

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO À PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

UM ESTUDO DE SÓLIDOS, LÍQUIDOS E AMORFOS DO
SEMICONDUTOR $ZnTe$ – UMA SIMULAÇÃO POR DINÂMICA
MOLECULAR

Bolsista: Geicilene Katrine de Paiva Soares, FAPEAM

MANAUS
2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO FINAL

PIB – E – 0078/2008

UM ESTUDO DE SÓLIDOS, LÍQUIDOS E AMORFOS DO
SEMICONDUTOR ZnTe – UMA SIMULAÇÃO POR DINÂMICA
MOLECULAR

Bolsista: Geicilene Katrine de Paiva Soares, FAPEAM

Orientador: Prof^o Dr^o José Wilson Matias Pinto

MANAUS

2009

RESUMO

A presença dos semicondutores em aparelhos eletrônicos cresce a cada dia e em diversas formas. Exemplos bem comuns são os chips que podem ser encontrados em celulares, computadores e os LEDs –Diodo Emissor de Luz – que estão presentes em semáforos e TVs. Tendo em vista a grande demanda na fabricação de diversos semicondutores dopados, surge a necessidade de conhecimentos mais aprofundados a cerca desse componente eletrônico. Sendo assim, fez-se um estudo direcionado ao semicondutor ZnTe (Telureto de Zinco) com o objetivo de conhecer o seu comportamento em três fases: sólido, líquido e amorfo. Para se estudar o comportamento desse semicondutor foi utilizado o método de Dinâmica Molecular, no qual usamos um código fonte feito em FORTRAN, que é uma linguagem de programação. Foi de grande importância ter um conhecimento prévio sobre linguagens de programação para enfim realizar as simulações. O método consiste em gerar uma célula unitária, blenda de zinco, e multiplicando esta nas três direções espaciais (x, y, z) montamos um sólido cristalino de tamanho $30,5175 \text{ \AA}$, definindo assim o tamanho da caixa de simulação. O procedimento consistiu em aquecer o sistema (aquecimento) de 50 em 50 K até chegarmos à temperatura de 2500 K. Neste processo fizemos a termalização do sistema em cada aumento da temperatura. Partindo dos dados coletados nas simulações foi possível visualizar, com a ajuda do programa JMOL, as três formas que simulamos, sendo estas o estado sólido, líquido e amorfo do semicondutor em estudo: o ZnTe. As simulações foram realizadas utilizando dois corpos e logo em seguida três corpos. Após a montagem dos gráficos foram feitas comparações entre os pontos obtidos tanto das simulações utilizando dois corpos quanto das simulações utilizando três corpos. Os valores mais importantes estavam relacionados com o gráfico utilizando três corpos e a partir dele pegou-se os resultados do aquecimento no qual foi possível visualizar o local onde ocorreu a transição de fase do sólido para o líquido e no gráfico do resfriamento a transição de fase do líquido para o amorfo.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	04
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	05
3. MÉTODOS UTILIZADOS	07
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES	08
4.1 Simulação com Dois Corpos	08
4.2 Simulação com Três Corpos	09
5. CONCLUSÕES	13

1. INTRODUÇÃO

Em um mundo em que a tecnologia evolui a cada dia, cresce a busca por rapidez e praticidade em cada aparelho eletrônico, que vai desde a automação industrial até os produtos de eletrônica de consumo, mas ainda é comum encontrar problemas nesses aparelhos ou outros que apresentam pouco rendimento. As soluções para esses problemas ainda são poucas e por isso são feitos investimentos, que incluem as pesquisas, afim de promover soluções e novas aplicações aos dispositivos microeletrônicos, entre eles os semicondutores.

Os semicondutores estão presentes em diversos dispositivos como, por exemplo, circuitos eletrônicos, células solares, diodos emissores de luz-LEDs, entre outros.

