TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS BIDIMENSIONAIS ANISOTRÓPICOS

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

RESUMO

Anisotropia está presente em vários sistemas e, dependendo dos materias com os quais estamos lidando, tal característica pode ter influência em propriedades fundamentais, tais como massa efetiva, velocidade de grupo e níveis de energia em nanoestruturas, o que por sua vez se manifestam nas propriedades óptico-eletrônicas de tais materiais. O presente trabalho tem como objetivo principal investigar como a anisotropia da dispersão eletrônica afeta as propriedades de transporte eletrônico de um material bidimensional. Para estudar este problema, usamos a teoria da massa efetiva para resolver a versão anisotrópica bidimensional (2D) da equação de Schrödinger e analisar a dependência angular, ou direcional, da transmissão eletrônica através de uma barreira quadrada de potencial arbitrariamente orientada. Como consequência da anisotopia, descobrimos que a direção de propagação dada pela velocidade de grupo não coincide de com a direção do vetor de onda, levando a uma nova definição da corrente de probabilidade, que retorna à convencional quando removemos a anisotropia. Posteriormente calculamos o espectro de energia para uma super-rede gerada por uma sequência de abarreiras quadradas de potencial e observamos que a largura das bandas de energia varia com a orientação da super-rede. Em seguida, utilizamos o método da matriz de transferência para investigar analiticamente a transmissão eletrônica através de barreiras duplas, tendo, logo após, desenvolvido a aplicação númerica do mesmo método para obtenção das bandas de transmissão para o caso de múltiplas barreiras. Vale mencionar que para obteção de todos os resultados numéricos utilizamos os dados das massas eletrônicas efetivas do fosforeno nas direções *armchair*, tomada ao longo do eixo x, e *zigzag*, ao longo do eixo y.

Palavras-chave:

Sistemas bidimensionais. Anisotropia. Tansporte eletrônico.

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

INTRODUÇÃO

As propriedades de um sistema podem variar de acordo com a direção do espaço considerada, dando origem a direções privilegiadas. Em contraposição com a isotropia, que indica a independência direcional, essa dependência das grandezas físicas com a orientação espacial é chamada de anisotropia. A isotropia (anisotropia) esta intimamente relacionada com as propriedades de conservação de um sistema físico sob uma operação de rotação. Se dissermos que o espaço é isotrópico estaremos afirmando que a escolha arbitrária do eixo coordenado não influencia nas propriedades físicas do sistema, portanto a sua langrangeana torna-se invariante sob rotações e consequentemente o momento angular deve ser conservado [1]. Desse modo, podemos observar que a isotropia espacial admite uma importância significativa para a existência de uma das leis de conservação na física.

A anisotropia pode se manisfestar, por exemplo, na massa dos portadores de carga dos materiais [2-4], no transporte eletrônico [5-7] e nos níveis de energia [8]. É Interessante ressaltar que existem materiais que admitem características anisotrópicas e isotrópicas simultaneamente, como é o caso dos quasicristais [9]. Como exemplo específicos de materiais onde a anisotropia está presente, pode-se citar o Óxido de Gálio, que exibe anisotropia na sua condutividade [10], bem como as nanopartículas de ouro (Au), que, por sua vez, apresentam a chamada anisotropia magnética, tendo uma direção privilegiada para a magnetização espontânea [11].

Uma outra característica que tem influência direta nas propriedades físicas de um sistema é a sua dimensionalidade. Do ponto de vista de propriedades eletrônicas de um determinado material, o número de dimensões espaciais ao qual os elétrons estão confinados podem alterar drasticamente sua capacidade condutora, por exemplo. Chamamos de sistemas de baixa dimensionalidade aqueles sistemas onde o movimento das partículas sofre uma restrição em uma ou mais dimensões. Dessa forma, podemos ter um gás de elétrons bidimensionais (2D), nanofios ou nanofinatas (1D) e pontos quânticos (0D). Dentro desse contexto, os materiais 2D, compostos por algumas ou uma única camada de átomos, têm sido alvo de intensa pesquisa.

