

2.2 O Semicondutor ZnS

O ZnS (sulfeto de zinco) é um semicondutor de gap largo [7–14] que se cristaliza na forma estrutural wurtzite (WZ) ou zinblende (ZB), como ilustra a Figura 2.5, retirada de [15]. Nas últimas décadas temos assistido ao aumento do 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 opto-eletrônicos de grande interesse tecnológico e industrial (como diodos emissores na faixa do azul, lasers azuis, etc.) [16–21]. O ZnS tem sido investigado em uma série de novos materiais de aplicação tecnológica como, por exemplo, em películas finas e dispositivos eletroluminescentes [22–24]. 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 [25, 26]. Um estudo atual a respeito do ZnS é a sua possível aplicabilidade em telas (displays) transparentes [27], como ilustrado na Figura 2.6, retirada de [28].

A Tabela 2.3, retirada de [29] e [30], contém alguns parâmetros fundamentais do sulfeto de zinco nas formas *wurtzite* (WZ) e *zinblende* (ZB). Na Tabela 2.3 ϵ_0 é a constante eletrostática estática, ϵ_∞ é a constante eletrostática de alta frequência, ω é a frequência dos fônons, m_e^* é a massa efetiva do elétron e m_0 é a massa de repouso do elétron.

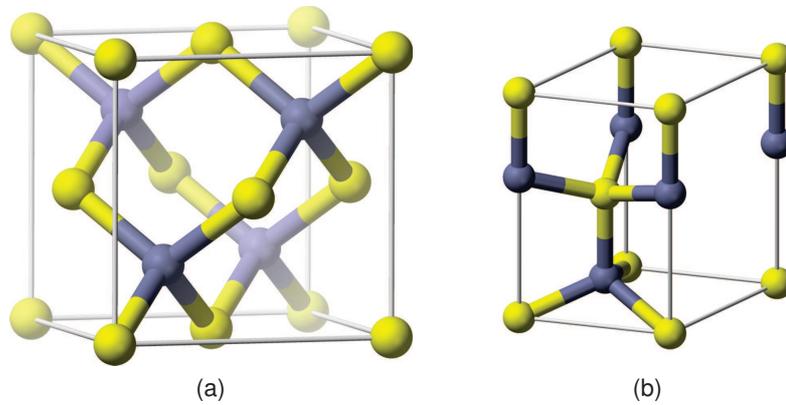


Figura 2.5 – Estrutura cristalina do semicondutor ZnS em suas duas fases: (a) *zincblende* e (b) *wurtzite*.



Figura 2.6 – TV e Smartphone usando tecnologia de telas transparentes.

Tabela 2.3 – Dados do Sulfeto de Zinco.

Forma	ϵ_0	ϵ_∞	ω (10^{13}Hz)	m_e^*
WZ	9,60	5,70	6,47	$0,28m_0$
ZB	8,32	5,15	6,62	$0,34m_0$

Capítulo 3

Equações de Movimento para um Elétron em um Semicondutor Submetido a um Campo Elétrico

3.1 Introdução

Consideraremos um semicondutor polar de *gap* direto dopado tipo *n* com concentração de impurezas $< 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Nesta condição não é necessário levar em consideração o espalhamento dos portadores de carga (elétrons) pelas impurezas [31]. O movimento dos portadores será governado por uma força externa \vec{F}_{ext} e por uma força de resistência ao movimento \vec{f} . Para descrever tal situação utilizaremos uma equação semi-clássica baseada na segunda lei de Newton, ou seja:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{P}}{dt} &= \sum \vec{F} \\ \frac{d\vec{P}}{dt} &= \vec{F}_{ext} + \vec{f} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Na Equação (3.1) aplicaremos a forma quântica do momento total \vec{P} e utilizaremos a expressão quântica para \vec{f} .

3.2 Momento Total Quântico

Como utilizaremos a forma semi-clássica da Segunda Lei de Newton, torna-se necessário quantizar o momento do elétron.

Em 1924, Louis de Broglie postulou que partículas também possuíam comprimentos de ondas λ , tendo comportamento ondulatório. Assim, a quantidade de movimento \vec{p} de uma partícula pode ser calculada, em módulo, pela Equação (3.2).

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (3.2)$$

onde h é a constante de Planck.

Um elétron livre tem uma função de onda plana do tipo [32]

$$\Psi = ce^{i(kx - \omega t)} = c[\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)] \quad (3.3)$$

sendo c uma constante arbitrária, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ é o número de onda angular e $\omega = \frac{2\pi}{T}$ é a frequência angular.

Com isso, podemos reescrever a Equação (3.2), obtendo:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\frac{2\pi}{k}} = \frac{h}{2\pi}k = \hbar k \quad (3.4)$$

Usando o formalismo quântico, o momento total \vec{P} é:

$$\vec{P} = \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} f_{\vec{k}}(t) \quad (3.5)$$

onde $f_{\vec{k}}(t)$ é a função de distribuição dos elétrons dada por:

$$f_{\vec{k}}(t) = Ae^{-b(\vec{k} - m_e^* \vec{v}/\hbar)^2} \quad (3.6)$$

onde $\vec{v} \equiv \vec{v}(t)$ e:

$$b \equiv \frac{\hbar^2}{2m_e^* kT} \quad (3.7)$$

$$A \equiv \frac{4}{V}(\pi b)^{3/2}. \quad (3.8)$$

A Equação (3.6) é chamada de função de distribuição tipo Maxwell-Boltzmann. Substituindo a Equação (3.6) na Equação (3.5) temos:

$$\begin{aligned} \vec{P} &= \sum_{\vec{k}} \hbar A \vec{k} e^{-b(\vec{k} - m_e^* \vec{v}/\hbar)^2} = \hbar A \sum_{\vec{k}} \vec{k} e^{-b(k^2 - 2m_e^* \vec{k} \cdot \vec{v}/\hbar + m_e^{*2} v^2/\hbar^2)} \\ \vec{P} &= \hbar A e^{-bm_e^{*2} v^2/\hbar^2} \sum_{\vec{k}} \vec{k} e^{-b(k^2 - 2m_e^* \vec{k} \cdot \vec{v}/\hbar)} \end{aligned}$$

A soma em \vec{k} pode ser transformada em uma integral usando a expressão [33]:

$$\sum_{\vec{k}} \cdots \rightarrow \frac{V}{4\pi^3} \int \int \int \cdots d^3k$$

onde V é o volume da amostra. Desta forma, temos:

$$\begin{aligned} \vec{P} &= \hbar A e^{-bm_e^{*2} v^2/\hbar^2} \frac{V}{4\pi^3} \int \int \int \vec{k} e^{-b(k^2 - 2m_e^* \vec{k} \cdot \vec{v}/\hbar)} d^3k \\ \vec{P} &= \hbar A e^{-bm_e^{*2} v^2/\hbar^2} \frac{V}{4\pi^3} \int \int \int \vec{k} e^{-bk^2} e^{2bm_e^* \vec{k} \cdot \vec{v}/\hbar} d^3k \end{aligned} \quad (3.9)$$

Vamos definir o campo elétrico \vec{E} na direção do eixo z . O vetor de onda \vec{k} em três dimensões é:

$$\vec{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j} + k_z \hat{k} \quad (3.10)$$

com as componentes cartesianas relacionadas com as componentes esféricas pelas expressões:

$$k_x = k \sin \theta \cos \phi \quad (3.11a)$$

$$k_y = k \sin \theta \sin \phi \quad (3.11b)$$

$$k_z = k \cos \theta \quad (3.11c)$$

O produto escalar $\vec{k} \cdot \vec{v}$ torna-se $kv \cos \theta$ e a parte diferencial d^3k passa a ser $k^2 \sin \theta dk d\theta d\phi$. Substituindo (3.11a) à (3.11c) na Equação (3.9), temos:

$$\begin{aligned} \vec{P} = \hbar A e^{-bm_e^* v^2 / \hbar^2} \frac{V}{4\pi^3} \left\{ \int \int \int k \sin \theta \cos \phi e^{-bk^2} e^{2bm_e^* kv \cos \theta / \hbar} k^2 \sin \theta dk d\theta d\phi \hat{i} + \right. \\ \left. \int \int \int k \sin \theta \sin \phi e^{-bk^2} e^{2bm_e^* kv \cos \theta / \hbar} k^2 \sin \theta dk d\theta d\phi \hat{j} + \right. \\ \left. \int \int \int k \cos \theta e^{-bk^2} e^{2bm_e^* kv \cos \theta / \hbar} k^2 \sin \theta dk d\theta d\phi \hat{k} \right\} \end{aligned}$$

Definindo $a = 2m_e^* bv / \hbar$, temos:

$$\begin{aligned} \vec{P} = \hbar A e^{-bm_e^* v^2 / \hbar^2} \frac{V}{4\pi^3} \left\{ \int_0^{2\pi} \cos \phi d\phi \int_0^\infty k^3 e^{-bk^2} dk \int_0^\pi \sin^2 \theta e^{ak \cos \theta} d\theta \hat{i} + \right. \\ \left. \int_0^{2\pi} \sin \phi d\phi \int_0^\infty k^3 e^{-bk^2} dk \int_0^\pi \sin^2 \theta e^{ak \cos \theta} d\theta \hat{j} + \right. \\ \left. \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty k^3 e^{-bk^2} dk \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta e^{ak \cos \theta} d\theta \hat{k} \right\} \end{aligned}$$

As duas primeiras integrais em ϕ se anulam, fazendo com que o vetor momento total \vec{P} tenha componente somente na direção \hat{k} . Assim:

$$\begin{aligned} P &= \hbar A e^{-bm_e^* v^2 / \hbar^2} \frac{V}{4\pi^3} 2\pi \int_0^\infty k^3 e^{-bk^2} \frac{2}{a^2 k^2} [ak \cosh(ak) - \sinh(ak)] dk \\ &= \hbar \frac{A}{a^2} e^{-bm_e^* v^2 / \hbar^2} \frac{V}{\pi^2} \left\{ a \int_0^\infty k^2 e^{-bk^2} \cosh(ak) dk - \int_0^\infty \sinh(ak) dk \right\} \\ &= \hbar \frac{A}{a^2} e^{-bm_e^* v^2 / \hbar^2} \frac{V}{\pi^2} \left\{ a \frac{(a^2 + 2b)\sqrt{\pi} e^{a^2/4b}}{8b^{5/2}} - \frac{a\sqrt{\pi} e^{a^2/4b}}{4b^{3/2}} \right\} \\ &= \hbar \frac{A}{a} e^{-bm_e^* v^2 / \hbar^2} \frac{V}{\pi^{3/2}} \frac{e^{\frac{4b^2 m_e^{*2} v^2}{\hbar^2 4b}}}{4b^{3/2}} \left\{ \frac{a^2 + 2b}{2b} - 1 \right\} \\ &= \hbar \frac{A}{a} e^{-bm_e^* v^2 / \hbar^2} \frac{V}{\pi^{3/2}} \frac{e^{bm_e^* v^2 / \hbar^2} a^2}{4b^{3/2}} \frac{a^2}{2b} \end{aligned}$$

$$P = \hbar \frac{4}{V} (\pi b)^{3/2} \frac{V}{\pi^{3/2}} \frac{1}{4b^{3/2}} \frac{a}{2b} = \hbar \frac{2bm_e^*v/\hbar}{2b}$$

e, finalmente,

$$P(t) = m_e^*v(t) \quad (3.12)$$

Substituindo a Equação (3.12) na Equação (3.1) temos então:

$$m_e^* \frac{dv(t)}{dt} = \vec{F}_{ext} + \vec{f} \quad (3.13)$$

3.3 Resolução da Equação (3.1)

A força elétrica \vec{F}_{el} que atua sobre um elétron é oposta a orientação do vetor campo elétrico \vec{E} que atua sobre o elétron, conforme ilustra a Figura 3.1.

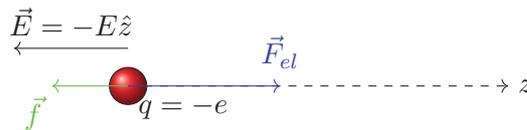


Figura 3.1 – Esquema das forças que atuam sobre o elétron quando um campo elétrico \vec{E} passa a atuar sobre o elétron. Note que o movimento do elétron é oposto à direção do campo elétrico \vec{E} . Os vetores não estão em escala.

A força elétrica é dada por:

$$\begin{aligned} \vec{F}_{el} &= q\vec{E} = (-e)(-E\hat{z}) \\ \vec{F}_{el} &= eE\hat{z} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Como o elétron está se movendo dentro do material, há uma *força de resistência* \vec{f} ao movimento do elétron. Consideraremos que essa força é proporcional à velocidade \vec{v} do elétron, ou seja:

$$\vec{f} = -\alpha\vec{v}. \quad (3.15)$$

onde α é um parâmetro que está associado à resistividade elétrica do semicondutor.

Substituindo as Equações (3.14) e (3.15) na Equação (3.13), temos:

$$\begin{aligned} \vec{F} &= eE\hat{i} - \alpha\vec{v} \\ m_e^*\vec{a} &= eE\hat{i} - \alpha\vec{v} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Como o movimento ocorre ao longo de um único eixo, podemos escrever a equação anterior como:

$$m_e^*a = eE - \alpha v$$

$$m_e^* \frac{dv}{dt} = eE - \alpha v \quad (3.17)$$

Notamos aqui uma semelhança na estrutura da Equação (3.17) com a equação de Newton-Langevin [34]. A Equação (3.17) pode ser solucionada de forma exata da seguinte maneira:

$$m_e^* dv = (eE - \alpha v) dt \Rightarrow \frac{m_e^* dv}{eE - \alpha v} = dt$$

$$\frac{m_e^* dv}{-(-eE + \alpha v)} = dt \Rightarrow \frac{m_e^* dv}{\alpha v - eE} = -dt \Rightarrow \frac{m_e^* dv}{eE \left(\frac{\alpha v}{eE} - 1 \right)} = -dt \Rightarrow \frac{dv}{\left(\frac{\alpha v}{eE} - 1 \right)} = -\frac{eE}{m_e^*} dt.$$

Definindo $\Gamma = \frac{\alpha}{eE}$, temos:

$$\frac{dv}{\Gamma v - 1} = -\frac{eE}{m_e^*} dt.$$

Integrando,

$$\int_0^v \frac{dv}{\Gamma v - 1} = -\int_0^t \frac{eE}{m_e^*} dt$$

e usando:

$$\int \frac{dx}{\Gamma x - 1} = \frac{\ln(\Gamma x - 1)}{\Gamma}$$

temos:

$$\frac{\ln(\Gamma v - 1)}{\Gamma} \Big|_0^v = -\frac{eE}{m_e^*} t \Rightarrow \ln(\Gamma v - 1) \Big|_0^v = -\frac{eE\Gamma}{m_e^*} t \Rightarrow \ln(\Gamma v - 1) - \ln(-1) = -\frac{eE\Gamma}{m_e^*} t$$

$$\ln\left(\frac{\Gamma v - 1}{-1}\right) = -\frac{eE\Gamma}{m_e^*} t \Rightarrow \ln(1 - \Gamma v) = -\frac{eE\Gamma}{m_e^*} t \Rightarrow 1 - \Gamma v = e^{-eE\Gamma t/m_e^*} \Rightarrow 1 - e^{-eE\Gamma t/m_e^*} = \Gamma v,$$

lembrando que $\Gamma = \frac{\alpha}{eE}$, temos:

$$1 - e^{-\alpha t/m_e^*} = \frac{\alpha}{eE} v.$$

Isolando v , ficamos com:

$$v(t) = \frac{eE}{\alpha} \left[1 - e^{-\alpha t/m_e^*} \right] \quad (3.18)$$

Utilizando a Equação (3.18) podemos encontrar a equação da posição do elétron, lembrando que $v = \frac{dx}{dt}$. Dessa forma,

$$\frac{dx}{dt} = \frac{eE}{\alpha} \left[1 - e^{-\alpha t/m_e^*} \right] \Rightarrow dx = \frac{eE}{\alpha} \left[1 - e^{-\alpha t/m_e^*} \right] dt \Rightarrow \int_0^x dx = \frac{eE}{\alpha} \int_0^t \left[1 - e^{-\alpha t/m_e^*} \right] dt$$

$$x = \frac{eE}{\alpha} \left[t + \frac{m_e^*}{\alpha} e^{-\alpha t/m_e^*} \right] \Big|_0^t \Rightarrow x = \frac{eE}{\alpha} \left[t + \frac{m_e^*}{\alpha} e^{-\alpha t/m_e^*} - 0 - \frac{m_e^*}{\alpha} e^0 \right]$$

$$x = \frac{eE}{\alpha} \left[t + \frac{m_e^*}{\alpha} e^{-\alpha t/m_e^*} - \frac{m_e^*}{\alpha} \right] \Rightarrow x = \frac{eE}{\alpha} \left[t + \frac{m_e^*}{\alpha} \left(e^{-\alpha t/m_e^*} - 1 \right) \right]$$

$$x(t) = \frac{eE}{\alpha} \left[t - \frac{m_e^*}{\alpha} \left(1 - e^{-\alpha t/m_e^*} \right) \right] \quad (3.19)$$

Nas Equações (3.18) e (3.19) o parâmetro α (veja Apêndice A) é dado por [35]:

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \frac{2}{e^{2z} - 1} k_1(z). \quad (3.20)$$

As constantes γ e z são dadas por:

$$\gamma = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \quad (3.21)$$

$$z = \frac{\hbar \omega}{2k_B T} \quad (3.22)$$

Na Equação (3.21), ϵ_0 é a constante eletrostática estática e ϵ_∞ é a constante eletrostática de alta frequência. Nas Equações (3.20) e (3.22) ω é a frequência dos fônons, k_B é a constante de Boltzmann cujo valor é aproximadamente $1,38 \times 10^{-16}$ erg/K e T é a temperatura da rede cristalina e \hbar é $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, onde $h \approx 6,626 \times 10^{-17}$ erg·s é a constante de Planck. Na Equação (3.20) m_e^* é a massa efetiva do elétron e $k_1(z)$ é a função modificada de segunda espécie de Bessel.

Capítulo 4

Caracterização do Transporte Eletrônico do Semicondutor Sulfeto de Zinco (ZnS)

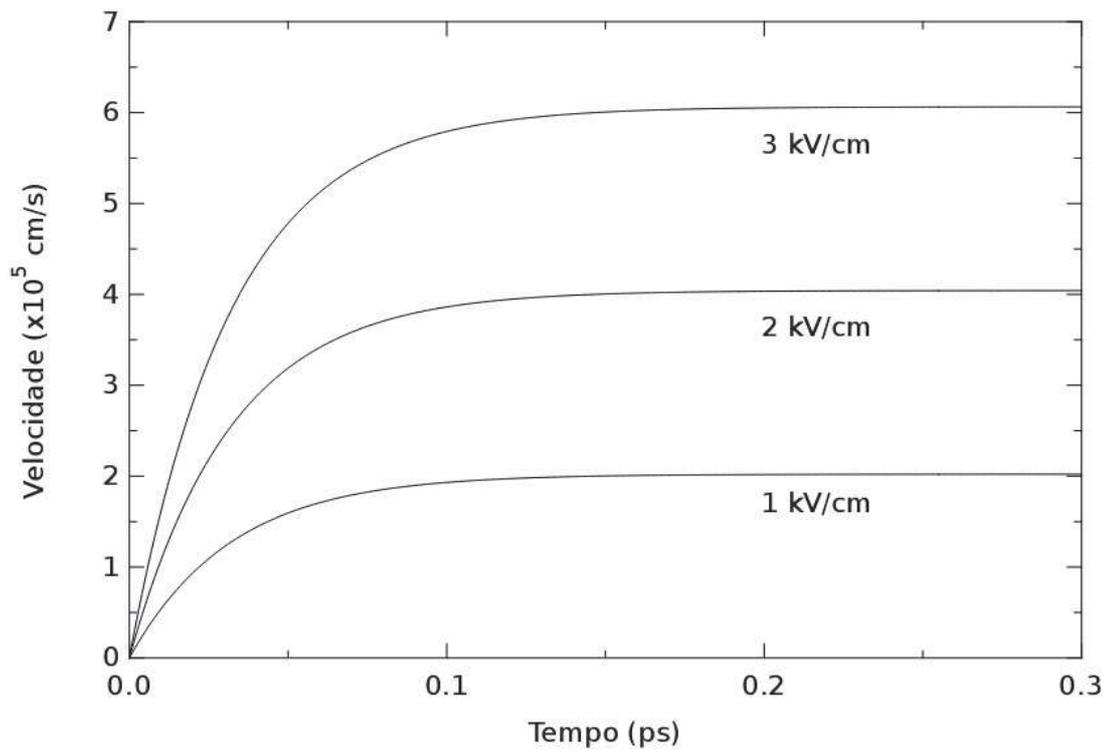
4.1 Estado Transitório

Inicialmente, não há forças externas atuando sobre os elétrons no semicondutor. Com a aplicação de um campo elétrico externo \vec{E} passa a haver uma força atuando sobre os elétrons. 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 \vec{E} . Ao mesmo tempo, o elétron passa a sofrer a ação de forças dissipativas devido à colisões com a estrutura cristalina do semicondutor.

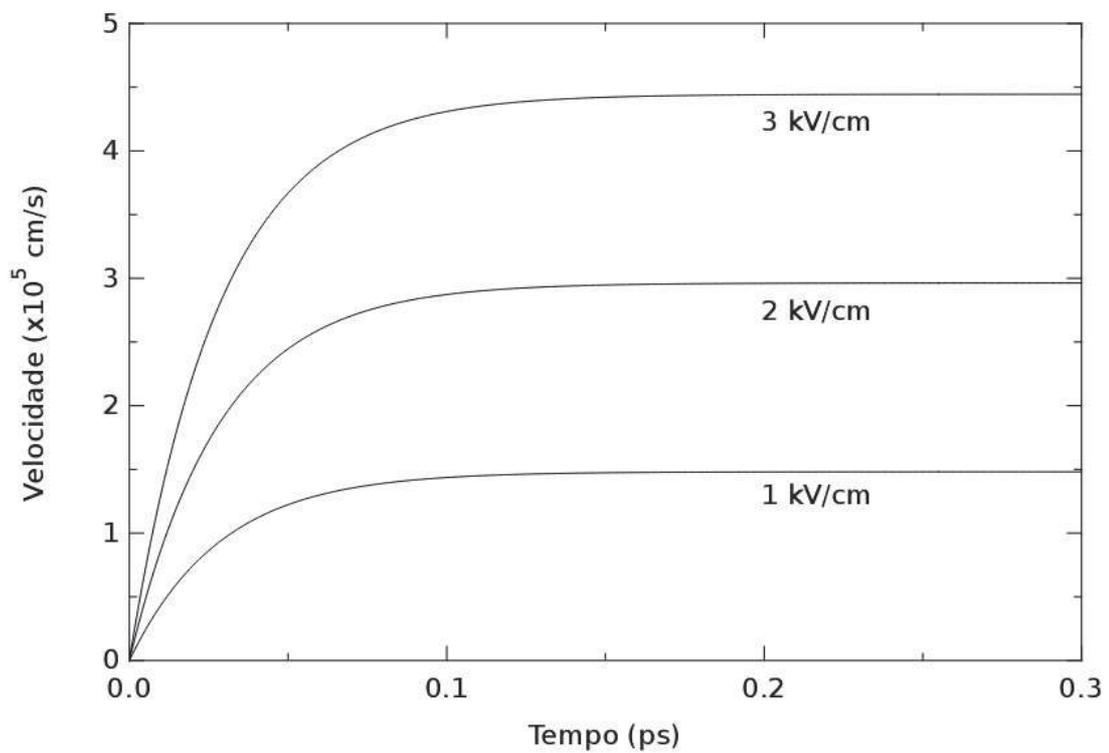
Utilizamos a Equação (3.18), demonstrada na Seção 3.3, do Capítulo 3 e os dados contidos na Tabela 2.3 da Seção 2.2 do Capítulo 2 para plotar a velocidade do elétron em função do tempo em dois semicondutores de sulfeto de zinco (ZnS). Um com estrutura tipo *wurtzite* (WZ) e outro com estrutura tipo *zinblende* (ZB). No Anexo A está o programa desenvolvido para obter numericamente a velocidade em função do tempo.

Observando a Figura 4.1 notamos que a velocidade do elétron no semicondutor ZnS com estrutura ZB é menor que na estrutura WZ. Além disso, nos primeiros 0,25 ps, a velocidade cresce rapidamente e, após 0,25 ps, a velocidade tende a se tornar constante.

Utilizando a Equação (3.19), determinamos a posição do elétron no semicondutor, em função do tempo, conforme ilustrado na Figura 4.2. Analisando a Figura 4.2, notamos que o elétron percorre uma distância maior no cristal semicondutor ZnS na forma WZ. Essas informações possibilitam construir dispositivos com tamanhos específicos que podem levar ao dimensionamento mais eficiente dos custos de produção destes dispositivos.

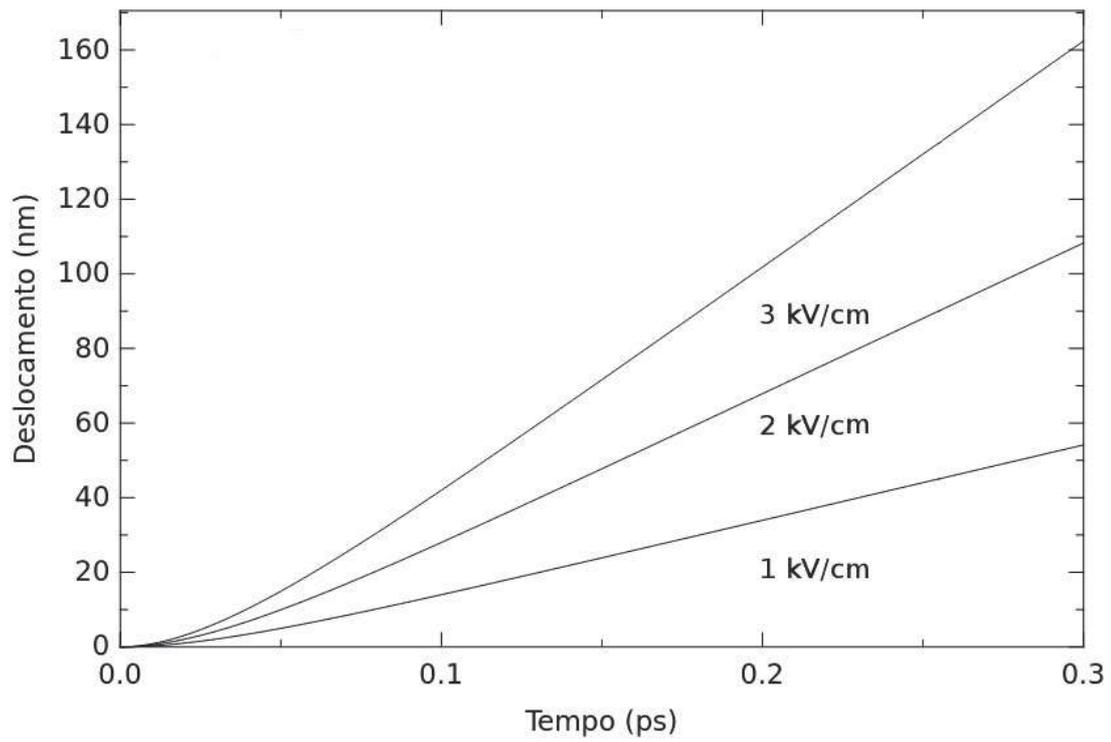


(a)

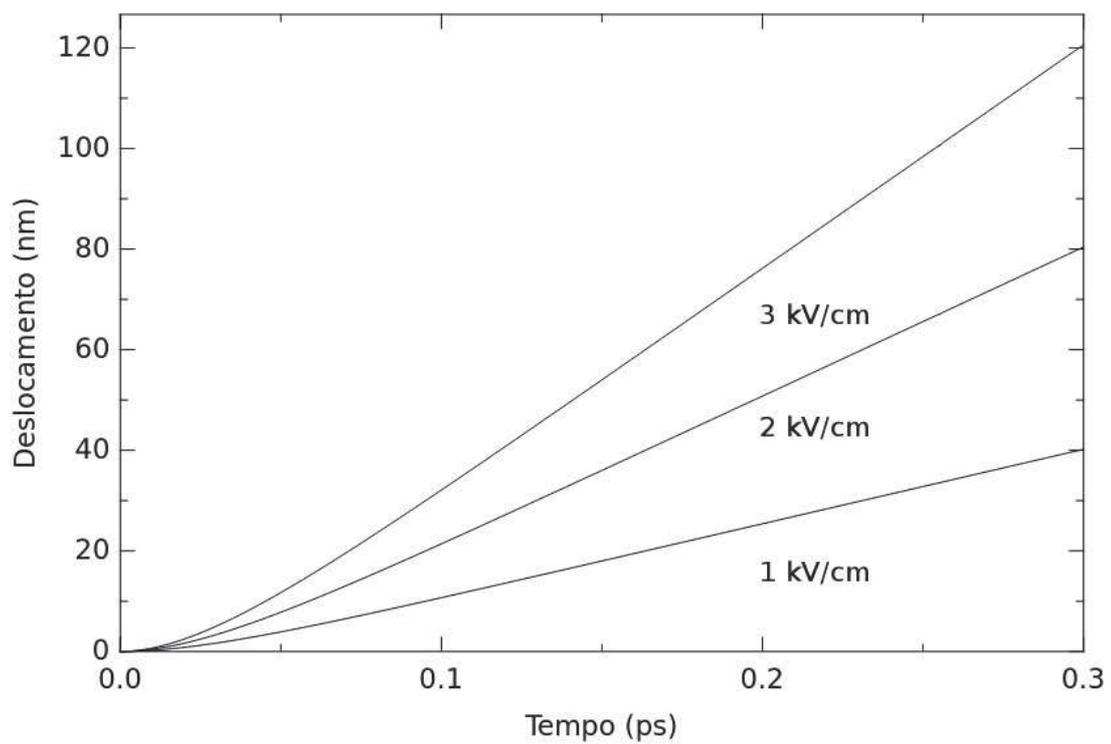


(b)

Figura 4.1 – Velocidade do elétron no estado transiente no sulfeto de zinco (ZnS). A figura (a) refere-se ao semicondutor ZnS com estrutura WZ. A figura (b) refere-se ao semicondutor ZnS com estrutura ZB.



(a)



(b)

Figura 4.2 – Posição do elétron no semicondutor sulfeto de zinco, na forma WZ (figura (a)) e na forma ZB (figura (b)).

Na Figura 4.3 notamos que, para um campo elétrico de 3 kV/cm, um elétron no cristal semicondutor de sulfeto de zinco na forma ZB desloca-se menos que no semicondutor na forma WZ.

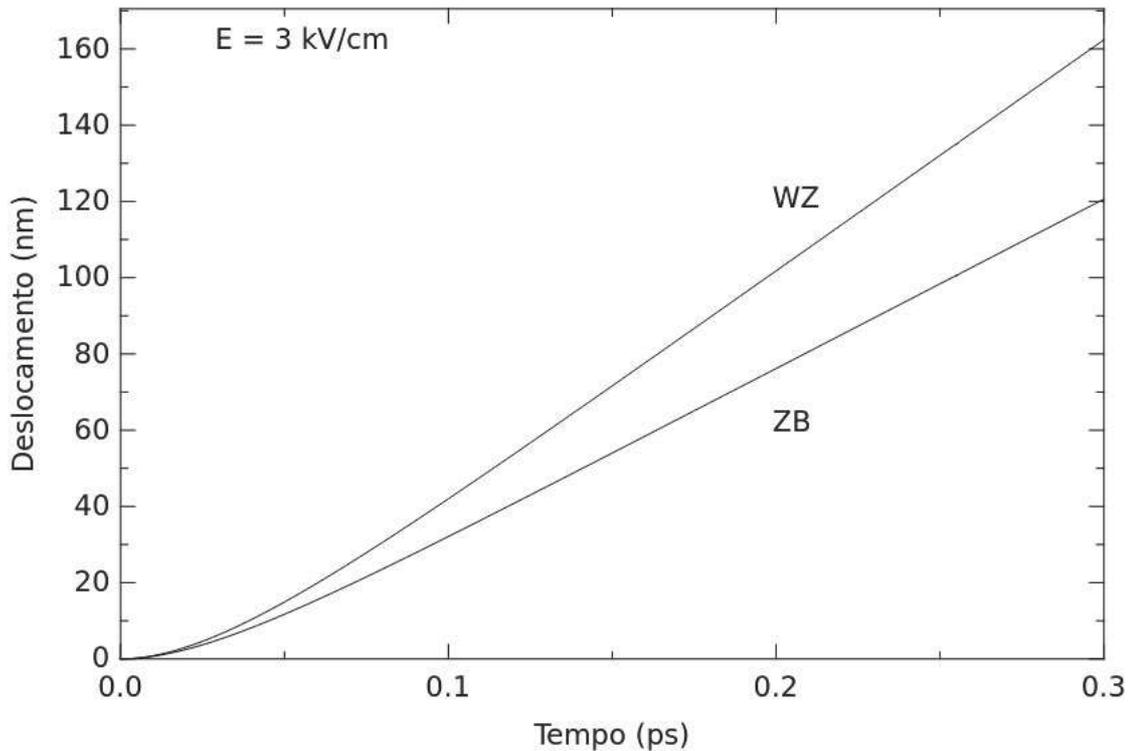


Figura 4.3 – Comparação do deslocamento do portador de carga entre as duas formas do ZnS para um campo elétrico de 3 kV/cm.

4.2 Estado Estacionário

No estado estacionário a velocidade de deslocamento do elétron torna-se constante, ou seja, a aceleração total do elétron é nula. Dessa forma a Equação (3.17) torna-se:

$$0 = eE - \alpha v \quad (4.1)$$

que nos fornece:

$$v = \frac{eE}{\alpha} \quad (4.2)$$

Utilizando os dados do semicondutor Sulfeto de Zinco da Tabela 2.3, plotamos o comportamento da velocidade de deriva do elétron no estado estacionário em função do campo elétrico, fornecido pela Equação (4.2), conforme apresentado na Figura 4.4. Observamos que na forma WZ a velocidade do elétron é maior que na forma ZB refletindo o comportamento do elétron no estado transitório, conforme a Figura 4.1.

Analisando a Figura 4.5 notamos que a forma WZ do semicondutor ZnS oferece uma mobilidade eletrônica maior (veja Equação (2.2)) que a forma ZB do semicondutor ZnS. Para

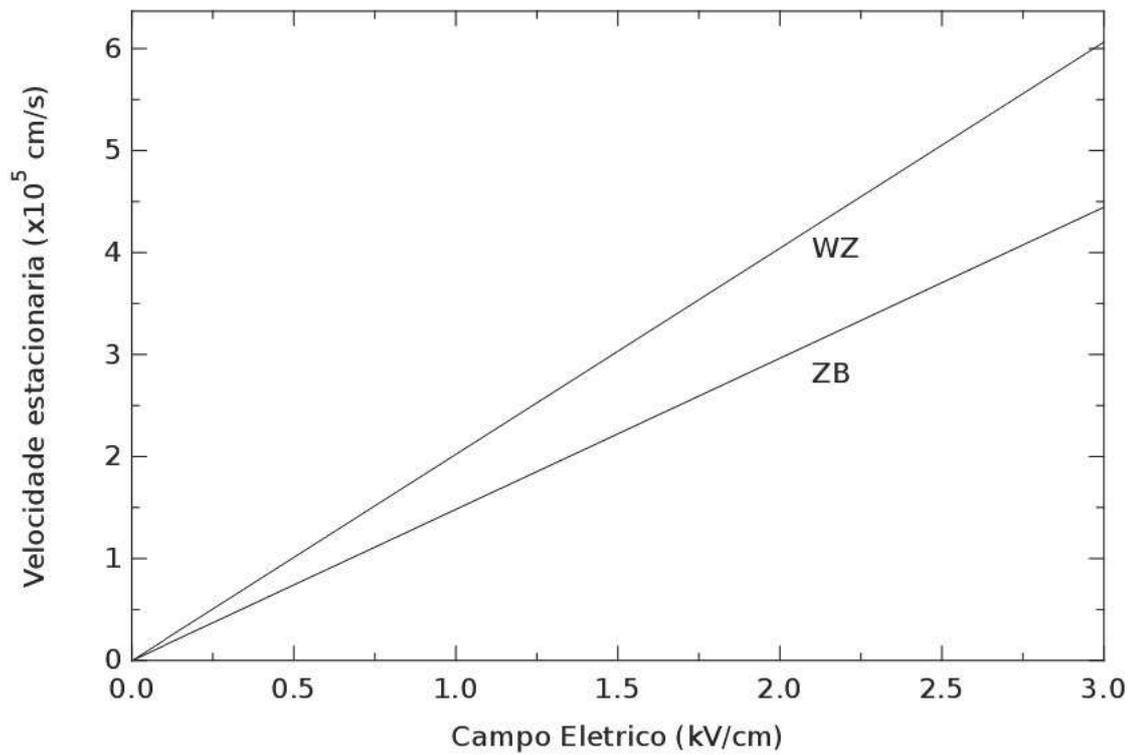


Figura 4.4 – A velocidade de deriva do elétron cresce de forma linear com o aumento da intensidade do campo elétrico.

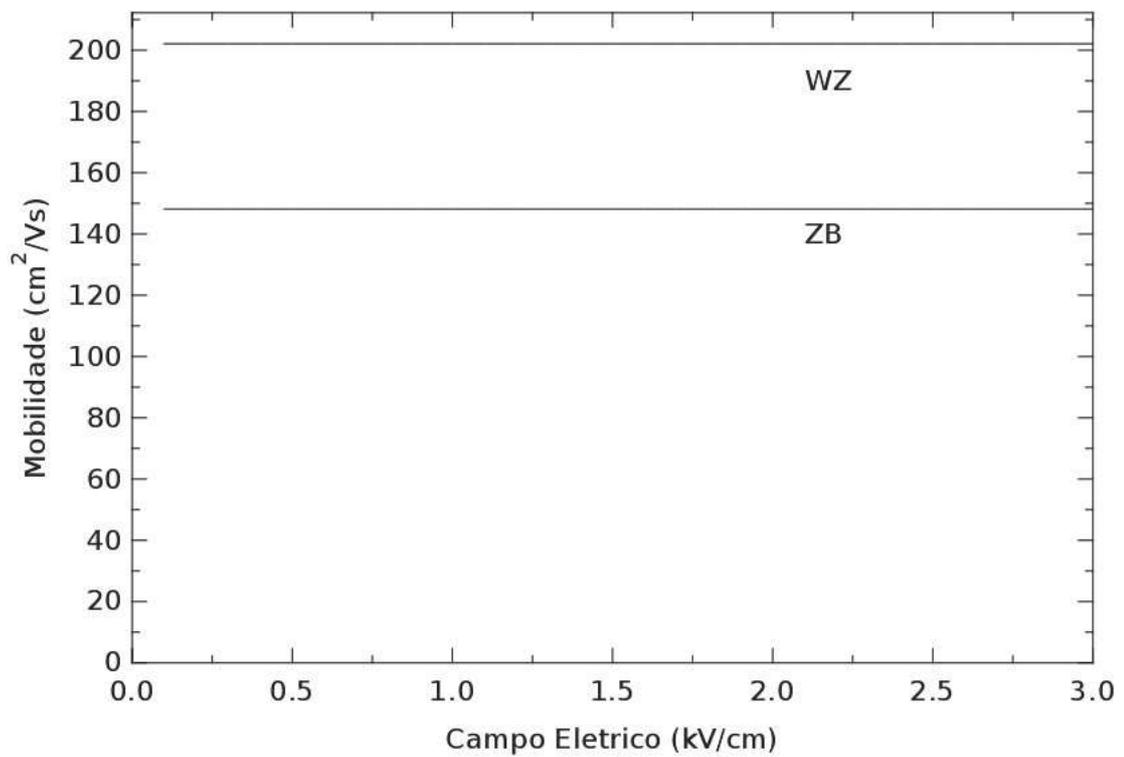


Figura 4.5 – Mobilidade eletrônica do semicondutor ZnS em suas duas formas: WZ e ZB.

a fase WZ foi encontrada uma mobilidade de $202 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ e para a fase ZB um valor de $148 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

Na Tabela 4.1, estão relacionados os valores da mobilidade eletrônica encontrada em alguns trabalhos. É indicado o método utilizado para encontrar o valor da mobilidade eletrônica em cada trabalho. Notamos que o valor encontrado neste trabalho, é o que mais se aproxima do valor experimental encontrado por Landoldt-Börnstein.

Tabela 4.1 – Mobilidade eletrônica no ZnS (ZB).

Autor	Método	Mobilidade (cm^2/Vs)
(Ruda e Lai,1990) [7]	Equação de Transporte de Boltzmann (método variacional)	140
Neste trabalho	Semi-Clássico	148
(Landoldt-Börnstein,1987) [36]	Experimental	160
(Reigrotzki,1998) [37]	Simulação de Monte Carlo	300
(Schreiber e Fitting,2003) [9]	Simulação de Monte Carlo	370
(Brennan,1988) [38]	Simulação de Monte Carlo	500

4.3 Influência da Temperatura da Rede na Velocidade Estacionária e na Mobilidade Eletrônica

Nas Seções 4.1 e 4.2 utilizamos a temperatura ambiente, com valor de 300 K. A Equação (3.20) apresenta que o parâmetro α possui uma dependência com o inverso da raiz quadrada do cubo da temperatura da rede cristalina.

A Figura 4.6 ilustra o comportamento da velocidade estacionária dos portadores de carga em função da temperatura da rede para as duas formas do sulfeto de zinco. Com o aumento da temperatura, aumenta-se a vibração da rede cristalina, aumentando a possibilidade 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.

Para a forma *wurtzite*, a redução da velocidade de 0° 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.

Apesar da mobilidade eletrônica não depender da intensidade do campo elétrico, ela é influenciada pela temperatura. De forma análoga à velocidade, a mobilidade eletrônica também diminui com o aumento da temperatura. A mobilidade eletrônica tem uma redução de aproximadamente 31,2% para a forma *wurtzite* e de aproximadamente 31,8% para a forma *zinblende*.

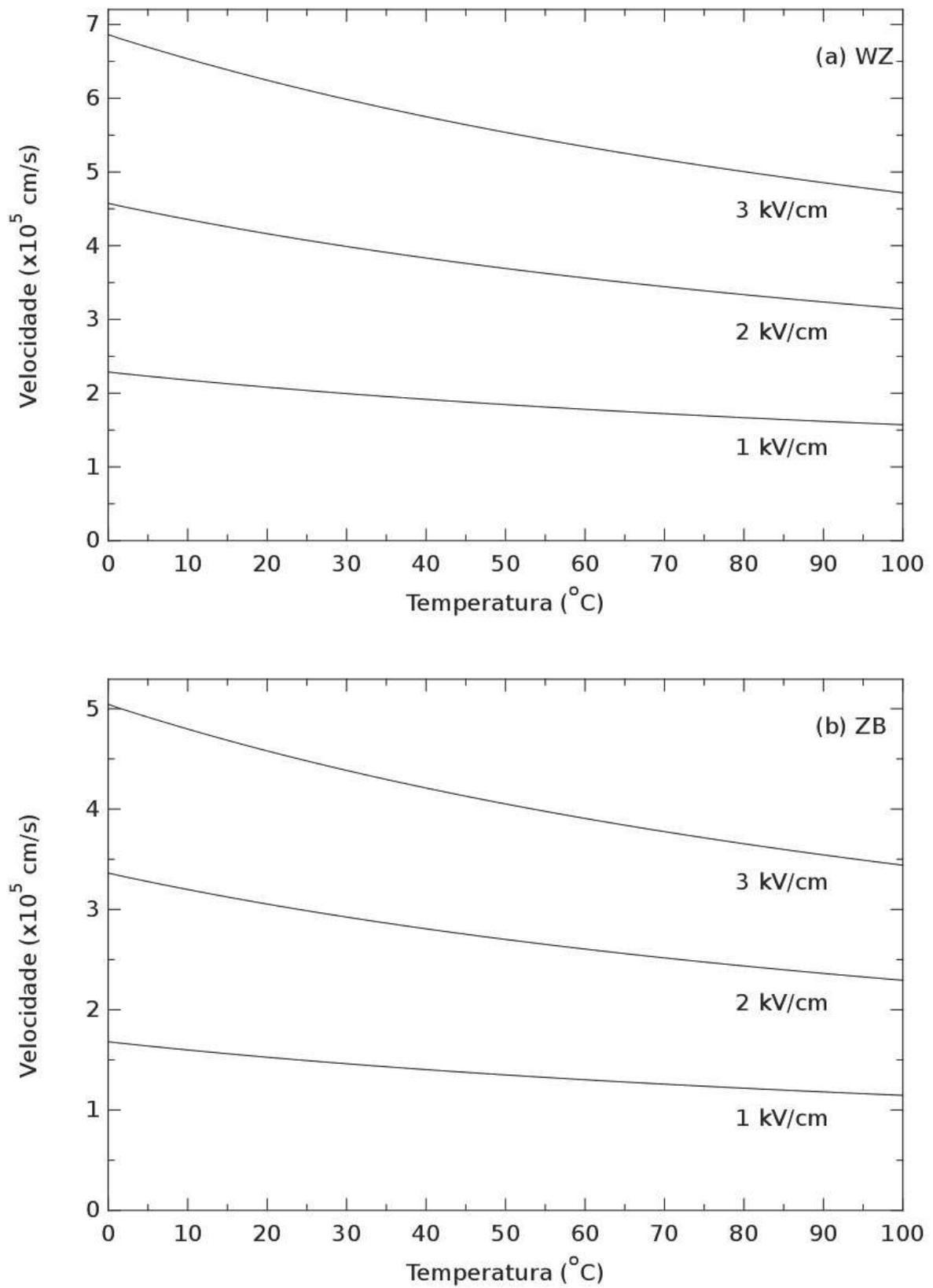


Figura 4.6 – Velocidade estacionária dos portadores de carga elétrica em função da temperatura da rede cristalina.

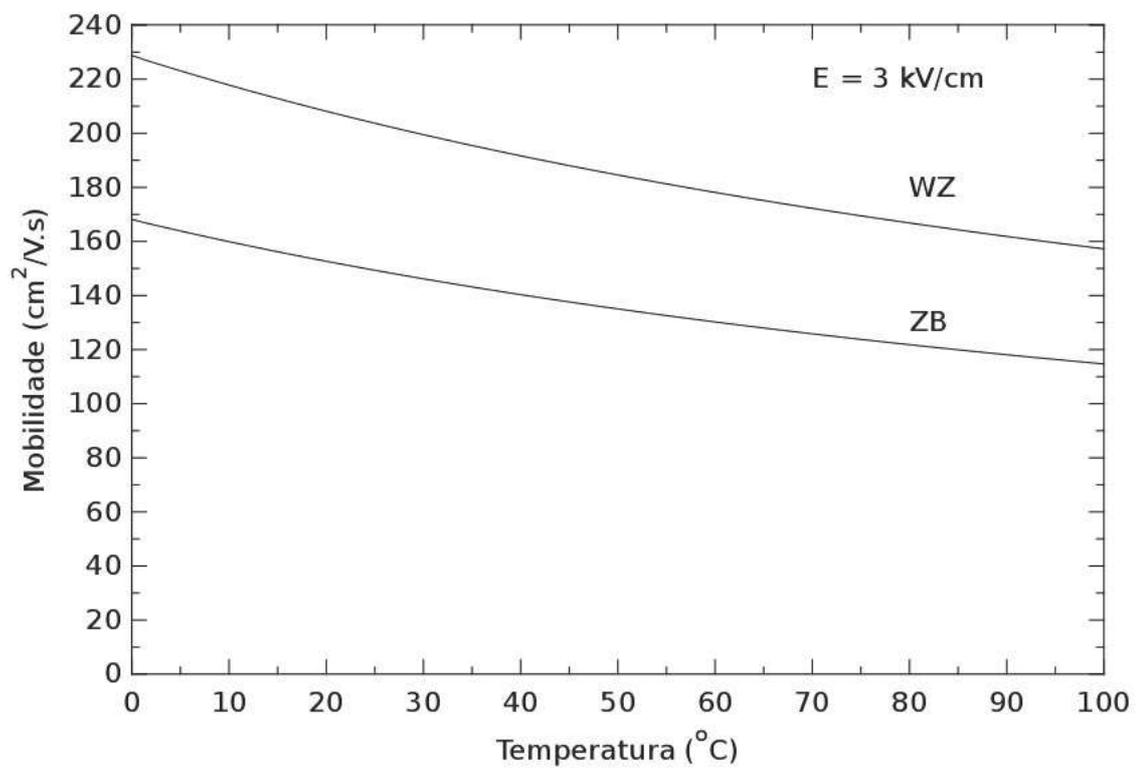


Figura 4.7 – Redução da mobilidade eletrônica com o aumento da temperatura.

Capítulo 5

Conclusão

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 1 ps [39, 40]. 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 (10^{-12} s) e de femtossegundos (10^{-15} s). 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 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 que ambas sofrem redução, com o aumento da temperatura.

É extremamente importante do pontos 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.

APÊNDICE A

Parâmetro α

O parâmetro α que aparece na Equação (3.15) está associada à resistividade elétrica do semicondutor [35]. A Equação (A.1) mostra a estrutura do parâmetro α .

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \{ [\nu - (1 + \nu)e^{-2z}] k_0(z) - [\nu + (1 + \nu)e^{-2z}] k_1(z) \} \quad (\text{A.1})$$

onde e é a carga elementar do elétron, ω é a frequência dos fônons, γ é uma constante, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura da rede cristalina, $k_0(z)$ e $k_1(z)$ são funções modificadas de segunda espécie de Bessel e ν é a função de distribuição dos fônons ópticos dada por:

$$\nu = \frac{1}{e^{2z} - 1} \quad (\text{A.2})$$

sendo γ e z dados por:

$$\gamma = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \quad (\text{A.3})$$

$$z = \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \quad (\text{A.4})$$

Na Equação (A.3) ϵ_0 é a constante eletrostática estática e ϵ_∞ é a constante eletrostática de alta frequência. Na Equação (A.4) ω é a frequência dos fônons, k_B é a constante de Boltzmann cujo valor é aproximadamente $1,38 \times 10^{-16}$ erg/K, T é a temperatura da rede cristalina e \hbar é $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, onde $h \approx 6,626 \times 10^{-17}$ erg·s é a constante de Planck.