Em nosso projeto vamos simular o semicondutor ZnTe em três fases: sólido, líquido e amorfo com o objetivo de conhecer e relatar o seu comportamento nessas três fases e em diversas situações como a transição de uma fase para a outra, as variações de temperatura.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O semicondutores estão inseridos em uma classe intermediária entre condutores e isolantes, pois eles têm condutividade elétrica melhor do que os isolantes, porém não são bons condutores. Entretanto, eles são extremamente úteis para a eletrônica.

Um semicondutor puro (ou intrínseco) apresenta uma condutividade elétrica bastante limitada, porém se pequenas quantidades de impurezas são incorporadas à sua estrutura cristalina, suas propriedades elétricas alteram-se significativamente. Dizemos que esse é um semicondutor dopado (ou extrínseco). A disponibilidade de técnicas de dopagem controlada permite alterar localmente as propriedades do semicondutor. Isto por sua vez permite o desenvolvimento de inúmeros dispositivos, eletrônicos, ópticos e sensores.

Existe um grande número de materiais semicondutores. A Figura 1 mostra alguns dos semicondutores mais usados, incluindo o ZnTe.

Classificação		Exemplos
Elementares		Si, Ge
Compostos III-V	Binários	GaAs, InP, GaSb, AlP, AlAs, AlSb, GaN, GaP, InAs, InSb
	Temários	$Al_xGa_{1-x}As$, $In_xGa_{1-x}P$, $GaAs_xP_{1-x}$,
	Quaternários	$In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$
Compostos II-VI	Binários	ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe, CdTe, HgS
	Temários	$Hg_xCd_{1-x}Te$

Figura 1: Materiais semicondutores.

Esses semicondutores possuem três tipos de bandas de energia:

- 1) Banda de Valência – é formada por níveis de energia ocupada por elétrons semi livres, que estão um pouco mais separados do núcleo que os demais;
- 2) Banda de Proibida – é o intervalo entre as Bandas de Valência e Condução em que é necessária uma quantidade de energia suficiente para que o elétron efetue a transição entre essas bandas de energia.
- 3) Banda de Condução – é o intervalo de energia na qual possui energia superior à Banda de Valência. É nessa banda que ocorre o transporte dos elétrons.

Quando ocorre o resfriamento de um semicondutor até o zero absoluto (somente possível através de simulações) ele apresenta todos os estados da banda de valência ocupados e nenhum elétron ocupando estados da banda de condução, por isso que ele apresenta o comportamento de um torna isolante.

A visualização dos diversos comportamentos dos semicondutores está diretamente relacionada à simulação computacional. Um exemplo bem simples é o resfriamento

do semicondutor à temperatura de 0 K (zero absoluto), pois não é possível chegar a esse valor da temperatura experimentalmente. Surge então a necessidade de usar as simulações computacionais como ferramenta para a compreensão entre os fenômenos físicos e químicos em um sistema da matéria condensada.

3. MÉTODOS UTILIZADOS

O início do desenvolvimento do projeto foi marcado pelo levantamento bibliográfico a cerca do material semiconductor ZnTe. As buscas foram feitas em diversas fontes como, por exemplo, na internet, na biblioteca da Instituição, entre outros. Em seguida foi feito um estudo introdutório sobre Mecânica Estatística que serviu como base para a próxima etapa: estudo sobre Dinâmica Molecular.

A teoria estudada sobre a Dinâmica Molecular foi baseada nos arquivos coletados no início do projeto e a partir de artigos científicos que foram encontrados. Após isso, o estudo foi direcionado para o código fonte do programa de Dinâmica Molecular que estava escrito na linguagem de programação FORTRAN. Essa linguagem de programação teve que ser estudada para haver a compreensão do código fonte.

Compreendido o código fonte a próxima etapa foi realizar as simulações que foram divididas em duas etapas:

- 1^o Simulação do aquecimento e resfriamento do semiconductor ZnTe usando dois corpos;
- 2^o Simulação do aquecimento e resfriamento do semiconductor ZnTe usando três corpos.

As simulações, tanto aquecimento quanto resfriamento do semiconductor ZnTe, consistiam em três etapas: inicialização – etapa de definição das condições iniciais; aquecimento /resfriamento – etapa onde ocorre a mudança de temperatura; termalização – etapa em que o sistema é levado ao equilíbrio nas condições estabelecidas na simulação.

Com os resultados das termalizações foram feitos gráficos em que no eixo Y foram colocadas as médias das Energias divididas pelo número de partículas. Já no eixo X foram colocadas as médias das temperaturas referentes a cada termalização.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com o auxílio do método de Dinâmica Molecular obtemos os seguintes gráficos utilizando os resultados das simulações que foram realizadas no semiconductor ZnTe.

4.1 Simulação com Dois Corpos

A simulação com dois corpos refere-se aos elementos Zn (Zinco) e Telúrio (Te) do semiconductor na seguinte ordem Zn–Zn, Zn–Te e Te–Te.

A princípio foi feita a inicialização para que fossem definidas as condições iniciais do semiconductor ZnTe. Em seguida foi feito o aquecimento desse semiconductor alternando sempre com a termalização do mesmo. A temperatura inicial foi 100 K e a final foi 2500 K com a variação de temperatura no valor de 50 K. A Figura 2 mostra a transição de fase do semiconductor do estado sólido para o estado líquido.

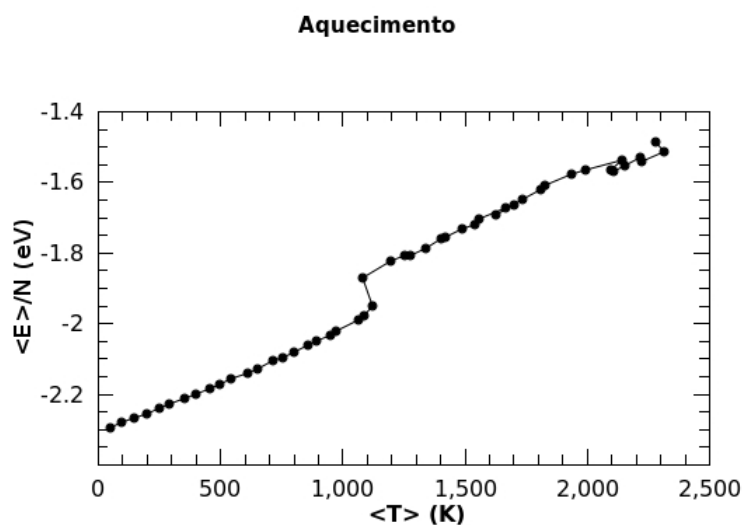


Figura 2: Aquecimento do semiconductor ZnTe.

A Figura 3 refere-se ao gráfico em que mostra os resultados do resfriamento tendo como temperatura inicial 2500 K. Este resfriamento foi feito à taxa de 50 K, sendo esta a mesma taxa do aquecimento.

Juntou-se o gráfico do aquecimento com o gráfico do resfriamento para mostrar que o semiconductor quando resfriado não volta a ser um sólido e sim um amorfo, como está demonstrado na Figura 4.

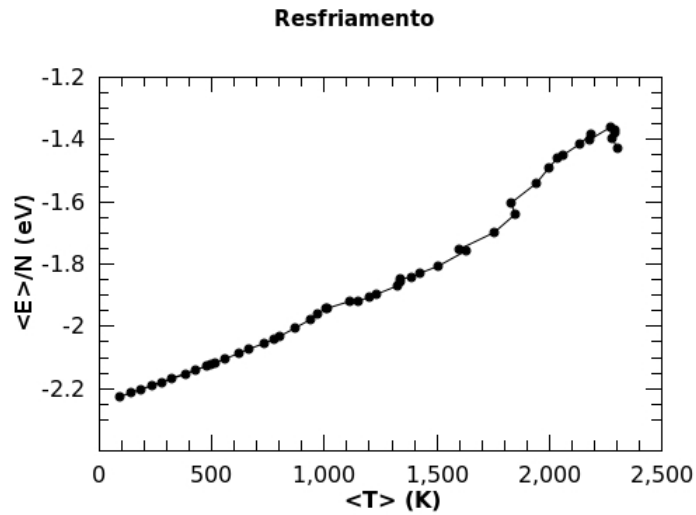


Figura 3: Resfriamento do semicondutor ZnTe.

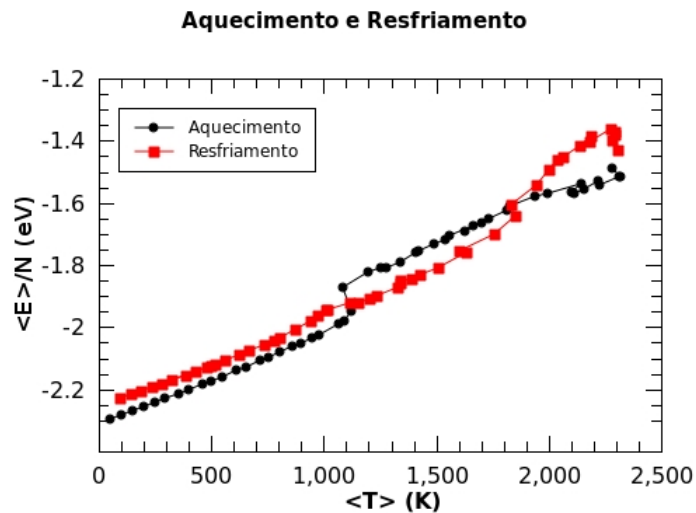


Figura 4: Aquecimento e resfriamento do semicondutor ZnTe.

4.2 Simulação com Três Corpos

A simulação com parâmetros para interação de três corpos refere-se a Zn-Te-Zn e Te-Zn-Te.

Começou-se com a etapa de inicialização do sistema e o aquecimento desse semicondutor com temperatura de 100 K até 2500 K e a variação da temperatura ocorreu em um intervalo de 100 K. Obteve-se os resultados das termalizações e foi criado um gráfico do aquecimento a partir desses resultados. Assim como mostra a Figura 5.

Quando terminado o aquecimento passou-se para outra etapa: o resfriamento do semicondutor. Variando-se a temperatura em 100 K os resultados das termalizações estão sendo mostradas na Figura 6.

Foi feita uma análise do gráfico do aquecimento (Figura 5) e percebeu-se que

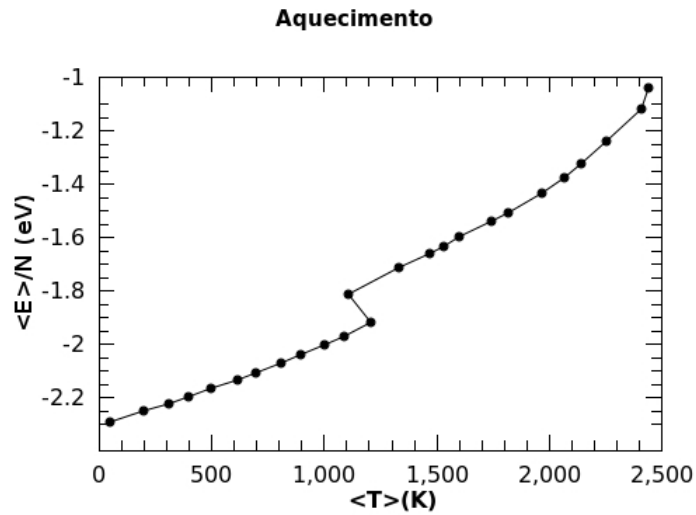


Figura 5: Aquecimento do semicondutor ZnTe.

