

## Introdução às propriedades eletrônicas de novos materiais bidimensionais

Victor Barthman Casaca\*, Ana Luiza C. Pereira

### Resumo

O estudo envolveu a análise das propriedades eletrônicas de novos materiais bidimensionais através de simulações computacionais, considerando-se diferentes condições de desordem da rede e observando-se os efeitos de localização eletrônica. O estudo é teórico, mas diretamente relacionado às aplicações na área de dispositivos eletrônicos.

**Palavras-chave:** Materiais bidimensionais, simulações, grafeno.

### Introdução

Os novos materiais bidimensionais (2D) como o grafeno, fosforeno, germaneno, siliceno, dentre outros, estão atraindo grande atenção, por suas propriedades eletrônicas e mecânicas surpreendentes e superlativas<sup>1</sup>. Visando entender melhor as propriedades eletrônicas desses novos materiais, foram desenvolvidas neste trabalho simulações computacionais, que permitem investigar o comportamento do material quanto a estas propriedades, variando-se as dimensões da rede cristalina, incluindo-se diversos tipos de desordens na rede, considerando-se ou não condições de contorno periódicas, ou também vacâncias na rede.

Basicamente os materiais bidimensionais são uma única camada de átomos que formam uma estrutura plana. Em alguns materiais, parte dos átomos da estrutura atômica podem “sair” ligeiramente do plano, como pode ser visto na Figura 1: é o caso do fosforeno, do siliceno e do dissulfeto de molibdênio ( $\text{MoS}_2$ ).

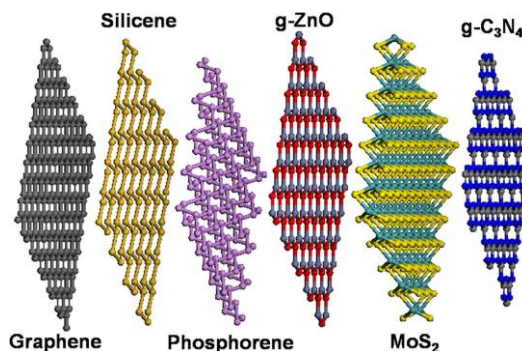


Figura 1. Estrutura atômica de diferentes materiais 2D<sup>2</sup>.

### Resultados e Discussão

As simulações foram feitas a princípio para o grafeno, que é o material em que as medidas experimentais se encontram em um estágio mais consolidado<sup>3</sup>. A partir do modelo de ligações fortes (*tight-binding*), que emula a cadeia de átomos de carbono em uma rede hexagonal, montou-se um programa que leva em conta a energia de cada sítio atômico e as energias de ligação entre átomos de carbono vizinhos na rede cristalina do grafeno (*hoppings*). Recai-se num problema de autovalores a partir do qual é obtido o espectro de energias possíveis para o sistema (de onde se obtém a Densidade de Estados), bem como a distribuição de carga eletrônica (densidade de probabilidade de função de onda) sobre a rede para cada uma dessas energias.

A desordem na rede pode ser incluída variando-se a energia dos sítios, ou dos *hoppings*, ou “retirando-se” alguns átomos da rede (gerando assim, vacâncias).

A Figura 2 mostra a distribuição da carga eletrônica sobre uma rede de grafeno de 2500 átomos (50x50), para energias diferentes, sendo que em A e C considerou-se a rede sem nenhum tipo de desordem, enquanto em B e D (para as mesmas energias de A e C respectivamente), considerou-se uma vacância na rede. Em particular, em D, nota-se a formação de um “estado localizado”, onde a densidade de carga fica fortemente concentrada em torno da vacância. Estados desse tipo não contribuem para o transporte eletrônico, reduzindo a condutividade do sistema em torno dessa energia.

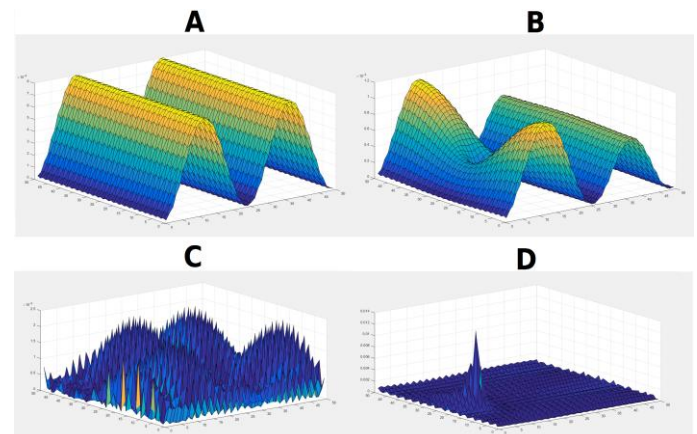


Figura 2. Distribuição da carga eletrônica sobre uma rede de grafeno, para diferentes energias. A e C são sem desordem, enquanto B e D apresentam uma vacância.

### Conclusões

Investigamos, através de simulações numéricas, efeitos de desordem na rede de materiais bidimensionais, e os impactos sobre as propriedades eletrônicas. Consideramos neste trabalho os efeitos de vacâncias, desordens no substrato sobre o qual o material 2D está apoiado (desordem nos sítios) e corrugações na rede (desordem nos *hoppings*) e observamos efeitos de localização eletrônica para todos esses casos.

### Agradecimentos

Ao SAE/Unicamp pelo suporte financeiro.

<sup>1</sup> S. Z. Butler *et al.*, “Progress, Challenges, and Opportunities in Two-Dimensional Materials Beyond Graphene” *ACS Nano* **7**, 2898 (2013)

<sup>2</sup> W. Hu, J. Yang, “First-principles study of two-dimensional van der Waals heterojunctions” *Computational Materials Science* **1**, 112 (2016)

<sup>3</sup> S. Balendhran *et al.*, “Elemental Analogues of Graphene: Silicene, Germanene, Stanene, and Phosphorene” *Small* **11**, 640 (2015)