

Estudo computacional de nanofitas de fosforeno

Francisco L. B. Teófilo^{1,*}, Douglas C. de Sousa¹, Lucas de Oliveira¹, Alexandro C. S. Nascimento¹ e Francisco R. V. Araújo²

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí – Campus Parnaíba, 64.211-145 Parnaíba-PI, Brasil

²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí – Campus Piripiri, 64.260-000 Parnaíba-PI, Brasil

(*e-mail: capar.20171sfp0295@aluno.ifpi.edu.br)

Resumo

Tem-se observado nas últimas décadas um grande e rápido avanço na tecnologia, miniaturização de componentes eletrônicos, aumento da velocidade de processamento da informação, entre outros fatores. A maior parte dessa tecnologia é baseada em silício, considerado o principal ingrediente da indústria eletrônica. No entanto, como os novos materiais comercializados apresentam menor tamanho e maior eficiência, surgem limitações devido à baixa dimensionalidade. Portanto, a busca por novos materiais tornou-se um campo de pesquisa emergente. Muitos cientistas tomam estruturas bidimensionais (2D) como novos blocos de construção fundamentais que formarão futuros materiais, especialmente no que diz respeito à produção de componentes eletrônicos em nanoescala. Atenção especial vem sendo dada ao fosforeno (Carvalho, 2016), uma única camada de fósforo negro que oferece vantagens extraordinárias sobre outros materiais 2D. Podemos citar, por exemplo, sua alta mobilidade eletrônica, estrutura de banda altamente anisotrópica e um *bandgap* amplamente ajustável que é altamente relevante para aplicações em dispositivos eletrônicos (De Sousa, 2016). Dentro deste cenário, o presente trabalho tem como objetivo estudar as propriedades eletrônicas de nanofitas de fosforeno (PNRs) com diferentes configurações de borda usando cálculos baseados no método *tight-binding* (TB). Todos os resultados são levantados através do Kwant, um pacote baseado em Python para cálculos numéricos de transporte quântico (Groth, 2014). Devido à natureza anisotrópica do fosforeno, podemos classificar as nanofitas com dois tipos de bordas: *armchair* e *zigzag*. Nanofitas do tipo *armchair* apresentam comportamento semicondutor, enquanto aquelas com bordas *zigzag* são metálicas. A estrutura de bandas dessas nanofitas podem ser ajustadas eletricamente de modo a intercambiar tais propriedades para campos elétricos suficientemente intensos. PNRs são candidatos promissores para diversas aplicações em nanotecnologia.

Palavras-chave: nanofitas; fosforeno; *tight-binding*; Kwant.

Referências

CARVALHO, A. et al. Phosphorene: from theory to applications. **Nature Reviews Materials**, v. 1, n. 11, p. 1-16, 2016.

DE SOUSA, D. J. P. et al. Boundary conditions for phosphorene nanoribbons in the continuum approach. **Physical Review B**, v. 94, n. 23, p. 235415, 2016.

GROTH, Christoph W. et al. Kwant: a software package for quantum transport. **New Journal of Physics**, v. 16, n. 6, p. 063065, 2014.