Um dos mais recentes materiais 2D é o filme fino de fósforo negro (FN) [12-13]. O 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 utilizada para se isolar a primeira monocamada de FN [13], o fosforeno. 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 [14]. Tanto a banda de condução quanto a banda de valência mostram um comportamento mais dispersivo ao longo da direção *armchair*, apresentando bandas mais horizontais na direção *zigzag*. Esse fato gera uma grande anisotropia nas massas dos elétrons e serão exatamente essas massas que serão utilizadas nesse modelo.

METODOLOGIA

A partir do trabalho utilizado na referência[15], tomou-se os segintes valores para as massas efetivas ao longo das direções *armchair* e *zigzag*:

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

Como consequência da anisotropia, descobrimos que a direção de propagação dada pela velocidade de grupo não coincide com a direção do vetor de onda, levando a uma nova definição da corrente de probabilidade, que retorna à convencional quando removemos a anisotropia.



Em seguida calculamos o transporte eletrônico para uma barreira de potencial, obtendo o seguinte resultado para o coeficiente de transmissão



Na sequência utilizamos a transmissão eletrônica para definir e calcular a condutância G como a soma de todas as contribuições de transmissão em cada ângulo, sendo dado pela relação



onde "Phi" é o ângulo de incidência e "Alpha" o ângulo de orientação da barreira no plano xy.

Finalmente, utilizamos o método da matriz de transferência para investigar analiticamente a transmissão eletrônica através de barreiras duplas, tendo, logo após, desenvolvido a aplicação numérica do mesmo método para obtenção das bandas de transmissão para o caso de múltiplas barreiras.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Naprimeirafiguraestárepresentadaoespectrodeenergiadohamiltonianoanisotrópicorotacionadoenãorotacionado.

Ohamiltonianogeradopelaaproximaçãodemassaefetivanosfornececurvasdeenergiacomformadeelipse,umavezqueamassadoelétrontemvaloresdiferentesnasdireçõesxey.

Através destehamiltonianopode-sedemonstrarqueparaaconservaçãodaprobabilidadeserrespeitadadevamosterumanovadefiniçãodacorrentedeprobabilidadedadapelaterceiraequaçãodametodologia.Emquesetornapossívelobservarqueasuaformavoltaaoestadooriginalquandofazermosasmassasseremiguais,obteremosocasoparticularqueécomumenteutilizadonoslivros.Calculamostambématransmissãoeletrônicaatravésdeumabarreiradepotencialcomorientaçãoarbitrárianoplanoxyobtendoumcoeficientedetransmissãoparaenergiasmenoresqueaalturadabarreira,onderepresentamos

Nestafiguraépossívelobservaratransmissãoeletrônicaemfunçãodaorientaçãodosistemadeeixos,ondeosângulosdeinclinação dabarreira émantidofixoetorna-sepossivelPerceberquerealmenteexistedireçõesquepossuiumamelhortransmissãoeletrônicas.

Adiantetambémpodemosverográficodatransmissãoeletrônicaemfunçãodainclinaçãodabarreiradepotencialquepodenosmostrarumamelhorideiadadireçãocommelhortransmissãoeletrônica,ondeadireçãoarmchairapresentaumamelhorprobabilidadeparaocorrerotransporteeletrônico.

Utilizandoadefiniçãodetransmissãoeletrônica,foipossivelcalcularacondutância,deformaquepudemosconfirmarmaisumavezqueadireçãoyéaquepossuiumcomportamentodetransmissãomaiorcomopodemosobservaradiante

Posteriormentebuscamosentenderocomportamentodatransmissãoeletrônicasujeitoamaisdeumabarreiradepotencial,ondeaplicamosométododamatrizdetransferênciaecalculamosatransmissãoeletrônicaparaduplabarreiradepotencial

Ondepodemosverqueospontosdetransmissãototalaumentoquandocomparadoaosgráficosanteriores.Agoraquandoaumentamosonúmerodebarreiraspara10e15barreirasdepotencial,temos

