

EFEITOS DE ANISOTROPIA NO TRANSPORTE ELETRÔNICO EM MONOCAMADAS DE FÓSFORO NEGRO

Wellisson Pires Lima¹, Silvia Helena Roberto de Sena²

Resumo: O fósforo negro 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 recentemente, em 2014, a primeira monocamada de fósforo negro (FN), o fosforeno. Desde então um grande número de trabalhos sobre esse material foram publicados, no entanto, a pesquisa sobre as propriedades fundamentais e aplicações de filmes finos de FN ainda se encontra em estágio inicial, o que coloca essa linha de pesquisa como uma das áreas mais frutíferas em física da matéria condensada. O fosforeno apresenta uma estrutura não plana que 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 camadas 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 projeto, tem como objetivo central investigar como essa anisotropia da dispersão eletrônica afeta suas propriedades de transporte. Para isso, pretende-se obter a estrutura de bandas usando o modelo tight-binding e, a partir dela, obter uma aproximação para as bandas de energia na vizinhança do nível de Fermi, calculando um Hamiltoniano aproximado que descreva o sistema em torno do ponto gama, onde o material apresenta um gap de energia de aproximadamente 2 eV. Com isso, eventualmente será possível o método da massa efetiva para estudar o comportamento dos portadores de cargas sujeitos a potenciais, permitindo investigar o efeito da anisotropia do espectro sobre a transmissão eletrônica.

Palavras-chave: Fosforeno. Espectro Eletrônico. Anisotropia. Transporte Eletrônico.

¹ Estudante. Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, e-mail: wellissonfisica@gmail.com.

² Docente. Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, e-mail: silviahelena@unilab.edu.br.