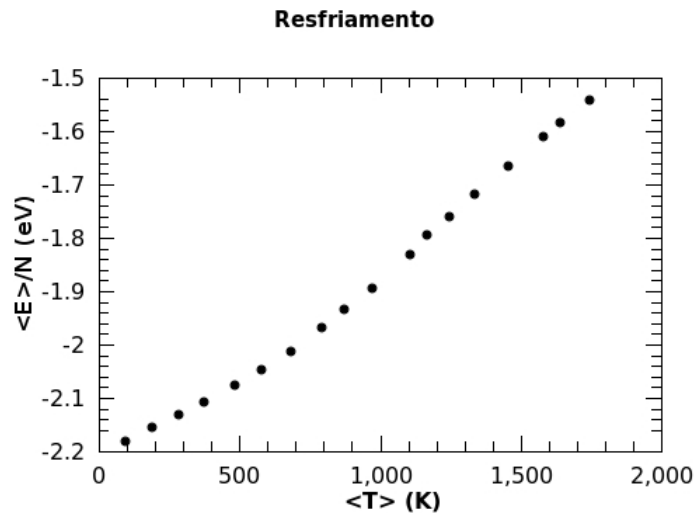


Figura 6: Resfriamento do semicondutor ZnTe.

a partir da temperatura de 1800 K o semicondutor começou a se comportar de maneira anômala, com isso, resolveu-se parar o aquecimento a essa temperatura e iniciar outro processo de resfriamento.

Traçando duas retas no gráfico do resfriamento, Figura 7, achamos o local onde ocorre a transição do líquido para o amorfo, como mostra a figura abaixo.

A partir dos resultados das interações de três corpos obtidos através das simulações, pode-se visualizar o semicondutor ZnTe em três fases: Sólido, Líquido e Amorfo, como mostram as figuras abaixo:

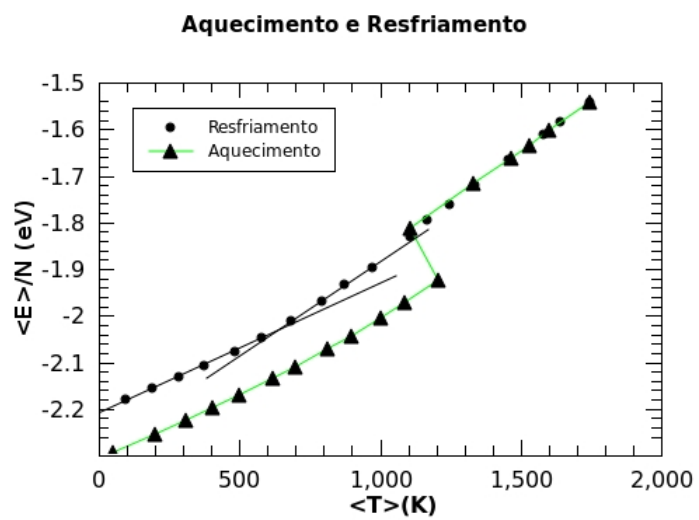


Figura 7: Aquecimento e Resfriamento do semiconductor ZnTe.

