

PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE NANOFITAS DE FOSFORENO COM BORDAS NORMAIS E ENVIESADAS SOB UM CAMPO ELÉTRICO

ELECTRONIC PROPERTIES OF PHOSPHORENE NANORIBBONS WITH NORMAL AND SKEWED EDGES UNDER AN ELECTRIC FIELD

Coordenador Voluntário: Alexandro C. S. Nascimento - IFPI/Parnaíba

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7177-3209> /E-mail: alexandro@ifpi.edu.br

Aluno Bolsista: Francisco L. T. de Lima - IFPI/Parnaíba

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3203-2862> /E-mail: lucianotelphb@gmail.com

Colaboradores: Francisco R. V. Araújo - IFPI/Piripiri

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7948-7143> /E-mail: ronan.viana@ifpi.edu.br

Tiago S. Costa - UFC/Fortaleza

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9988-3648> /E-mail: tiagoklarc27@gmail.com

Diego R. da Costa - UFC/Fortaleza

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1335-9552> /E-mail: diego_rabelo@fisica.ufc.br

Materiais bidimensionais são candidatos promissores para o desenvolvimento da tecnologia devido às suas propriedades únicas e incomuns em comparação aos materiais convencionais. A monocamada de fósforo negro (fosforeno), por exemplo, tem uma estrutura hexagonal enrugada devido à hibridização sp^3 , exibindo propriedades eletrônicas e térmicas altamente anisotrópicas. Resultados recentes revelaram que o fosforeno apresenta alta mobilidade de portadores, alta absorção óptica e de UV, entre outras propriedades atraentes, que são de interesse especial para aplicações optoeletrônicas. Cortes em direções apropriadas na estrutura de rede do fosforeno possibilita, pelo menos, quatro tipos de bordas, a saber: *armchair* normal (nAC), *armchair* enviesada (sAC), *zigzag* normal (nZZ) e *zigzag* enviesada (sZZ). Nanofitas com esses tipos de bordas podem apresentar propriedades eletrônicas interessantes quando submetidas a um campo elétrico externo. Nesse sentido, nosso trabalho explora os espectros de energia e autoestados de nanofitas de fosforeno submetidas a um campo elétrico. Usando um modelo *tight-binding* (TB) implementado no KWANT, um pacote de cálculo numérico baseado em Python, investigamos a estrutura de bandas e as funções de onda para nanofitas com diferentes tipos de bordas. Os resultados mostram que a aplicação de um campo elétrico em nanofitas de fosforeno, com tipos específicos de bordas, possibilita a modulação do *bandgap* (região proibida de energia), o que pode ser essencial para aplicações nanoeletrônicas de fosforeno.

Palavras-Chave: fosforeno; nanofitas; *tight-binding*; campo elétrico; estrutura eletrônica.

Financiamento: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq