

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM MATERIAIS SEMICONDUTORES ANISOTRÓPICOS POLICRISTALINOS DEVIDO À PRESENÇA DE SUPERREDE DE FRONTEIRAS DE GRÃOS

Lawson Oliveira Lima, John Ytalo Nicolau Musse, Maria Lúcia Álvares Paz, Ismael da Graça Albuquerque, Diego Rabelo da Costa

Na obtenção experimental dos materiais bidimensionais (2D) naturalmente surge imperfeições, tais como defeitos estruturais, vacâncias, deformações na rede cristalina, e impurezas substitucionais ou intersticiais, as quais podem afetar drasticamente suas propriedades físicas. A presença de tais defeitos é praticamente inevitável e podem ser decorrentes do processo de síntese em si ou mesmo no pós-síntese. Em materiais 2D, os defeitos lineares tais como fronteiras de grãos são comuns e consistem em uma linha que une duas regiões.

As fronteiras de grãos são estruturas cristalográficas que dividem o material em domínios cristalinos com orientações diferentes. Elas são formadas por linhas de defeitos que se estendem ao longo das bordas entre os domínios. As fronteiras de grãos são estruturas cristalográficas que dividem o material em domínios cristalinos com orientações diferentes. Elas são formadas por linhas de defeitos que se estendem ao longo das bordas entre os domínios.

ficas, isto é, na vizinhança que une dois domínios do material policristalino. Recentemente, amostras policristalinas de fosforeno foram observadas, mostrando linhas de defeitos formadas por pentágonos, hexágonos e heptágonos de fósforo negro separando os domínios cristalográficos. Dentro desse contexto, é importante estudar as propriedades de transporte em materiais semicondutores anisotrópicos policristalinos, que podem ser vistos como juncções laterais com diferentes orientações cristalográficas, isto é, na presença de uma superrede de fronteiras de grãos. Modelaremos o sistema físico em questão utilizando a aproximação da massa efetiva, assumindo valores diferentes para as diferentes direções cristalinas, e calcularemos as propriedades de transporte eletrônico através do método da matriz de transferência. Discutiremos o papel da anisotropia no coeficiente de transmissão para diferentes orientações das juncções laterais dos domínios cristalinos, além de investigar a sua dependência com o número e o tamanho das fronteiras de grãos. Por fim, agradeço ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pelo financiamento do projeto, o qual possibilitou a execução desse trabalho.

Palavras-chave: Semicondutores anisotrópicos. Fosforeno. Matriz de Transferência. Transporte eletrônico.