Substituindo a Equação (A.2) na Equação (A.1) temos:

$$\begin{aligned}
\alpha &= \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z} - 1} + \left(1 + \frac{1}{e^{2z} - 1} \right) e^{-2z} \right] k_1(z) \right. \\
&\quad \left. - \left[\frac{1}{e^{2z} - 1} - \left(1 + \frac{1}{e^{2z} - 1} \right) e^{-2z} \right] k_0(z) \right\} \\
\alpha &= \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z} - 1} + \left(\frac{e^{2z} - 1 + 1}{e^{2z} - 1} \right) e^{-2z} \right] k_1(z) \right. \\
&\quad \left. - \left[\frac{1}{e^{2z} - 1} - \left(\frac{e^{2z} - 1 + 1}{e^{2z} - 1} \right) e^{-2z} \right] k_0(z) \right\} \\
\alpha &= \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z} - 1} + \frac{e^{2z}}{e^{2z} - 1} e^{-2z} \right] k_1(z) \right. \\
&\quad \left. - \left[\frac{1}{e^{2z} - 1} - \frac{e^{2z}}{e^{2z} - 1} e^{-2z} \right] k_0(z) \right\} \\
\alpha &= \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z} - 1} + \frac{1}{e^{2z} - 1} \right] k_1(z) \right. \\
&\quad \left. - \left[\frac{1}{e^{2z} - 1} - \frac{1}{e^{2z} - 1} \right] k_0(z) \right\} \\
\alpha &= \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z} - 1} + \frac{1}{e^{2z} - 1} \right] k_1(z) \right\} \\
\alpha &= \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \frac{2}{e^{2z} - 1} k_1(z) \tag{A.5}
\end{aligned}$$

Referências

- [1] VAN VLACK, L. H. *Princípios de ciência e tecnologia dos materiais*. 4. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 1984.
- [2] BRAITHWAITE, N.; WEAVER, G. *Electronic materials*. Londres: Oxford: Alden Press Ltd., 1990.
- [3] CALLISTER JR., W. D.; RETHWISCH, D. G. *Ciência e engenharia de materiais, uma introdução*. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2013.
- [4] SWART, W. J. *Semicondutores, fundamentos técnicos e aplicações*. Campinas: Unicamp, 2008.
- [5] LIDE, D. R. *Handbook of Chemistry and Physics*. 78th. ed. Boca Raton: CRC Pres, Inc., 1997.
- [6] KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- [7] RUDA, H. E.; LAI, B. Electron transport in ZnS. *Journal of Applied Physics*, v. 68, n. 4, p. 1714–1719, 1990.
- [8] SINGH, R. D.; GAUR, A.; SHARMA, A. K. Pulsed laser induced absorption (one-four) dependence of electron mobility in cdI_2 and ZnS crystals. *Pramana - J. Phys.*, v. 36, n. 4, p. 435–439, 1991.
- [9] SCHREIBER, E.; FITTING, H.-J. Ballistic electrons in GaAs and ZnS. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, v. 131–132, p. 87–98, 2003.
- [10] 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, 2008.
- [11] ROKN-ABADI, M. R. Numerical calculation of the electron mobility in ZnS and ZnSe semiconductors using the iterative method. *International Journal of the Physical Sciences*, v. 5, n. 11, p. 1752–1756, 2010. ISSN 1992-1950.
- [12] ARABSHAHI, H. Calculation of the electron drift mobility in Cr^{2+} :ZnS and Cr^{2+} :ZnSe materials by rode iteration model. *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*, v. 1, n. 4, p. 469–475, 2010.
- [13] MAGOMADOV, R. M.; DEL'MIKHANOV, R. R.; TSEBAEV, S. N. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, v. 76, n. 3, p. 315–316, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.3103/S1062873812030197>>.
- [14] DEY, A. et al. Light induced charge transport property analysis of nanostructured ZnS based schottky diode. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, v. 27, n. 6, p. 6325–6335, 2016.

- [15] BURROWS, A. et al. *Chemistry*³: Introducing norganic, organic and physical chemistry. 2th. ed. Oxford: Oxford University Press, 2013.
- [16] NAKAMURA, S.; FASOL, G. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 1997.
- [17] MOHAMMAD, S.; MORKOÇ, H. Progress and prospects of group-iii nitride semiconductors. *Progress in Quantum Electronics*, v. 20, n. 5, p. 361–525, 1996.
- [18] AKASAKI, I.; AMANO, H. Crystal growth and conductivity control of group III nitride semiconductors and their application to short wavelength light emitters. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 36, n. 9A, p. 5393–5408, 1997.
- [19] TAKAHASHI, K.; YOSHIKAWA, A.; SANDHU, A. *Wide Bandgap Semiconductors*. 1. ed. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [20] PIPREK, J. *Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation*. New York: Wiley, 2007.
- [21] MORKOÇ, H. *Handbook of Nitride Semiconductors & Devices*. New York: Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA, 2009.
- [22] MORTON, D. C.; WILLIAMS, F. E. A new thin film electroluminescent material ZnF₂ : Mn. *Applied Physics Letters*, v. 35, n. 9, p. 671–672, 1979.
- [23] OKAMOTO, K.; HAMAKAWA, Y. Bright green electroluminescence in thin film ZnS TbF₃. *Applied Physics Letters*, v. 35, n. 7, p. 508–511, 1979.
- [24] BRYANT, F. J.; KRIER, A.; ZHONG, G. Z. Blue electroluminescence in reverse-biased ZnS(Zn,Al) diodes. *Solid-State Electronics*, v. 28, n. 9, p. 847–854, 1985.
- [25] 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, n. 7, p. 52–53, julho 1985.
- [26] ONO, Y. A. *Electroluminescent displays*. Singapura: World Scientific, 1995.
- [27] 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, n. 32, p. 22628–22635, 2016.
- [28] BARQUINHA, P. et al. *Transparent Oxide Electronics: From materials to devices*. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd., 2012.
- [29] NAG, B. R. *Electron Transport in Compound Semiconductors*. 1. ed. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1980.
- [30] LANDOLT-BORNSTEIN. *New Series III*. Berlin: Springer, 1987.
- [31] RODRIGUES, C. G. Nonlinear electronic transport behavior in indium nitride. *Materials Chemistry and Physics*, v. 137, n. 1, p. 317 – 322, 2012.
- [32] SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1982.
- [33] ASHCROFT, N. W.; D., N. *Física do Estado Sólido*. São Paulo: Ed. Cengage Learning, 2011.
- [34] TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. J. de. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. São Paulo: Editora da USP, 2001.

- [35] RODRIGUES, C. G.; VASCONCELLOS, A. R.; LUZZI, R. A kinetic theory for nonlinear quantum transport. *Transport Theory and Statistical Physics*, v. 29, n. 7, p. 733–757, 2000.
- [36] LANDOLDT-BÖRNSTEIN. New series III: numerical data and functional relationships in science and technology. In: MADELUNG, O. (Ed.). *Semiconductor: Intrinsic properties of group IV elements and III-V, II-VI, and I-VII-compounds*. Berlin/Heidelberg/New York/London/Paris/Tokyo: Springer-Verlag, 1987. v. 22a, cap. 3.2 Zinc Sulfide, p. 167–176.
- [37] REIGROTZKI, M. *Theoretische Untersuchungen zur Stossionisation und zum Hochfeldtransport in Halbleitern*. 150 p. Tese (PhD thesis) — Universität Rostock, Rostock, 1998.
- [38] BRENNAN, K. Theory of high-field electronic transport in bulk zns and znse. *Journal of Applied Physics*, v. 64, n. 8, p. 4024–4030, 1988.
- [39] PEARSON, S. J. *GaN and Related Materials*. New York: Gordon and Breach Science Publishers, 1997.
- [40] DUBOZ, J.-Y. GaN as seen by the industry. *Physica status solidi (a)*, WILEY-VCH Verlag, v. 176, n. 1, p. 5–14, 1999.

Anexos


```

38  real(kind=plflt)      :: ymin          ! Menor valor do eixo y
39  real(kind=plflt)      :: ymax          ! Maior valor do eixo y
40  real(kind=plflt)      :: angulox       ! Inclinação do texto eixo x
41  real(kind=plflt)      :: anguloy       ! Inclinação do texto eixo y
42  real(kind=plflt)      :: just          ! Alinhamento do texto
43  real(dp)              :: e_0           ! Constante eletrostática estática
44  real(dp)              :: e_inf         ! Constante eletrostática de alta
45                                     ! frequência
46  real(dp)              :: omega         ! Frequência dos fonos, em hertz
47  real(dp)              :: gama         ! Constante
48  real(dp)              :: z            ! Constante
49  real(dp)              :: raz_mas       ! Razão entre a massa efetiva e a massa
50                                     ! de repouso
51                                     ! do elétron
52  real(dp)              :: rH_cort       ! Constante de Dirac
53  real(dp)              :: rTemp        ! Temperatura do cristal, em kelvin
54  integer               :: num_pont     ! Número de pontos da matriz acima
55  integer               :: i, j         ! Variáveis que serão usadas nos laços DO
56  integer               :: forma        ! Forma do cristal sulfeto de zinco
57                                     ! 1 -> wurtzite (WZ)
58                                     ! 2 -> zinc blende (ZB)
59
60  call system("clear")                ! Limpa a tela do terminal
61
62  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Escolhe a forma do ZnS
63
64  write(*,*) "Entre com a forma do cristal Sulfeto de Zinco (ZnS)"
65  write(*,*) "1 -> Forma wurtzite (WZ)"
66  write(*,*) "2 -> Forma zinc blende (ZB)"
67  write(*,*) "Qualquer outro valor -> Termina o programa"
68  write(*,*) " "
69  read(*,*) forma
70
71  select case (forma)
72  case (1:2)
73
74      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Abre o arquivo, lê os dados e fecha o arquivo
75
76      open(unit=1, file='zns.dat', action='read', access='sequential', status='old')
77
78      do i = 1, forma
79          read(unit=1, fmt='(f4.2,1x,f4.2,1x,e8.2,1x,f4.2)') e_0, e_inf, omega, raz_mas
80      end do
81
82      close(unit=1)
83
84      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Calculo dos parâmetros necessários para o cálculo da velocidade
85
86      rH_cort = dh_cgs/(2.*dpi)
87      rTemp   = 300.d0
88      gama    = 1.0d0/e_inf - 1.0d0/e_0
89      z       = omega/(2.0d0*dk_cgs*rTemp)
90      omega   = omega/rH_cort
91      alfa    = de_cgs**2*omega**2*gama/3.0d0*sqrt(2.0d0*(raz_mas*dm_e_cgs)**3/(dpi*(dk_cgs*rTemp)**3))*exp(z)&
92              *2.0d0/(exp(2.0d0*z)-1.0d0)*besselk(1.0d0,z)
93
94      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara para gerar os pontos do gráfico
95
96      write(*,*) ""
97      write(*,*) "Entre com o número de pontos para gerar o gráfico: "
98      read(*,*) num_pont
99
100     num_pont = num_pont + 1
101
102     allocate (pontos(num_pont,4))
103
104     !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do eixo dos tempos
105
106     pontos = 0.
107     do i = 1, num_pont
108         pontos(i,1) = dble(i-1)*1.0d-15
109     end do

```

```

110
111      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do eixos das velocidades
112
113      do i = 1, num_pont
114          do j = 2,4
115              pontos(i,j) = (de_cgs*((j-1)*1.0d1/c)/alfa)*(1.0d0-exp(-alfa*pontos(i,1)/(raz_mas+dm_e_cgs)))
116          end do
117      end do
118
119      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara o ambiente grafico , exhibe o grafico e os rotulos
120
121      forall (i=1:num_pont) pontos(i,1) = pontos(i,1)*1e12
122      forall (i=1:num_pont,j=2:4) pontos(i,j) = pontos(i,j)*1e-5
123
124      xmin = 0.
125      ymin = 0.
126      xmax = maxval(pontos(:,1))
127      ymax = dble(ceiling(maxval(pontos(:,4))))
128      angulox = 0.0
129      anguloy = 0.0
130      just = 0.0
131
132      call plparseopts(PL_PARSE_FULL) ! analisa e processa argumentos da linha de comando
133      call plscol(0,255,255,255)
134      call plscol(1,0,0,0)
135      call plinit ! inicia o plot
136
137      call pladv(0)
138      call plvpor(0.11d0,0.97d0,0.15d0,0.97d0)
139      call plwind(0.0d0,xmax,0.0d0,ymax)
140      call plbox('bcnst',0.1d0,2,'bcnstv',1.0d0,2)
141      call plmtex('l',5.0_piflt,0.5_piflt,0.5_piflt,"Velocidade (x10#u5#d cm/s)")
142      call plmtex('b',4.0_piflt,0.5_piflt,0.5_piflt,"Tempo (ps)")
143
144      do i = 2,4
145          call plline(pontos(:,1),pontos(:,i))
146      end do
147
148      if (forma==1) then
149          call plptex(pontos(int(num_pont/10),1),pontos(num_pont,4),angulox,anguloy,just,"(a) WZ")
150      else
151          call plptex(pontos(int(num_pont/10),1),pontos(num_pont,4),angulox,anguloy,just,"(b) ZB")
152      end if
153
154      call plptex(pontos(int(2*num_pont/3),1),pontos(int(num_pont+0.20),2),angulox,anguloy,just,"1 kV/cm")
155      call plptex(pontos(int(2*num_pont/3),1),pontos(int(num_pont+0.25),3),angulox,anguloy,just,"2 kV/cm")
156      call plptex(pontos(int(2*num_pont/3),1),pontos(int(num_pont+0.29),4),angulox,anguloy,just,"3 kV/cm")
157
158      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Fecha a biblioteca grafica
159
160      call plend
161
162      case default
163          write(*,*) " "
164          write(*,*) "Voce escolheu terminar o programa."
165          write(*,*) " "
166      end select
167
168 end program vel_trans

```



```

38  real(kind=plflt)      :: angulox      ! Inclinação do texto eixo x
39  real(kind=plflt)      :: anguloy      ! Inclinação do texto eixo y
40  real(kind=plflt)      :: just         ! Alinhamento do texto
41  real(dp)              :: e_0          ! Constante eletrostática estática
42  real(dp)              :: e_inf        ! Constante eletrostática de alta frequen
43                                     ! cia
44  real(dp)              :: rTemp        ! Temperatura do cristal, em kelvin
45  real(dp)              :: rH_cort      ! constante
46  real(dp)              :: gama         ! Constante
47  real(dp)              :: z            ! constante
48  real(dp)              :: alfa         ! constante
49  real(dp)              :: omega        ! Frequência dos fonos (Hz)
50  real(dp)              :: raz_mas      ! Razão entre a massa efetiva e a massa
51                                     ! de repouso
52  integer                :: i, j        ! Variáveis que serão usadas nos laços DO
53  integer                :: num_pont    ! Número de pontos do gráfico
54  integer                :: forma       ! Forma do cristal sulfeto de zinco
55                                     ! 1 → forma wurtzite (WZ)
56                                     ! 2 → forma zinc blende (ZB)
57
58  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara o ambiente para o trabalho
59
60  call system("clear")                ! Limpa a tela do terminal
61
62  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Escolhe a forma do cristal
63
64  write(*,*) " "
65  write(*,*) "Escolha a forma do cristal sulfeto de zinco (ZnS)"
66  write(*,*) "1 → forma wurtzite (WZ)"
67  write(*,*) "2 → forma zinc blende (ZB)"
68  write(*,*) "Qualquer outra escolha → finaliza o programa."
69  write(*,*) " "
70  read(*,*) forma
71
72  select case (forma)
73  case (1:2)
74      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Abre o arquivo, lê os dados e fecha o arquivo
75      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Inicialização das variáveis e ponteiros
76
77      rTemp = 300.d0
78      rH_cort = dh_cgs/(2.*dpi)
79
80      open(unit=1, file='zns.dat', action='read', access='sequential', status='old')
81
82      do i = 1, forma
83          read(unit=1, fmt='(f4.2,1x,f4.2,1x,e8.2,1x,f4.2)') e_0, e_inf, omega, raz_mas
84      end do
85
86      close(unit=1)
87
88      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Cálculo das constantes gama, z e alfa
89
90      gama = 1.0d0/e_inf - 1.0d0/e_0
91      z = omega/(2.0d0*k_cgs*rTemp)
92      omega = omega/rH_cort
93      alfa = de_cgs**2*omega**2*gama/3.0d0*sqrt(2.0d0*(raz_mas*dm_e_cgs)**3/(dpi*(dk_cgs*rTemp)**3))&
94            *exp(z)*2.0d0/(exp(2.0d0*z)-1.0d0)*besselk(1.0d0,z)
95
96      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Entra com o número de pontos do gráfico
97
98      write(*,*) " "
99      write(*,*) "Entre com o número de pontos do gráfico"
100     read(*,*) num_pont
101     write(*,*) " "
102
103     num_pont = num_pont + 1
104
105     !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Aloca o vetor de pontos
106
107     allocate(pontos(num_pont,4))
108     pontos = 0.0d0
109

```

```

110      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do eixo dos tempos
111
112      do i = 1, num_pont
113          pontos(i,1) = dbble(i-1)*1.0d-15
114      end do
115
116      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do eixo das distancias
117
118      do i = 2,4
119          do j = 1, num_pont
120              pontos(j,i) = de_cgs*((i-1)*1.0d1/c)/alfa*(pontos(j,1)-raz_mas*dm_e_cgs/alfa*(1.0d0-exp(-alfa&
121                  *pontos(j,1)/(raz_mas*dm_e_cgs))))
122          end do
123      end do
124
125      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do grafico
126
127      pontos(:,1) = pontos(:,1)*1.0d12
128      forall (i=2:4) pontos(:,i) = pontos(:,i)*1.0d9
129
130      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara o ambiente grafico e exhibe o grafico
131
132      xmin = 0.
133      ymin = 0.
134      xmax = maxval(pontos(:,1))
135      ymax = maxval(pontos(:,4))+1.05
136      angulox = 20.0
137      anguloy = 10.0
138      just = 0.0
139
140      call plparseopts(PL_PARSE_FULL) ! analisa e processa argumentos da linha de comando
141      call plscol0(0,255,255,255)
142      call plscol0(1,0,0,0)
143      call plinit ! inicia o plplot
144
145      call pladv(0)
146      call plvpor(0.1d0,0.97d0,0.15d0,0.97d0)
147      call plwind(0.0d0,xmax,0.0d0,ymax)
148      call plbox('bcnst',0.1d0,2,'bcnstv',20.0d0,2)
149
150      call plmtex('l',5.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Deslocamento (nm)")
151      call plmtex('b',4.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Tempo (ps)")
152
153      do i = 2,4
154          call plline(pontos(:,1),pontos(:,i))
155      end do
156
157      if (forma==1) then
158          call plptex(pontos(num_pont/10,1),pontos(num_pont,4),0.0d0,0.0d0,just,"(a) WZ")
159      else
160          call plptex(pontos(num_pont/10,1),pontos(num_pont,4),0.0d0,0.0d0,just,"(b) ZB")
161      end if
162
163      call plptex(pontos(int(2*num_pont/3),1),pontos(int(num_pont*0.45),2),angulox,anguloy,just,"1 kV/cm")
164      call plptex(pontos(int(2*num_pont/3),1),pontos(int(num_pont*0.60),3),angulox,anguloy,just,"2 kV/cm")
165      call plptex(pontos(int(2*num_pont/3),1),pontos(int(num_pont*0.60),4),angulox,anguloy,just,"3 kV/cm")
166
167      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Fecha a biblioteca grafica
168
169      call plend
170
171      deallocate(pontos)
172
173      case default
174          write(*,*) " "
175          write(*,*) "Voce escolheu finalizar o programa."
176          write(*,*) " "
177      end select
178
179      end program desloc_trans

```

ANEXO C

Rotina Computacional para o Cálculo da Comparação do Deslocamento em Função do Tempo

Programa desenvolvido utilizando a linguagem Fortran, na versão GNU Fortran 4.9.2, com o auxílio da biblioteca gráfica PLPLOT, versão 5.10.0, instalado em um computador Sony Vaio, modelo SVF15A17CBB, rodando o sistema operacional DEBIAN JESSIE.

Código C.1 – dist_trans.f08

```

1  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
2  !!                                                                                                                                            !!
3  !! Programa: Produz um grafico para comparar a posicao do eletron no cristal semiconductor em funcao do      !!
4  !!           tempo.                                                                                                                            !!
5  !! Programador: Agamenon Lima do Vale                                                                                                        !!
6  !! Data de criacao: 19 de maio de 2016                                                                                                       !!
7  !! Contato: agamenon.lv@gmail.com                                                                                                             !!
8  !! Direitos: Este programa e livre para copia, modificacao, ensino, modificacao, ...                                                                 !!
9  !! Copyright: This program is free software: you can redistribute it and/or modify it under the terms of the !!
10 !!           GNU General Public License as published by the Free Foundation, either version 3 of the      !!
11 !!           License, or (at your option) any later version.                                                                                   !!
12 !!                                                                                                                                            !!
13 !!           This program is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOU ANY WARRANTY;    !!
14 !!           without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.    !!
15 !!           See the GNU General Public License for mor details.                                                                              !!
16 !!                                                                                                                                            !!
17 !!           You should have received a copy of the GNU General Public License along with this program.    !!
18 !!           If not, see <http://www.gnu.org/licenses>.                                                                                       !!
19 !!                                                                                                                                            !!
20  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
21
22  program desloc_trans
23
24  use constantes           ! Biblioteca de constantes
25  use plplot              ! Biblioteca grafica
26  use subrotinas         ! Biblioteca de rotinas extras
27
28  implicit none
29
30  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Declaracao de variaveis
31
32  real(kind=plflt), allocatable, dimension(:,:) :: pontos           ! Matriz de pontos para gerar o grafico.
33                                                                    ! A primeira coluna e o eixo x
34  real(kind=plflt)           :: xmin           ! Menor valor do eixo x
35  real(kind=plflt)           :: xmax           ! Maior valor do eixo x
36  real(kind=plflt)           :: ymin           ! Menor valor do eixo y
37  real(kind=plflt)           :: ymax           ! Maior valor do eixo y

```

```

38  real(kind=plflt)           :: angulox      ! Inclinação do texto eixo x
39  real(kind=plflt)           :: anguloy      ! Inclinação do texto eixo y
40  real(kind=plflt)           :: just         ! Alinhamento do texto
41  real(dp), dimension(2)     :: e_0         ! Constante eletrostática estática
42  real(dp), dimension(2)     :: e_inf       ! Constante eletrostática de alta frequen
43                                     ! cia
44  real(dp)                   :: rTemp       ! Temperatura do cristal, em kelvin
45  real(dp)                   :: rH_cort     ! constante
46  real(dp), dimension(2)     :: gama       ! Constante
47  real(dp), dimension(2)     :: z          ! constante
48  real(dp), dimension(2)     :: alfa       ! constante
49  real(dp), dimension(2)     :: omega      ! Frequência dos fonos (Hz)
50  real(dp), dimension(2)     :: raz_mas    ! Razão entre a massa efetiva e a massa
51                                     ! de repouso
52  integer                    :: i, j        ! Variáveis que serão usadas nos laços DO
53  integer                    :: num_pont    ! Número de pontos do gráfico
54  integer                    :: campo      ! Valor do campo elétrico, em kV/cm
55  character(len=11)          :: ccampo     ! Rotulo da figura
56
57  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara o ambiente para o trabalho
58
59  call system("clear")          ! Limpa a tela do terminal
60
61  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Abre o arquivo, le os dados e fecha o arquivo
62  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Inicialização das variáveis e ponteiros
63
64  rTemp = 300.d0
65  rH_cort = dh_cgs/(2.*dpi)
66
67  open(unit=1, file='zns.dat', action='read', access='sequential', status='old')
68
69  do i = 1, 2
70    read(unit=1, fmt='((f4.2,1x,f4.2,1x,e8.2,1x,f4.2))') e_0(i), e_inf(i), omega(i), raz_mas(i)
71  end do
72
73  close(unit=1)
74
75  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Cálculo das constantes gama, z e alfa
76
77  do i = 1, 2
78    gama(i) = 1.0d0/e_inf(i) - 1.0d0/e_0(i)
79    z(i) = omega(i)/(2.0d0*k_cgs*rTemp)
80    omega(i) = omega(i)/rH_cort
81    alfa(i) = de_cgs**2*omega(i)**2*gama(i)/3.0d0*sqrt(2.0d0*(raz_mas(i)*dm_e_cgs)**3/(dpi*(dk_cgs*rTemp)**3))&
82            *exp(z(i))*2.0d0/(exp(2.0d0*z(i))-1.0d0)*besselk(1.0d0,z(i))
83  end do
84
85  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Entra com o campo elétrico
86
87  write(*,*) "Entre com o campo elétrico em kV/cm"
88  read(*,*) campo
89  write(ccampo,"(a3,1x,i1,1x,a5)") "E =",campo, "kV/cm"
90
91  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Entra com o número de pontos do gráfico
92
93  write(*,*) " "
94  write(*,*) "Entre com o número de pontos do gráfico"
95  read(*,*) num_pont
96  write(*,*) " "
97
98  num_pont = num_pont + 1
99
100 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Aloca o vetor de pontos
101
102 allocate(pontos(num_pont,3))
103 pontos = 0.0d0
104
105 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do eixo dos tempos
106
107 do i = 1, num_pont
108   pontos(i,1) = dble(i-1)*1.0d-15
109 end do

```

```

110
111 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do eixo das distancias
112
113 do i = 2,3
114   do j = 1, num_pont
115     pontos(j,i) = de_cgs*(campo*1.0d1/c)/ alfa(i-1)*(pontos(j,1)-raz_mas(i-1)*dm_e_cgs/ alfa(i-1)*(1.0d0-exp(- alfa(i-1)&
116       *pontos(j,1)/(raz_mas(i-1)*dm_e_cgs))))
117   end do
118 end do
119
120 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do grafico
121
122 pontos(:,1) = pontos(:,1)*1.0d12
123 forall (i=2:3) pontos(:,i) = pontos(:,i)*1.0d9
124
125 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara o ambiente grafico e exhibe o grafico
126
127 xmin = 0.
128 ymin = 0.
129 xmax = maxval(pontos(:,1))
130 ymax = maxval(pontos(:,2))+1.05
131 angulox = 0.0d0
132 anguloy = 0.0d0
133 just = 0.0d0
134
135 call plparseopts(PL_PARSE_FULL) ! analisa e processa argumentos da linha de comando
136 call plscol(0,255,255,255)
137 call plscol(1,0,0,0)
138 call plinit ! inicia o plplot
139
140 call pladv(0)
141 call plvpor(0.1d0,0.97d0,0.15d0,0.97d0)
142 call plwind(0.0d0,xmax,0.0d0,ymax)
143 call plbox('bcnst',0.1d0,2,'bcnstv',20.0d0,2)
144
145 call plmtex('l',5.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Deslocamento (nm)")
146 call plmtex('b',4.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Tempo (ps)")
147
148 do i = 2,3
149   call plline(pontos(:,1),pontos(:,i))
150 end do
151
152 call plptex(pontos(num_pont/10,1),pontos(num_pont,2),0.0d0,0.0d0,just,ccampo)
153 call plptex(pontos(int(2*num_pont/3),1),pontos(int(num_pont*0.45),2),angulox,anguloy,just,"ZB")
154 call plptex(pontos(int(2*num_pont/3),1),pontos(int(num_pont*1.00),3),angulox,anguloy,just,"WZ")
155
156 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Fecha a biblioteca grafica
157
158 call plend
159
160 deallocate(pontos)
161
162 end program desloc_trans

```

ANEXO D

Rotina Computacional para o Cálculo da Velocidade em Função do Campo Elétrico

Programa desenvolvido utilizando a linguagem Fortran, na versão GNU Fortran 4.9.2, com o auxílio da biblioteca gráfica PLPLOT, versão 5.10.0, instalado em um computador Sony Vaio, modelo SVF15A17CBB, rodando o sistema operacional DEBIAN JESSIE.