CONCLUSÕES

No presente trabalho foi possível estudar o espectro eletrônico de materiais bidimensionais anisotrópicos sujeitos a uma super-rede criada por barreiras quadradas de potencial, bem como investigar seus efeitos na transmissão eletrônica através de múltiplas barreiras. Inicialmente utilizamos o método da massa efetiva para definir o Hamiltoniano de um elétron no espaço 2D anisotrópico. Em seguida, resolvemos a ES do elétron sujeito a um potencial unidimensional arbitrariamente orientado e verificamos que pela introdução de uma massa efetiva dependente da direção do espaço, leva-nos à curvas de energia dadas por elipses e não por círculos, como no caso convencional. A consequência deste comportamento é refletida diretamente na definição da corrente de probabilidade, que tem sua definição modificada para que a conservação da probabilidade seja mantida. Além disso, pudemos demonstrar que a nova forma da corrente de probabilidade não altera a definição do coeficiente de transmissão que encontramos comumente nos livros acadêmicos para o caso de potenciais unidimensionais. Entretanto ao usarmos o hamiltoniano anisotrópicos com um potencial quadrado, torna-se possível observar que sua anisotropia direcional reflete diretamente no transporte eletrônico. Dessa forma determinamos a transmissão em função de "Phi" para os ângulos de inclinação das barreiras como 0°, 90º, 60º , 30°. Concluímos que para inclinações de barreira mais próximas de 90° , existe um intervalo maior dos ângulos f que geram transmissões eletrônicas e em alguns valores, desse intervalo, a transmissão é total. Finalmente, aplicamos o método da matriz de transferência para investigar a transmissão eletrônica através de múltiplas barreiras, sendo possível observar que ao aumentarmos o número de barreiras criamos bandas de transmissão.

AGRADECIMENTOS

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

REFERÊNCIAS

[1] MARRION, J. B.; THORNTON, S. T. *Classical Dynamics of Particles and Systems*. 5ª . ed. [S.l.]: Cengage Learning, 2003.

[2] G.D.CHEN. *Effects of electron mass anisotry on hall factors in 6h-sic*. American Institute of Physics, n. S0003-6951(96)00610-X, p. 1–3, 1995.
[3] C.IL-TONG. *On the motion of a particle with anisotropic mass*. International Journal of Theoretical Physics, n. B-4000, p. 1–10, 1973.
[4] G.RUDIGER. *Anisotropic phonon properties and effective electron mass in α-Ga_2O_3*. American Institute of Physics, n. Lett. 114, 142102, p. 1–10, 2019.
[5] MOSCHETTI, G. *Anisotropic transport properties in InAs/AlSb heterostructures*. Applied Physics Letters, 97 243510, p. 3–5, 2010.
[6] MORRISON, C.; MYRONOV, M. *Electronic transport anisotropy of 2d carriers in biaxial compressive strained germanium*. AIP Publishing, n. 111 192103, p. 1–17, 2017.
[7] FANG. C. *Anisotropic ballistic transport through a potential barrier on monolayer phosphorene*. Chinese Physics Letters, n. 057301-1, p. 1–4, 2016.
[8] K.MIYUKIM; P.BENNETT. *Anisotropic surface energy*. International Academic Symposium, n. V.3, p. 105–117, 2009.
[9] GONG, P. *Isotropic and anisotropic physical properties of quasicrystals*. The European Physical Journal B, n. 119991, p. 477–481, 2006.
[10] ZHI, G.; AMIT, V. *Anisotropic thermal conductivity in single crystal b-gallium oxide*. Physical Science Publishing, n. 111909, p. 1–5, 2015.
[11] YUN, W.; S.PO-HSUN. *Magnetic anisotropic energy gap and strain effect in Au nanoparticles*. Nanoscale Research Letters, n. 111909, p. 1–7, 2009.

[12] LI, L. et al. *Black phosphorus field-effect transistors*, Nat. Nanotechnol. 9, 372 2014.
[13] LIU, H. et al. *Phosphorene:* An Unexplored 2D Semiconductor with a High Hole Mobility, ACS Nano 8, 4033 2014.
[14] 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.
[15] LIMA, W. P. *Modelo Tight-Binding Aplicado ao Cálculo da Estrutura de Bandas dos Materiais Bidimensionais Grafeno e Fosforeno*. digital — Unilab, 2018.