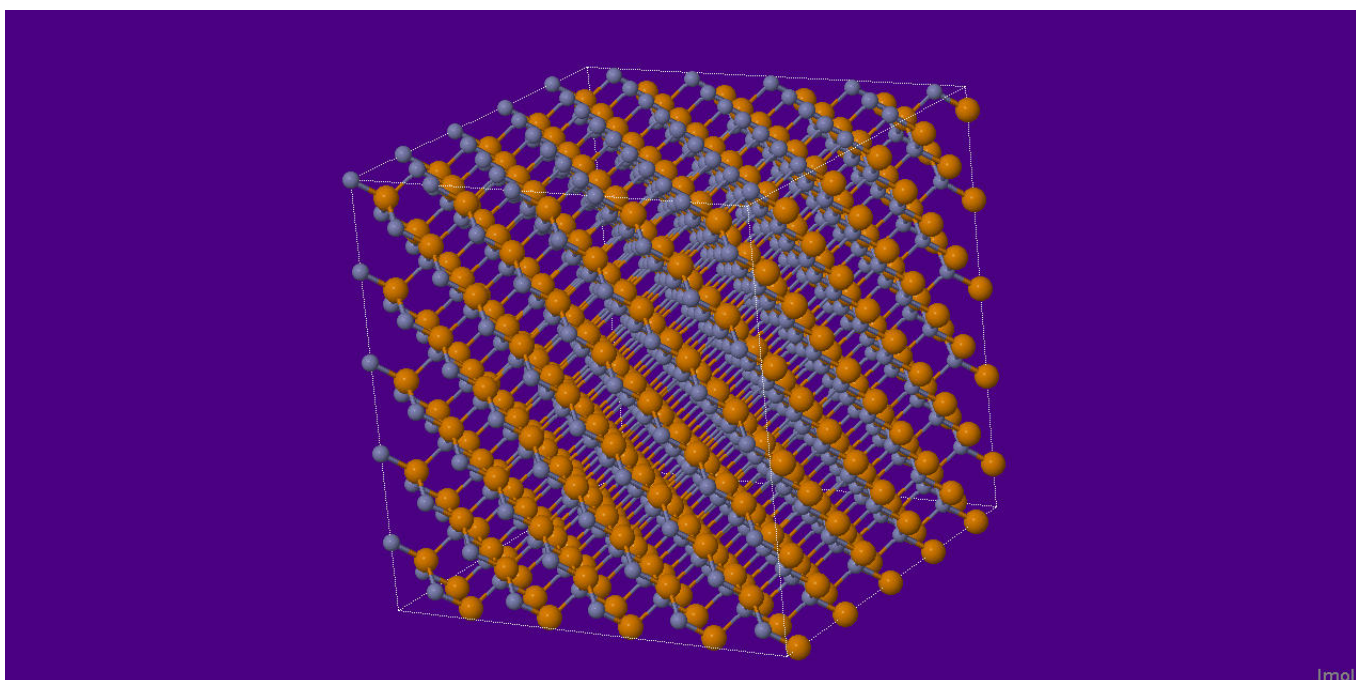


Figura 8: Semicondutor ZnTe em sua forma cristalina.

