บทที่ 2

สมบัติของซิงค์ซัลไฟด์

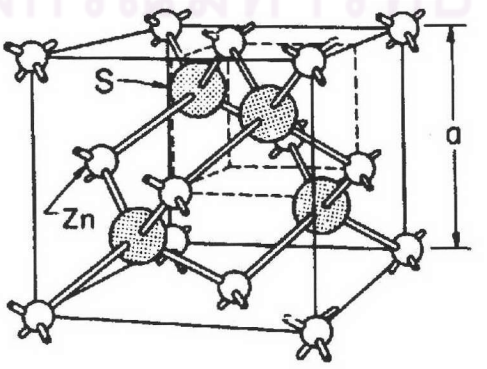
ซิงค์ซัลไฟด์เป็นสารกึ่งตัวนำในกลุ่มที่เป็นสารประกอบเชิงคู่ (Binary compound) ซึ่งเป็นการรวมตัวกันของธาตุในหมู่ II ซึ่งมีวาเลนซ์อิเล็กตรอน 2 ตัว กับธาตุในหมู่ VI ซึ่งมีวาเลนซ์อิเล็กตรอน 6 ตัว

2.1 โครงสร้างผลึกของซิงค์ซัลไฟด์ [5,6]

โครงสร้างผลึกของซิงค์ซัลไฟด์จะมีลักษณะโครงสร้าง 2 แบบ คือ Cubic Zinc Sulfide Structure (Zincblende) และ Hexagonal Zinc Sulfide Structure (Wurtzite) ซึ่งมีรายละเอียดดังนี้

1) Cubic Zinc Sulfide Structure (Zincblende)

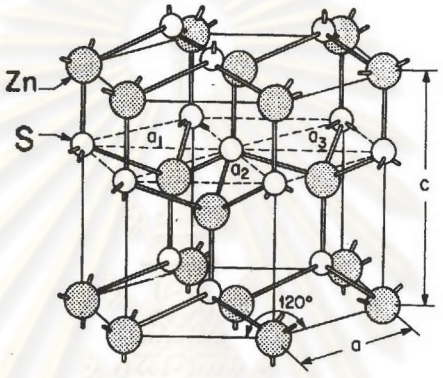
โครงสร้างนี้มีลักษณะโครงสร้างผลึกเหมือนกับโครงสร้างแบบเพชร แต่ต่างกันตรงที่อะตอมทั้งคู่ที่มายึดเหนี่ยวกันเป็นพันธะโควาเลนซ์จะเป็นอะตอมต่างชนิดกัน แต่ละอะตอมจะมีสี่อะตอมต่างชนิดล้อมรอบอยู่ โดยมี basis เป็นอะตอมต่างชนิดกันอยู่ที่ 0 0 0 และที่ $\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}$ ดังนั้นโครงสร้างนี้จึงเหมือนกับการนำโครงสร้างผลึกย่อย (Sublattice) แบบ face-centered cubic lattice ที่มีอะตอมต่างชนิดกันมาวางซ้อนเหลื่อมกันเป็นระยะ $\frac{1}{4}$ ตามแนวเส้นทแยงมุมของลูกบาศก์ โดยในหนึ่งหน่วยเซลล์จะมี 8 อะตอม ซึ่งประกอบด้วยอะตอมของ Zn ที่ตำแหน่ง 0 0 0 , $\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2} 0$, $0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$ และอะตอมของ S ที่ $\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}$, $\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}$, $\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{3}{4}$ แสดงดังรูปที่ 2.1



รูปที่ 2.1 แสดงโครงสร้างแบบ Cubic Zinc Sulfide Structure (Zincblende) [5]

2) Hexagonal Zinc Sulfide Structure (Wurtzite)

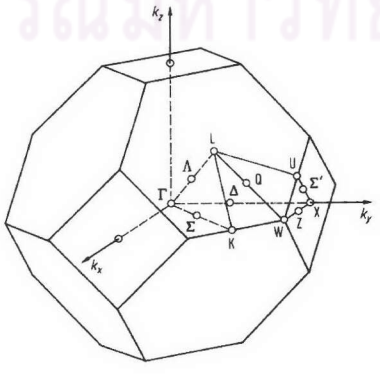
โครงสร้างนี้มีพันธะของอะตอมในโครงสร้างเหมือนกับ Zincblende แต่แตกต่างกันที่การจัดเรียงตัวระนาบของอะตอมในชั้นที่ 2 ขึ้นไป โดยเป็นโครงสร้างที่เกิดจากการนำโครงผลึกย่อยแบบ Hexagonal Closed-Packed ที่มีอะตอมต่างชนิดกันมาวางซ้อนเหลื่อมกันเป็นระยะ $\frac{5}{8}$ ตามแนวแกน C โดยในหนึ่งหน่วยเซลล์มี 8 อะตอม ซึ่งประกอบด้วยอะตอมของ Zn 4 อะตอม และอะตอมของ S 4 อะตอม แสดงดังรูปที่ 2.2



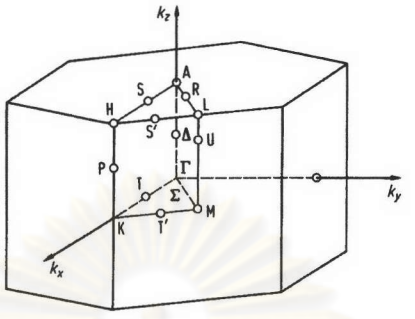
รูปที่ 2.2 แสดงโครงสร้างแบบ Hexagonal Zinc Sulfide Structure (Wurtzite) [5]

2.2 โครงสร้างแถบพลังงานของซิงค์ซัลไฟด์ [5,7]

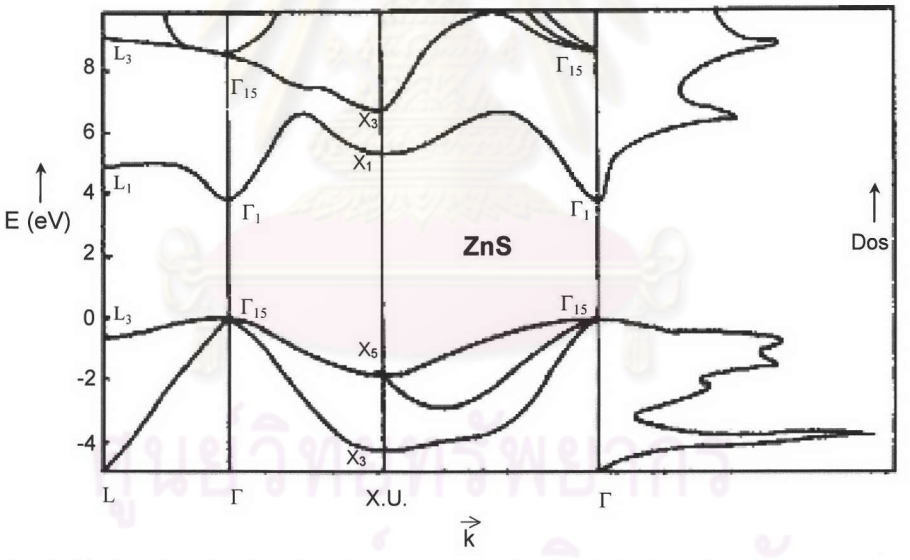
จากโครงสร้างผลึกของซิงค์ซัลไฟด์ทั้งแบบ Zincblende และ Wurtzite ซึ่งจะมีบริลลันโซล (Brillouin Zone) ของโครงสร้างผลึกทั้งสอง แสดงดังรูปที่ 2.3 และ 2.4 ตามลำดับ ซิงค์ซัลไฟด์มีโครงสร้างของแถบพลังงานเป็นแบบตรง คือ มีการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนที่ตำแหน่งสูงสุดของแถบ วาเลนซ์ไปยังจุดต่ำสุดของแถบนำที่ตำแหน่ง Γ ของบริลลันโซนทั้ง Zincblende และ Wurtzite แสดงดังรูปที่ 2.5



รูปที่ 2.3 แสดงบริลลันโซนของโครงสร้างผลึกของซิงค์ซัลไฟด์แบบ Zincblende [5]



รูปที่ 2.4 แสดงบริลลันโซนของโครงสร้างผลึกของซิงค์ซัลไฟด์แบบ Wurtzite [5]



รูปที่ 2.5 แสดงโครงสร้างแถบพลังงานของ ZnS ที่มีโครงสร้างผลึกแบบ Zincblende [7]

สำหรับสมบัติอื่นๆ ของซิงค์ซัลไฟด์ทั้งโครงสร้างแบบ Zincblende และ Wurtzite แสดงในตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 สมบัติของซิงค์ซัลไฟด์ [8]

Property	ZnS
- Zinc Balance Lattice Parameter a_0 at 300K	0.541 nm
- Zinc Blende Density-Neighbour Dist at 300K	0.234 nm
- Zinc Blende Density at 300K	4.11 $g \cdot cm^{-3}$
- Wurtzite Lattice Parameter at 300K	a_0 = 0.3811 nm
	c_0 = 0.6234 nm
	c_0/a_0 = 1.636
- Wurtzite Nearest Neitghbour Dist at 300K calculate as 0.375 c_0 which would be correct in ideal hexagonal structure of c_0/a_0 = 1.636	0.234 nm
- Wurtzite Density at 300K	3.98 $g \cdot cm^{-3}$
- Phase Stable at 300K	blende & wurtzite
- Melting Point	both occur in nature
- Dielectric Const, Low frequency	1850°C
Zincblende Structure :	8.9
Wurtzite Structure :	mean, 9.6
- Reflective Index	
Zincblende Structure :	2.368
Wurtzite Structure :	2.356, 2.378
- Energy Gap E_g at 300K	
Zincblende structure :	3.68 eV, Direct
Wurtzite structure :	3.911 eV, Direct
- Hole Hall Mobility at 300K for n = lowish	165 $cm^2/V \cdot s$
- Hole Hall Mobility at 300K for n = lowish	5 $cm^2/V \cdot s$

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย