EFEITOS DE ANISOTROPIA NO TRANSPORTE DE ELÉTRONS EM MONOCAMADAS DE FÓSFORO NEGRO

Ismael da GraÇa Albuquerque [1], Silvia Helena Roberto de Sena [2]

RESUMO

O fósforo negro (FN) é a forma alotrópica mais estável do fósforo à temperatura ambiente. Sua estrutura cristalina consiste em camadas 'enrugadas' interligadas por força de Van der Waals de forma similar à grafite, o que permite um processo de exfoliação ou clivagem mecânica, técnica também utilizada para isolar a primeira monocamada de FN, o fosforeno. A estrutura não plana do fosforeno o distingue dos demais cristais bidimensionais. Ao longo da direção armchair encontra-se uma superfície corrugada, enquanto na direção 'zigzag' os átomos parecem estar organizados na forma de duas subcamadas perfeitamente planas. Uma das características do fosforeno que mais chama a atenção da comunidade científica é a grande anisotropia do seu espectro eletrônico nas proximidades do nível de Fermi da primeira zona de Brillouin. O presente trabalho teve como objetivo central investigar como essa anisotropia da dispersão eletrônica afeta suas propriedades de transporte. Para isso, obtivemos a estrutura de bandas usando o modelo tight-binding e, a partir dela, conseguimos uma aproximação para as bandas de energia na vizinhança do nível de Fermi. Feito isso, aplicamos o modelo da massa efetiva para analisar a dependência angular ou direcional da transmissão eletrônica através de barreiras de potencial em monocamadas de fósforo negro.

Palavras-chave:

fosforeno. espectro eletrônico. massa efetiva. anisotropia. transporte eletrônico.

[1] UNILAB, ICEN, Discente, e-mail: ismael.1996_@hotmail.com
[2] UNILAB, ICEN, Docente, e-mail: silviahelena@unilab.edu.br

INTRODUÇÃO

O fósforo negro (FN) é a forma alotrópica mais estável do fósforo à temperatura ambiente. Sua estrutura cristalina consiste em camadas enrugadas interligadas por força de Van der Waals de forma similar à grafite como mostrado na Fig.1, o que permite um processo de exfoliação ou clivagem mecânica, técnica utilizada para se isolar a primeira monocamada de FN, o fosforeno [1]. O primeiro trabalho sobre essa nova classe de material bidimensional foi publicado online em 2 de março de 2014 na prestigiosa revista Nature Nanotechnology. Nesse trabalho, um grupo de pesquisadores da China anunciou a fabricação de um transistor de efeito de campo baseado em filmes finos de fósforo negro com espessuras inferiores a 7,5 nm [2]. Logo em seguida, no dia 17 de março de 2014, um grupo de pesquisadores americanos divulgou a obtenção da primeira camada de fosforeno [1]. Esse trabalho revelou que a monocamada de FN é estável, flexível, apresentando portadores do tipo p com alta mobilidade, além de confirmar a previsão de um gap de energia direto superior ao do 'bulk' de FN. Ainda nesse trabalho, cálculos de DFT sugeriram que o tamanho do gap de energia de filmes finos de FN é extremamente sensível ao número de camadas N que compõem o filme, variando linearmente com 1/N.

Uma das características do fosforeno que mais chamou a atenção foi a grande anisotropia da sua dispersão eletrônica nas proximidades do nível de Fermi da primeira zona de Brillouin [3]. Tanto a banda de condução quanto a banda de valência mostram um comportamento mais dispersivo ao longo da direção Γ→X (direção ‘armchair’ no espaço real), apresentando bandas mais horizontais na direção Γ→Y (direção ‘zigzag’ no espaço real). Esse fato gera uma grande anisotropia nas massas dos elétrons e buracos, o que por sua vez dá origem a uma condutividade também anisotrópica e uma mobilidade ao longo da direção ‘armchair’ maior que ao longo da direção 'zigzag'.

Muita investigação foi feita ao longo dos últimos anos a respeito das propriedades eletrônicas e óticas de monocamadas e multicamadas de fosforeno. Grande parte desses trabalhos foi voltada ao estudo de efeitos anisotrópicos na condução, bem como no controle de tal anisotropia através de tensões mecânicas aplicadas às camadas [4-7]. No entanto, tais estudos exploram as propriedades de transporte ao longo das direções ‘armchair’ e ‘zigzag’, não investigando completamente o efeito da anisotropia ao longo de uma direção genérica. Dessa forma, o presente trabalho obteve, por meio de uma abordagem analítica, a transmissão eletrônica através de barreiras de potencial ao longo de direções arbitrárias.

METODOLOGIA

Utilizamos o Hamiltoniano tight-binding (TB) proposto na referência [3] para calcular o espectro eletrônico da monocamada de FN. O método consiste basicamente em supor que a função de onda do elétron no cristal é dada pela superposição das funções de Bloch , que por sua vez, são escritas em termos dos orbitais atômicos. Quando aplicamos a condição de minimização da energia, nosso problema se reduz a encontrar a solução da equação secular

onde é a matriz de transferência cujos elementos são

e é a matriz de overlap com elementos dados por

A partir das bandas de energia obtidas pelo modelo TB, fizemos uma aproximação para pequenos vetores de onda em torno do ponto gama, obtendo uma fórmula simplificada para as bandas de mais baixa energia, encontrando

onde os parâmetros que aparecem na equação acima dependem dos fatores estruturais da rede do fosforeno, bem como dos termos de hopping do modelo TB. Em seguida, calculamos as massas efetivas ao longo das direções armchair e zigzag, obtendo os seguintes valores:

Finalmente utilizamos a teoria da massa efetiva para descrever elétrons no fosforeno pelo Hamiltoniano

e encontrar a transmissão eletrônica através de barreiras de potencial quadrada com diferentes orientações.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

No que diz respeita ao cálculo do espectro eletrônico, a Fig. 2 exibe uma comparação entre as bandas de energia obtidas pelo modelo TB com 10 (Linha azul tracejada) e 5 parâmetros de hopping(linha vermelha). Em ambos os casos o espectro apresenta um caráter altamente anisotrópico, indicando uma velocidade de grupo dos portadores mais elevados na direção *armchair* que na direção *zigzag*. Note que em torno do ponto gama o principal efeito da inclusão de mais parâmetros é aumentar o valor de energia.

Na Fig.3 temos a comparação entre o modelo TB e o modelo contínuo (válido para pequenos vetores de onda). Perceba que a última aproximação tem uma boa concordância com o espectro obtido via TB nas proximidades do ponto gama.

Já o hamiltoniano gerado pela aproximação de massa efetiva nos fornece curvas de

energia com forma de elipse como mostrado na Fig. , Uma vez que a massa do elétron tem valores diferentes nas direções x e y.

Através deste hamiltoniano pode se demonstrar que para a conservação da probabilidade ser respeitada devamos ter uma nova definição da corrente de probabilidade dada por

note que ao fazermos as massas serem iguais, obteremos o caso particular que é comumente utilizado no livro texto [8].

Calculamos também a transmissão eletrônica através de uma barreira de potencial com orientação arbitrária no plano xy obtendo um coeficiente de transmissão para energias menores que a altura da barreira dada por

onde gama1(2) e beta1(2) são as partes reais e imaginárias do vetor de onda na direção de propagação na região fora (dentro) da barreira. Quando a energia do elétron for superior a altura da barreira, gama passa a ser imaginário e obtemos um comportamento oscilatório.

CONCLUSÕES

No presente trabalho foi possível determinar a estrutura de bandas do fosforeno, fazendo a aproximação do modelo TB com 5 e 10 parâmetros de hopping, onde é possível perceber que o espectro de energia é bastante anisotrópico nas proximidades do nível de Fermi, apresentando um comportamento mais dispersivo na direção *armchair* que na *zigzag*. Ainda foi notado que para o caso de 10 parâmetros de hopping existe um aumento no gap de energia quando comparado ao modelo com 5 parâmetros. A partir desse resultado, foi derivado o modelo contínuo e determinado a massa efetiva em torno do ponto Γ, verificando que a massa é maior na direção *armchair* que na *zigzag* .

Finalmente, utilizamos a teoria da massa efetiva para descrever elétrons no fosforeno e verificamos que a forma do espectro de energia era uma elipse. em seguida utilizamos uma barreira de potencial cuja sua orientação admite uma direção qualquer no plano xy e mostramos que a conservação de probabilidade nos permite admitir uma mudança na definição da corrente de probabilidade. por fim, vimos essa anisotropia influenciar no resultado do coeficiente de transmissão.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a universidade por fornecer apoio financeiro através da bolsa de iniciação científica.

REFERÊNCIAS

[1] LIU, H. et al. Phosphorene: An Unexplored 2D Semiconductor with a High Hole Mobility, ACS Nano 8, 4033 (2014).

[2] LI, L. et al. Black phosphorus field-effect transistors, Nat. Nanotechnol. 9, 372 (2014).

[3] RUDENKO, A. N.; KATSNELSON, M. I., Quasiparticle band structure and tight-binding model for single- and bilayer black phosphorus, Phys. Rev. B 89, 201408(R) (2014).

[4] KOU, L.; CHEN, C.; SMITH, S. C. Phosphorene: Fabrication, Properties, and Applications, J. Phys. Chem. Lett. 6 (14), 2794-2805 (2015).

[5] CARVALHO, A. et al. Phosphorene: from theory to applications. Nat. Rev. Mater. 1, 16061 (2016).

[6] RODIN, A. S.; CARVALHO, A.; CASTRO NETO, A. H. Strain-induced gap modification in black phosphorus, Phys. Ver. Lett. 112, 176801 (2014).

[7] FEI, R.; YANG, L., Strain-Engineering the Anisotropic Electrical Conductance of Few-Layer Black Phosphorus, Nano Lett. 14, 2884-2889 (2014).

[8] Tannoudji, C. C. Quantum Mechanics. vol I, Wiley, New York, (1977).