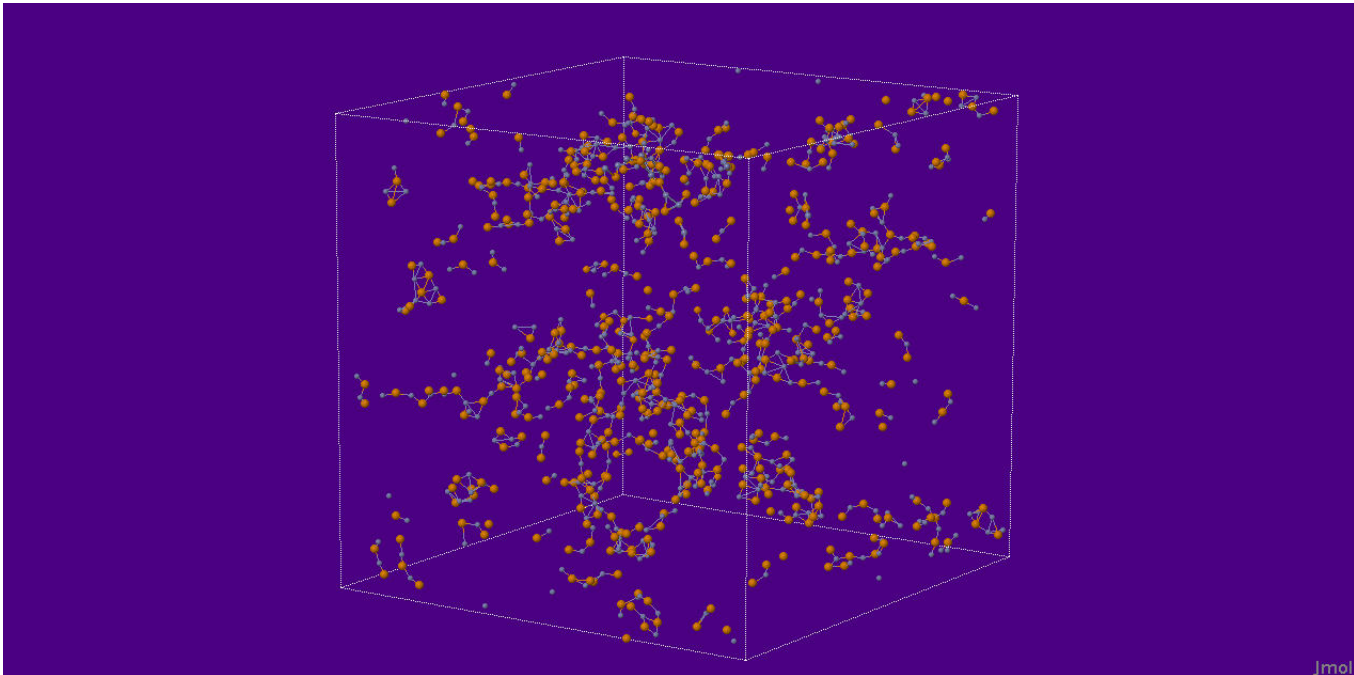


Figura 9: Semicondutor ZnTe em sua forma líquida.

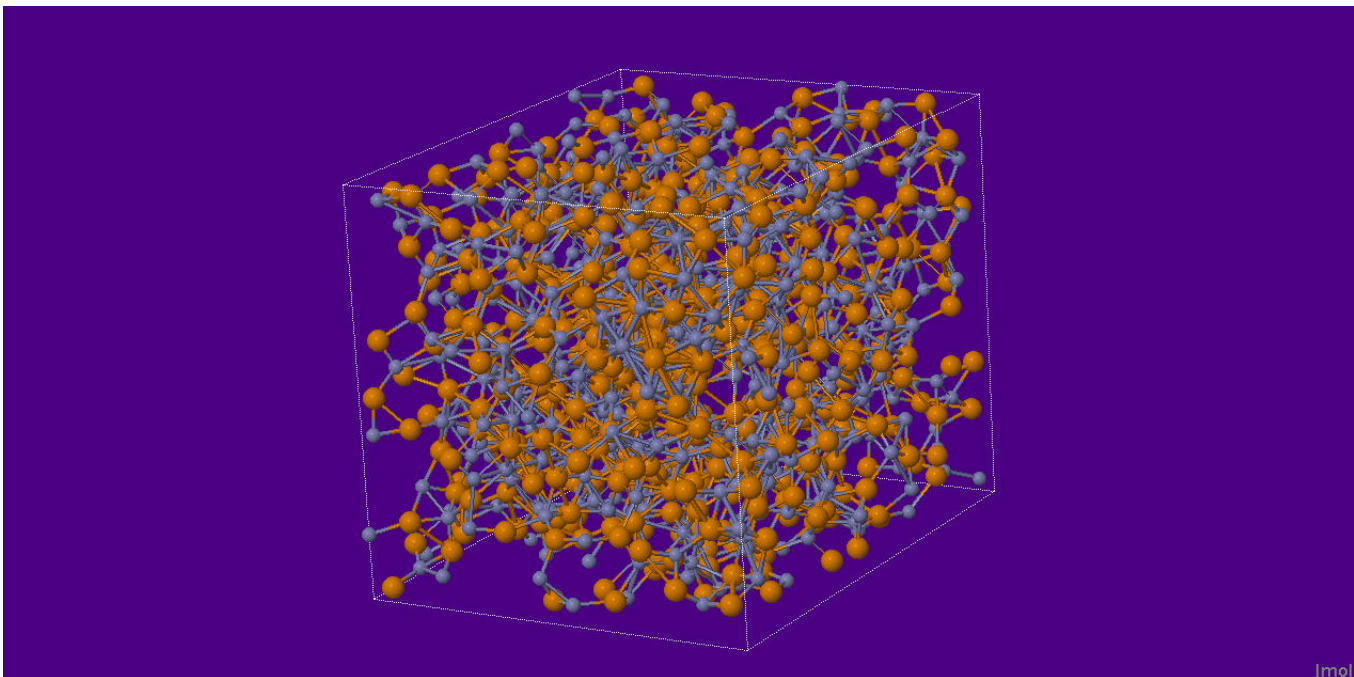


Figura 10: Semicondutor ZnTe em sua forma amorfa.

5. CONCLUSÕES

As diversas aplicações dos semicondutores refletem a sua grande importância, tanto nas indústrias quanto em eletrônicos.

Por isso, vem sendo feito estudos direcionados a essa área para o desenvolvimento de novas tecnologias que influenciam diretamente o mercado consumidor. Pois essas tecnologias trazem facilidades ao usuário.

A partir da busca que foi realizada para obtenção de conteúdos relacionados aos semicondutores, encontramos diversos livros e artigos que citam experiências relacionadas a esses dispositivos. Com isso, o projeto pode ser desenvolvido atingindo o objetivo principal: conhecer o comportamento do semicondutor em três fases – sólido, líquido e amorfo. Sendo assim, conseguimos compreender a teoria através das experiências realizadas em computadores que serviram como laboratório para realizar as simulações.

REFERÊNCIAS

- [1] ANDRADE, L. N. Breve Introdução ao Latex.
- [2] BORGES, D. S.; RINO, J. P. Interaction potential for ZnTe: A molecular dynamics study. *Physical Review B*, v. 72, p. 014107, 2005.
- [3] BORGES, D. S.; RINO, J. P.; MOTA, R.C.; SILVA, M. A. P. Molecular dynamics simulations on the local order of liquid and amorphous ZnTe. *The Journal Of Chemical Physics*, 13 mai. 2008.128, 184704.
- [4] FRENKEL, D.; SMIT, B. *Understanding Molecular Simulation*.
- [5] JAIN, M.; GODLEVSKY, V.V.; DERBY, J.J.; CHELIKOWSKY, J. R. First-principles simulations of liquid ZnTe. *Physical Review B*, v. 53, p. 035212
- [6] LEE, G. D.; IHM, J. Microscopic study of the pressure-induced structural phase transition of ZnTe. *Physical Review B*, v. 53, n. 12, p. 7622-7625, 1996.
- [7] MELO, H. A.; BIASI, R. S. *Introdução à Física dos Semicondutores*.
- [8] RINO, J. P.; STUDART, N. Um potencial de interação para o estudo de materiais e simulações por Dinâmica Molecular. *Química Nova*, 24, n. 6, p. 838-845, 2001.

CRONOGRAMA EXECUTADO

Descrição	Ago 2008	Set	Out	Nov	Dez	Jan 2009	Fev	Ma r	Abr	Mai	Jun	Jul
Levantamento bibliográfico do Material ZnTe nas fases sólido, líquido e amorfo	X	X										
Estudo Introdutório de Mecânica Estatística			X	X	X							
Estudo sobre Dinâmica Molecular						X	X	X				
Estudo do Programa (código fonte) de Dinâmica Molecular									X	X	X	
Elaboração do Resumo e Relatório Final											X	
Preparação da Apresentação Final para o Congresso												X

Figura 11: Cronograma das Atividades.