

Projeto para Bolsa de Iniciação Científica PIBIC/CNPEM

Estrutura atômica e eletrônica do óxido fosforeno: um novo material 2D para nanotransistores

Orientador: Wendell Simões e Silva

Co-orientador Túlio C. R. Rocha

Unidade Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

Introdução

O fosforeno é um novo um material bidimensional ultrafino, similar ao grafeno, mas formado por átomos de fósforo ao invés de carbono (figura 1-esquerda). Nos últimos anos, o fosforeno tem ganhado muita atenção da comunidade científica pois [1], ao contrário do grafeno que é um excelente condutor de eletricidade, apresenta propriedades de transporte elétrico de um semiconductor como o silício, que é a base atual de toda a indústria de microeletrônica. Desta forma há uma grande expectativa que o fosforeno possa substituir o silício de forma direta na produção de dispositivos eletrônicos em escala manométrica. De fato, alguns dispositivos experimentais baseados em fosforeno já foram construídos [2] para demonstrar seu potencial (figura 1-direita). Além disso, o fosforeno apresenta absorção óptica na região do infravermelho próximo e visível, o que potencializa aplicações em dispositivos optoeletrônicos para comunicações ópticas.

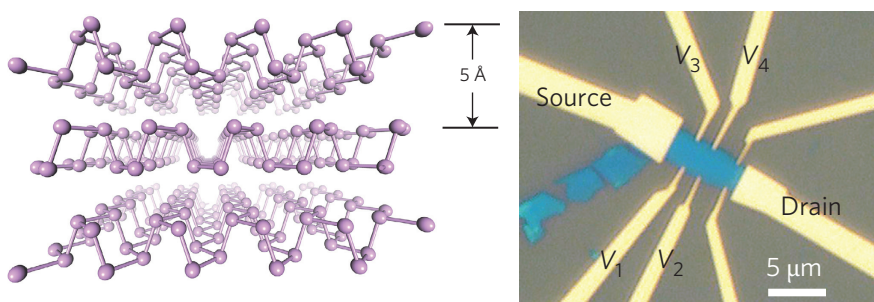


Figura 1: (esquerda) estrutura atômica do fósforo negro ilustrando as camadas lamelares separadas por 5Å que formam o fosforeno. (direita) transistor por efeito de campo construído com fósforo (em azul). Adaptado de [2].

Uma das características essenciais que fizeram o silício prevalecer na indústria de microeletrônica em detrimento de outros semicondutores (como o germânio) é a

formação de um óxido com excelente característica isolante. A presença de um isolante nativo, obtido por oxidação superficial controlada, permitiu o desenvolvimento dispositivos complexos com arquitetura planar, tais como os transistores por efeito de campo (MOSFET). Estudos recentes de nosso grupo e outros [3], mostram que o fósforo negro, que é a base do fosforeno, pode ser oxidado de forma controlada dando origem a um óxido superficial de uma única camada. Trabalhos teóricos indicam que este óxido de fosforeno apresenta estrutura eletrônica esperada de bom isolante [4], porém as evidências experimentais ainda são escassas. Neste projeto propõe-se a fabricação de camadas monoatômicas de óxidos de fosforeno sobre a superfície de fósforo negro e posterior determinação da estrutura atômica e eletrônica para avaliar o potencial de aplicação deste material como isolante em dispositivos eletrônicos.

Objetivos

- Preparação de superfícies limpas e monocristalinas de fósforo negro e caracterização estrutural por difração de elétrons de baixa energia (LEED, do inglês, *Low Energy Electron Diffraction*) e microscopia de tunelamento por varredura (STM do inglês, *Scanning Tunneling Microscopy*)
- Oxidação superficial controlada para formação do óxido de fosforeno e caracterização da composição química e estrutura eletrônica por técnicas de espectroscopia de emissão de fotoelétrons (PES, do inglês *Photoelectron Emission Spectroscopy*) e estrutura atômica por STM.

Metodologia

As amostras são cristais de fósforo negro em forma de folhas obtidos comercialmente. Estas amostras serão fixadas em porta-amostras metálicos e submetidas a um ciclo de clivagem e caracterização por LEED até a obtenção de um padrão de difração indicativo de uma superfície com poucos defeitos estruturais. Em seguida a ausência de impurezas será verificada por PES e a estrutura local será investigada por STM.

Finalmente, a superfície do fósforo negro será foto-oxidada pela exposição a uma atmosfera de oxigênio na presença de luz visível. Tratamentos térmicos seguidos de medidas de LEED serão realizados para modificar o ordenamento da camada de óxido.

A estrutura atômica óxido de fosforeno será investigada por STM e a estrutura eletrônica será estudada por medidas de PES com uma lâmpada de He para determinação da função trabalho e da posição do topo da banda de valência do óxido de fosforeno.

Aprendizado do bolsista

Além do envolvimento com a pesquisa em semicondutores e materiais bidimensionais, o aluno terá contato com técnicas de ultra-alto vácuo e diversas técnicas de caracterização amplamente utilizadas em diferentes áreas da física e química. Também será parte de um grupo multidisciplinar de pesquisa em materiais multifuncionais que inclui, materiais nanoestruturados, magnetismo, supercondutividade e catálise, tendo ainda a oportunidade de participar de experimentos utilizando a fonte de luz síncrotron do LNLS.

Referências

- [1] 1. Ling, X., Wang, H., Huang, S., Xia, F. & Dresselhaus, M. S. The Renaissance of Black Phosphorus. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **112**, 4523–4530 (2015).
- [2] 1. Li, L. *et al.* Black phosphorus field-effect transistors. *Nat. Nanotechnol.* **9**, 372–7 (2014).
- [3] 1. Wang, G., Pandey, R. & Karna, S. P. Phosphorene oxide: stability and electronic properties of a novel two-dimensional material. *Nanoscale* **7**, 524–31 (2014).
- [4] Edmonds, M. T. *et al.* Creating a Stable Oxide at the Surface of Black Phosphorus. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **7**, 14557–14562 (2015).