Código D.1 – vel_est.f08

```

1  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
2  !!                                                                                                                                            !!
3  !! Programa: Produz um grafico para informar a relacao entre a velocidade de deriva do eletron no semicondu-!!
4  !!           tor e o campo eletrico aplicado.                                                                                              !!
5  !! Programador: Agamenon Lima do Vale                                                                                                      !!
6  !! Data de criacao: 19 de maio de 2016                                                                                                    !!
7  !! Contato: agamenon.lv@gmail.com                                                                                                        !!
8  !! Direitos: Este programa e livre para copia, modificacao, ensino, modificacao, ...                                                                 !!
9  !! Copyright: This program is free software: you can redistribute it and/or modify it under the terms of the !!
10 !!           GNU General Public License as published by the Free Foundation, either version 3 of the    !!
11 !!           License, or (at your option) any later version.                                                                                   !!
12 !!                                                                                                                                            !!
13 !!           This program is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOU ANY WARRANTY;    !!
14 !!           without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.    !!
15 !!           See the GNU General Public License for mor details.                                                                                   !!
16 !!                                                                                                                                            !!
17 !!           You should have received a copy of the GNU General Public License along with this program.    !!
18 !!           If not, see <http://www.gnu.org/licenses>.                                                                                       !!
19 !!                                                                                                                                            !!
20  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
21
22  program vel_campo
23
24  use constantes           ! Biblioteca de constantes
25  use plplot              ! Biblioteca grafica
26  use subrotinas          ! Biblioteca de rotinas extras
27
28  implicit none
29
30  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Declaracao de variaveis
31
32  real(kind=plflt), dimension(31,3)      :: pontos           ! Matriz de pontos para gerar o grafico.
33                                          ! A primeira coluna e o eixo x
34  real(kind=plflt)                       :: xmin             ! Menor valor do eixo x
35  real(kind=plflt)                       :: xmax             ! Maior valor do eixo x
36  real(kind=plflt)                       :: ymin             ! Menor valor do eixo y
37  real(kind=plflt)                       :: ymax             ! Maior valor do eixo y

```

```

38  real(kind=plflt)          :: angulox      ! Inclinação do texto eixo x
39  real(kind=plflt)          :: anguloy      ! Inclinação do texto eixo y
40  real(kind=plflt)          :: just         ! Alinhamento do texto
41  real(dp)                  :: rTemp        ! Temperatura do cristal, em kelvin
42  real(dp)                  :: rInstTemp    ! Instante de tempo em que o movimento
43                                ! passa a ser estacionário, em segundos
44  real(dp)                  :: rH_cort      ! constante
45  real(dp), dimension(2)    :: gama        ! Constante
46  real(dp), dimension(2)    :: omega       ! Constante
47  real(dp), dimension(2)    :: raz_mas     ! Constante
48  real(dp), dimension(2)    :: z          ! constante
49  real(dp), dimension(2)    :: alfa        ! constante
50  real(dp), dimension(2)    :: e_0         ! Constante eletrostática estática
51  real(dp), dimension(2)    :: e_inf       ! Constante eletrostática de alta frequen
52                                ! cia
53  ! real(dp), parameter      :: c = 2.9979245800d10
54  integer                   :: i, j        ! Variáveis que serão usadas nos laços DO
55
56  call system("clear")          ! Limpa a tela do terminal
57
58  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Abre o arquivo, le os dados e fecha o arquivo
59  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Inicialização das variáveis e ponteiros
60
61  rTemp          = 300.d0
62  rH_cort        = dh_cgs/(2.*dpi)
63
64  open(unit=1, file='zns.dat', action='read', access='sequential', status='old')
65
66  do i = 1, 2
67    read(unit=1, fmt='((f4.2,1x,f4.2,1x,e8.2,1x,f4.2))') e_0(i), e_inf(i), omega(i), raz_mas(i)
68  end do
69
70  close(unit=1)
71
72  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Cálculo das constantes gama, z e alfa
73
74  do i = 1,2
75    gama(i) = 1.0d0/e_inf(i) - 1.0d0/e_0(i)
76    z(i)    = omega(i)/(2.0d0*dk_cgs*rTemp)
77    omega(i) = omega(i)/rH_cort
78    alfa(i) = de_cgs**2*omega(i)**2*gama(i)/3.0d0*sqrt(2.0d0*(raz_mas(i)+dm_e_cgs)**3/(dpi*(dk_cgs*rTemp)**3&
79              ))*exp(z(i))*2.0d0/(exp(2.0d0*z(i))-1.0d0)*besselk(1.0d0,z(i))
80  end do
81
82  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do eixo dos campos elétricos
83
84  pontos = 0.0d0
85
86  do i = 1, 31
87    pontos(i,1) = dble((real(i)-1.)/10.)*1.0d5      ! Campo elétrico em kV/cm.
88  end do
89
90  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Cálculo da velocidade em função do campo elétrico
91
92  do i = 1, 31
93    do j = 2, 3
94      pontos(i,j) = de_cgs*pontos(i,1)*1.0d1/c/alfa(j-1)
95    end do
96  end do
97
98  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do eixos das velocidades
99
100 pontos(:,2) = pontos(:,2)*1.0d-5
101 pontos(:,3) = pontos(:,3)*1.0d-5
102
103 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara o ambiente gráfico e exibe o gráfico
104
105 xmin = 0.
106 ymin = 0.
107 xmax = maxval(pontos(:,1))*1.2
108 ymax = maxval(pontos(:,2))*1.05
109 angulox = 0.0

```

```
110  anguloy = 0.0
111  just    = 0.0
112
113  call plparseopts(PL_PARSE_FULL)  ! analisa e processa argumentos da linha de comando
114
115  call plscolor(0,255,255,255)
116  call plscolor(1,0,0,0)
117  call plinit
118
119  call plcolor(1)
120
121  call pladv(0)
122  call plvpor(0.11d0,0.97d0,0.15d0,0.97d0)
123  call plwind(0.0d0,xmax,0.0d0,ymax)
124  call plbox('bcnst',0.5d0,2,'bcnstv',1.0d0,2)
125  call plmtex('b',4.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Campo Elétrico (kV/cm)")
126  call plmtex('l',5.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Velocidade estacionaria (x10#u5#d cm/s)")
127
128  call plline(pontos(:,1),pontos(:,2))
129  call plline(pontos(:,1),pontos(:,3))
130
131  call plptex(pontos(22,1),pontos(21,2),angulox,anguloy,just,"WZ")
132  call plptex(pontos(22,1),pontos(20,3),angulox,anguloy,just,"ZB")
133
134  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Fecha a biblioteca grafica
135
136  call plend
137
138  end program vel_campo
```



```

38  real(kind=plflt)          :: anguloy      ! Inclinação do texto eixo y
39  real(kind=plflt)          :: just        ! Alinhamento do texto
40  real(dp)                  :: rTemp       ! Temperatura do cristal, em kelvin
41  real(dp)                  :: rInstTemp   ! Instante de tempo em que o movimento
42                                     ! passa a ser estacionario, em segundos
43  real(dp)                  :: rH_cort     ! constante
44  real(dp), dimension(2)    :: gama       ! Constante
45  real(dp), dimension(2)    :: omega      ! Constante
46  real(dp), dimension(2)    :: raz_mas    ! Constante
47  real(dp), dimension(2)    :: z         ! constante
48  real(dp), dimension(2)    :: alfa      ! constante
49  real(dp), dimension(2)    :: e_0       ! Constante eletrostatica estatica
50  real(dp), dimension(2)    :: e_inf     ! Constante eletrostatica de alta frequen
51                                     ! cia
52 ! real(dp), parameter      :: c = 2.9979245800d10
53  integer                   :: i, j       ! Variaveis que serao usadas nos lacos DO
54
55  call system("clear")          ! Limpa a tela do terminal
56
57  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Abre o arquivo, le os dados e fecha o arquivo
58  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Inicializacao das variaveis e ponteiros
59
60  rTemp          = 300.d0
61  rH_cort        = dh_cgs/(2.*dpi)
62
63  open(unit=1, file='zns.dat', action='read', access='sequential', status='old')
64
65  do i = 1, 2
66    read(unit=1, fmt='((f4.2,1x,f4.2,1x,e8.2,1x,f4.2))') e_0(i), e_inf(i), omega(i), raz_mas(i)
67  end do
68
69  close(unit=1)
70
71  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Calculo das constantes gama, z e alfa
72
73  do i = 1,2
74    gama(i) = 1.0d0/e_inf(i) - 1.0d0/e_0(i)
75    z(i)    = omega(i)/(2.0d0*dk_cgs*rTemp)
76    omega(i) = omega(i)/rH_cort
77    alfa(i) = de_cgs**2*omega(i)**2*gama(i)/3.0d0*sqrt(2.0d0*(raz_mas(i)*dm_e_cgs)**3/(dpi*(dk_cgs*rTemp)**3&
78              ))*exp(z(i))*2.0d0/(exp(2.0d0*z(i))-1.0d0)*besselk(1.0d0,z(i))
79  end do
80
81  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos do eixo dos campos eletricos
82
83  pontos = 0.0d0
84
85  do i = 1, 31
86    pontos(i,1) = dble((real(i)-1.)/10.)          ! Campo eletrico em kV/cm.
87  end do
88
89  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Calculo da velocidade em funcao do campo eletrico
90
91  do i = 1, 31
92    do j = 2, 3
93      pontos(i, j) = de_cgs*(pontos(i,1)*1.0d1/c)/alfa(j-1)
94    end do
95  end do
96
97  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Calculo da mobilidade eletronica
98
99  do i = 1, 31
100   do j = 2, 3
101     pontos(i, j) = pontos(i, j)/(pontos(i,1)*1.0d3)
102   end do
103 end do
104
105 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara o ambiente grafico e exhibe o grafico
106
107 xmin = 0.
108 ymin = 0.
109 xmax = maxval(pontos(:,1))

```

```
110 ymax = maxval(pontos(:,2))*1.05
111 angulox = 0.0
112 anguloy = 0.0
113 just = 0.0
114
115 call plparseopts(PL_PARSE_FULL) ! analisa e processa argumentos da linha de comando
116
117 call plscol0(0,255,255,255)
118 call plscol0(1,0,0,0)
119 call plinit
120
121 call plcol0(1)
122
123 call pladv(0)
124 call plvpor(0.12d0,0.97d0,0.15d0,0.97d0)
125 call plwind(0.0d0,xmax,0.0d0,ymax)
126 call plbox('bcnst',0.5d0,2,'bcnstv',20.0d0,2)
127 call plmtex('b',4.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Campo Eletrico (kV/cm)")
128 call plmtex('l',5.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Mobilidade (cm#u2#d/Vs)")
129
130 call plline(pontos(:,1),pontos(:,2))
131 call plline(pontos(:,1),pontos(:,3))
132
133 call plptex(pontos(22,1),190.0d0,angulox,anguloy,just,"WZ")
134 call plptex(pontos(22,1),140.0d0,angulox,anguloy,just,"ZB")
135
136 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Fecha a biblioteca grafica
137
138 call plend
139
140 end program mobil_est
```



```

38  real(kind=pflt)          :: ymin          ! Menor valor do eixo y
39  real(kind=pflt)          :: ymax          ! Maior valor do eixo y
40  real(kind=pflt)          :: angulox      ! Inclinação do texto eixo x
41  real(kind=pflt)          :: anguloy      ! Inclinação do texto eixo y
42  real(kind=pflt)          :: just         ! Alinhamento do texto
43  real(dp)                 :: e_0          ! Constante eletrostática estática
44  real(dp)                 :: e_inf        ! Constante eletrostática de alta
45                                     ! frequência
46  real(dp)                 :: omega        ! Frequência dos fonos, em hertz
47  real(dp)                 :: gama        ! Constante
48  real(dp), dimension(101) :: z          ! Constante
49  real(dp)                 :: raz_mas      ! Razão entre a massa efetiva e a massa
50                                     ! de repouso
51                                     ! do elétron
52  real(dp)                 :: rH_cort      ! Constante de Dirac
53  real(dp)                 :: rTemp       ! Temperatura do cristal, em kelvin
54  integer                  :: num_pont    ! Número de pontos da matriz acima
55  integer                  :: i, j        ! Variáveis que serão usadas nos laços DO
56  integer                  :: forma        ! Forma do cristal sulfeto de zinco
57                                     ! 1 -> wurtzite (WZ)
58                                     ! 2 -> zinc blende (ZB)
59
60  call system("clear")              ! Limpa a tela do terminal
61
62  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Escolhe a forma do ZnS
63
64  write(*,*) "Entre com a forma do cristal Sulfeto de Zinco (ZnS)"
65  write(*,*) "1 -> Forma wurtzite (WZ)"
66  write(*,*) "2 -> Forma zinc blende (ZB)"
67  write(*,*) "Qualquer outro valor -> Termina o programa"
68  write(*,*) " "
69  read(*,*) forma
70
71  select case (forma)
72  case (1:2)
73
74      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Abre o arquivo, lê os dados e fecha o arquivo
75
76      open(unit=1, file='zns.dat', action='read', access='sequential', status='old')
77
78      do i = 1, forma
79          read(unit=1, fmt='(f4.2,1x,f4.2,1x,e8.2,1x,f4.2)') e_0, e_inf, omega, raz_mas
80      end do
81
82      close(unit=1)
83
84      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Cálculo dos parâmetros necessários para o cálculo da velocidade
85
86      rH_cort = dh_cgs/(2.*dpi)
87      gama    = 1.0d0/e_inf - 1.0d0/e_0
88      omega    = omega/rH_cort
89      pontos  = 0.0d0
90
91      do i = 1, 101
92          pontos(i,1) = dble(i-1)
93      end do
94
95      do i = 1, 101
96          z(i) = omega*rH_cort/(2.0d0*dk_cgs*(pontos(i,1)+273.15d0))
97          alfa(i) = de_cgs**2*omega**2*gama/3.0d0*sqrt(2.0d0*(raz_mas*dm_e_cgs)**3/(dpi*(dk_cgs*(pontos(i,1)+273.15d0))**3))
98                  *exp(z(i))*2.0d0/(exp(2.0d0*z(i))-1.0d0)*besselk(1.0d0,z(i))
99      end do
100
101      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos dos eixos das velocidades
102
103      do j = 2,4
104          do i = 1,101
105              pontos(i,j) = de_cgs*(dble(j-1)*1.0d1/c)/alfa(i)
106          end do
107      end do
108
109      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Calcula o erro percentual

```

```

110
111  write(*,*) " "
112  write(*,*) "                                ERRO PERCENTUAL                                "
113  write(*,*) "+-----+-----+-----+-----+"
114  write(*,*) "|E (kV/cm) |   v_max (cm/s)   |   v_min (cm/s)   | E (%) |"
115  write(*,*) "+-----+-----+-----+-----+"
116
117  do i = 2,4
118    write(*,(' |      ",i,"      | ",f18.11," | ",f18.11," | ",f6.3," |")' ) i-1, pontos(1,i), pontos(101,i),&
119      abs(pontos(1,i)-pontos(101,i))/pontos(1,i)*100
120    write(*,*) "+-----+-----+-----+-----+"
121  end do
122  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara o ambiente grafico , exhibe o grafico e os rotulos
123
124  do i = 2,4
125    pontos(:,i) = pontos(:,i)*1.0d-5
126  end do
127
128  xmin = 0.
129  ymin = 0.
130  xmax = maxval(pontos(:,1))
131  ymax = maxval(pontos(:,4))*1.05
132  angulox = 0.0
133  anguloy = 0.0
134  just = 0.0
135
136  call plparseopts(PL_PARSE_FULL) ! analisa e processa argumentos da linha de comando
137  call plscolor(0,255,255,255)
138  call plscolor(1,0,0,0)
139  call plinit ! inicia o plplot
140
141  call pladv(0)
142  call plvpor(0.11d0,0.97d0,0.15d0,0.97d0)
143  call plwind(0.0d0,xmax,0.0d0,ymax)
144  call plbox('bcnst',10.0d0,2,'bcnstv',1.0d0,2)
145  call plmtex('l',5.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Velocidade (x10#u5#d cm/s)")
146  call plmtex('b',4.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt,"Temperatura (#uo#dC)")
147
148  do i = 2,4
149    call plline(pontos(:,1),pontos(:,i))
150  end do
151
152  if (forma==1) then
153    call plptex(pontos(90,1),pontos(10,4),angulox,anguloy,just,"(a) WZ")
154  else
155    call plptex(pontos(90,1),pontos(10,4),angulox,anguloy,just,"(b) ZB")
156  end if
157
158  call plptex(pontos(80,1),pontos(101,2)*0.80d0,angulox,anguloy,just,"1 kV/cm")
159  call plptex(pontos(80,1),pontos(101,3)*0.90d0,angulox,anguloy,just,"2 kV/cm")
160  call plptex(pontos(80,1),pontos(101,4)*0.95d0,angulox,anguloy,just,"3 kV/cm")
161
162  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Fecha a biblioteca grafica
163
164  call plend
165
166  case default
167    write(*,*) " "
168    write(*,*) "Voce escolheu terminar o programa."
169    write(*,*) " "
170  end select
171
172 end program vel_temp

```

ANEXO G

Rotina Computacional para o Cálculo da Mobilidade em Função da Temperatura

Programa desenvolvido utilizando a linguagem Fortran, na versão GNU Fortran 4.9.2, com o auxílio da biblioteca gráfica PLPLOT, versão 5.10.0, instalado em um computador Sony Vaio, modelo SVF15A17CBB, rodando o sistema operacional DEBIAN JESSIE.

Código G.1 – dist_est.f08

```

1  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
2  !!                                                                                                                                            !!
3  !! Programa: Produz um grafico para comparar a relacao entre a mobilidade eletronica e a temperatura das du--!!
4  !!           formas do semicondutor sulfeto de zinco.                                                                                       !!
5  !! Programador: Agamenon Lima do Vale                                                                                                       !!
6  !! Data de criacao: 28 de outubro de 2016                                                                                                   !!
7  !! Contato: agamenon.lv@gmail.com                                                                                                             !!
8  !! Direitos: Este programa e livre para copia, modificacao, ensino, modificacao, ...                                                                 !!
9  !! Copyright: This program is free software: you can redistribute it and/or modify it under the terms of the !!
10 !!           GNU General Public License as published by the Free Foundation, either version 3 of the      !!
11 !!           License, or (at your option) any later version.                                                                                   !!
12 !!                                                                                                                                            !!
13 !!           This program is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOU ANY WARRANTY;    !!
14 !!           without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.    !!
15 !!           See the GNU General Public License for mor details.                                                                              !!
16 !!                                                                                                                                            !!
17 !!           You should have received a copy of the GNU General Public License along with this program.    !!
18 !!           If not, see <http://www.gnu.org/licenses>.                                                                                       !!
19 !!                                                                                                                                            !!
20  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
21
22 program main
23
24   use constantes           ! Biblioteca de constantes
25   use plplot              ! Biblioteca grafica
26   use subrotinas         ! Biblioteca de rotinas extras
27
28   implicit none
29
30   !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Declaracao de variaveis
31
32   real(kind=plflt), dimension(101,2) :: alfa           ! Vetor com os valores de alfa
33   real(kind=plflt), dimension(101,3) :: pontos        ! Matriz de pontos para gerar o grafico.
34                                                         ! A primeira coluna e o eixo x (eixo dos
35                                                         ! tempos)
36   real(kind=plflt)           :: xmin                   ! Menor valor do eixo x
37   real(kind=plflt)           :: xmax                   ! Maior valor do eixo x

```

```

38  real(kind=plflt)           :: ymin           ! Menor valor do eixo y
39  real(kind=plflt)           :: ymax           ! Maior valor do eixo y
40  real(kind=plflt)           :: angulox        ! Inclinação do texto eixo x
41  real(kind=plflt)           :: anguloy        ! Inclinação do texto eixo y
42  real(kind=plflt)           :: just           ! Alinhamento do texto
43  real(dp), dimension(2)     :: e_0           ! Constante eletrostática estática
44  real(dp), dimension(2)     :: e_inf         ! Constante eletrostática de alta
45                                     ! frequência
46  real(dp), dimension(2)     :: omega         ! Frequência dos fonos, em hertz
47  real(dp), dimension(2)     :: gama         ! Constante
48  real(dp), dimension(101,2) :: z           ! Constante
49  real(dp), dimension(2)     :: raz_mas       ! Razão entre a massa efetiva e a massa
50                                     ! de repouso
51                                     ! do elétron
52  real(dp)                   :: rH_cort       ! Constante de Dirac
53  real(dp)                   :: rTemp        ! Temperatura do cristal, em kelvin
54  integer                    :: num_pont     ! Número de pontos da matriz acima
55  integer                    :: i, j         ! Variáveis que serão usadas nos laços DO
56  integer                    :: campo        ! Valor do campo elétrico, em kV/cm
57  character(len=11)          :: ccampo       ! Rotulo da figura
58
59  call system("clear")           ! Limpa a tela do terminal
60
61  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Entra com o campo elétrico e prepara para impressão
62
63  write(*,*) "Entre com o campo elétrico em kV/cm"
64  read(*,*) campo
65  write(ccampo,"(a3,1x,i1,1x,a5)") "E =",campo, "kV/cm"
66
67  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Abre o arquivo, lê os dados e fecha o arquivo
68
69  open(unit=1, file='zns.dat', action='read', access='sequential', status='old')
70
71  do i = 1, 2
72    read(unit=1,fmt='((f4.2,1x,f4.2,1x,e8.2,1x,f4.2))') e_0(i), e_inf(i), omega(i), raz_mas(i)
73  end do
74
75  close(unit=1)
76
77  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Cálculo dos parâmetros necessários para o cálculo da velocidade
78
79  rH_cort = dh_cgs/(2.*dpi)
80  omega = omega/rH_cort
81  pontos = 0.0d0
82
83  do i = 1, 101
84    pontos(i,1) = dble(i-1)
85  end do
86
87  do i = 1,2
88    gama(i) = 1.0d0/e_inf(i) - 1.0d0/e_0(i)
89    do j = 1, 101
90      z(j,i) = omega(i)*rH_cort/(2.0d0*dk_cgs*(pontos(j,1)+273.15d0))
91      alfa(j,i) = de_cgs**2*omega(i)**2*gama(i)/3.0d0*sqrt(2.0d0*(raz_mas(i)+dm_e_cgs)**3/(dpi*(dk_cgs*&
92        (pontos(j,1)+273.15d0)**3)))*&
93        exp(z(j,i))*2.0d0/(exp(2.0d0*z(j,i))-1.0d0)*besselk(1.0d0,z(j,i))
94    end do
95  end do
96
97  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Gera os pontos dos eixos das velocidades
98
99  do j = 2,3
100    do i = 1,101
101      pontos(i,j) = de_cgs*(campo*1.0d1/c)/alfa(i,j-1)
102    end do
103  end do
104
105  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Cálculo da mobilidade eletrônica
106
107  do i = 2,3
108    do j = 1, 101
109      pontos(j,i) = pontos(j,i)/(campo*1.0d3)

```

```

110     end do
111 end do
112
113 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Calcula o erro percentual
114
115 write(*,*) " "
116 write(*,*) "                ERRO PERCENTUAL                "
117 write(*,*) "+-----+-----+-----+-----+"
118 write(*,*) "| Forma | u (cm2/Vs) | u (cm2/Vs) | E (%) |"
119 write(*,*) "+-----+-----+-----+-----+"
120
121 do i = 2,3
122     if (i == 2) then
123         write(*, '( " | WZ | ",f18.11," | ",f18.11," | ",f6.3," |" )' ) pontos(1,i), pontos(101,i), &
124             abs(pontos(1,i)-pontos(101,i))/pontos(1,i)*100
125     else
126         write(*, '( " | ZB | ",f18.11," | ",f18.11," | ",f6.3," |" )' ) pontos(1,i), pontos(101,i), &
127             abs(pontos(1,i)-pontos(101,i))/pontos(1,i)*100
128     end if
129     write(*,*) "+-----+-----+-----+-----+"
130 end do
131
132 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Prepara o ambiente grafico, exhibe o grafico e os rotulos
133
134 xmin = 0.
135 ymin = 0.
136 xmax = maxval(pontos(:,1))
137 ymax = maxval(pontos(:,2:3))*1.05
138 angulox = 0.0
139 anguloy = 0.0
140 just = 0.0
141
142 call plparseopts(PL_PARSE_FULL) ! analisa e processa argumentos da linha de comando
143 call plscol0(0,255,255,255)
144 call plscol0(1,0,0,0)
145 call plinit ! inicia o plot
146
147 ! call plenv(xmin, xmax, ymin, ymax, 0, 0)
148
149 call pladv(0)
150 call plvpor(0.11d0,0.97d0,0.15d0,0.97d0)
151 call plwind(0.0d0, xmax, 0.0d0, ymax)
152 call plbox('bcnst',10.0d0,2, 'bcnstv',20.0d0,2)
153 call plmtex('l',5.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt, "Mobilidade (cm2#d/V.s)")
154 call plmtex('b',4.0_plflt,0.5_plflt,0.5_plflt, "Temperatura (#uo#dC)")
155
156 do i = 2,3
157     call plline(pontos(:,1), pontos(:,i))
158 end do
159
160 call plptex(70.0d0,220.0d0,0.0d0,0.0d0, just, ccampo)
161
162 call plptex(80.0d0,180.0d0, angulox, anguloy, just, "WZ")
163 call plptex(80.0d0,130.0d0, angulox, anguloy, just, "ZB")
164
165 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! Fecha a biblioteca grafica
166
167 call plend
168
169 end program main

```