Tạp chí Khoa học Đại học Huế: Khoa học Tự nhiên
Tập 129, Số 1C, 109–116, 2020

pISSN 1859-1388
eISSN 2615-9678

ẢNH HƯỞNG CỦA BIẾN DẠNG PHẲNG LÊN TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ VÀ QUANG HỌC CỦA ĐƠN LỚP GaSe

Võ Thị Tuyết Vi[1], Nguyễn Văn Chương[2], Nguyễn Văn Hiếu[3], Nguyễn Ngọc Hiếu[4]*

[1] Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế, 34 Lê Lợi, Huế, Việt Nam
[2] Khoa Cơ khí, Học viện Kỹ thuật Quân sự, 236 Hoàng Quốc Việt, Q. Bắc Từ Liêm, Hà Nội, Việt Nam
[3] Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Đà Nẵng, 459 Tôn Đức Thắng, Q. Liên Chiểu, Đà Nẵng, Việt Nam
[4] Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Trường Đại học Duy Tân, 3 Quang Trung, Đà Nẵng, Việt Nam

* Tác giả liên hệ Nguyễn Ngọc Hiếu <hieunn@duytan.edu.vn>
(*Ngày nhận bài: 19-06-2020; Ngày chấp nhận đăng: 29-06-2020*)

Tóm tắt. Trong bài báo này, sử dụng Lý thuyết phiếm hàm mật độ, chúng tôi nghiên cứu một cách có hệ thống sự ảnh hưởng của biến dạng lên các tính chất điện tử và tính chất quang học của một vật liệu hai chiều với cấu trúc đơn lớp là GaSe. Các tính toán cho thấy đơn lớp GaSe ở trạng thái cân bằng là một chất bán dẫn có vùng cấm xiên với năng lượng 1,903 eV. Các tính chất điện tử của đơn lớp GaSe, đặc biệt là năng lượng của vùng cấm, phụ thuộc rất lớn vào biến dạng. Đơn lớp GaSe có phổ hấp thụ rộng, trải dài từ miền ánh sáng nhìn thấy đến vùng tử ngoại gần. Bên cạnh đó, biến dạng làm thay đổi đáng kể cường độ cũng như vị trí của các đỉnh trong phổ quang học của đơn lớp GaSe.

Từ khóa: đơn lớp GaSe, tính chất điện tử, tính chất quang học, biến dạng phẳng, lý thuyết phiếm hàm mật độ

Effect of biaxial strain on electronic and optical properties of GaSe monolayer

Vo Thi Tuyet Vi[1], Nguyen Van Chuong[2], Nguyen Van Hieu[3], Nguyen Ngoc Hieu[4]*

[1] Department of Physics, University of Education, Hue University, 34 Le Loi St., Hue, Vietnam
[2] Department of Mechanics, Military Technical Academy, 236 Hoang Quoc Viet St., Bac Tu Liem Dist., Hanoi, Vietnam
[3] Department of Physics, University of Education, The University of Da Nang, 459 Ton Duc Thang, Lien Chieu Dist., Da Nang, Vietnam
[4] Institute of Research and Development, Duy Tan University, 3 Quang Trung St., Da Nang, Vietnam

* Correspondence to Nguyen Ngoc Hieu <hieunn@duytan.edu.vn>
(*Received: 19 June 2020; Accepted: 29 June 2020*)

Abstract. Two-dimensional layered materials have been extensively studied for nearly two decades because of their outstanding physical and chemical properties. In this paper, using the density functional theory, we systematically investigate the effect of biaxial strain on electronic and optical properties of the GaSe two-dimensional layered material with monolayer structure. The calculations indicate that monolayer GaSe is an indirect semiconductor with a bandgap of 1.903 eV at equilibrium. The electronic properties of the GaSe monolayer, especially the bandgap, depend strongly on the biaxial strain. The

GaSe monolayer has a wide absorption spectrum, from the visible light region to the near-ultraviolet region. Besides, the strain engineering significantly changes the intensity as well as the position of the peaks in the optical spectra of monolayer GaSe.

Keywords: GaSe monolayer, electronic properties, optical properties, biaxial strain, density functional theory

1 Mở đầu

Kể từ khi được chế tạo thành công bằng thực nghiệm [1], graphene đã trở thành một trong các vật liệu được quan tâm đặc biệt trong suốt hơn 15 năm qua do nó có nhiều tính chất vật lý nổi trội và triển vọng ứng dụng của nó trong các thiết bị quang – điện tử. Do hiệu ứng giam cầm lượng tử, các vật liệu thấp chiều, đặc biệt là các vật liệu hai chiều (2D), có nhiều tính chất vật lý và hóa học khác biệt mà các vật liệu khối không thể có được [2]. Cùng với các nghiên cứu về graphene, một cuộc cách mạng trong việc tìm kiếm các vật liệu hai chiều đã diễn ra và đã thu được nhiều thành tựu. Nhiều vật liệu 2D có cấu trúc tương tự graphene đã được tổng hợp thành công bằng thực nghiệm, điển hình là silicene [3], phosphorene [4] hay các hợp chất kim loại chuyển tiếp dichalcogenide [5]. Gần đây, các đơn lớp monochalcogenide được quan tâm vì chúng có nhiều tiềm năng ứng dụng trong các thiết bị quang – điện tử thế hệ mới [6, 7].

GaSe là một trong những vật liệu xếp lớp monochalcogenide nhóm III. Chúng bao gồm các lớp nguyên tử mỏng liên kết yếu với nhau, trong đó có hai lớp Ga được kẹp giữa hai lớp Se. Ở dạng khối, GaSe là chất bán dẫn có vùng cấm thẳng với độ rộng vùng cấm là 2,0 eV [8]. Gần đây, các lớp siêu mỏng diện tích lớn của tinh thể GaSe đã được tổng hợp thành công [9, 10]. Tương tự các đơn lớp khác, đơn lớp GaSe cũng có các thuộc tính điện tử khác biệt so với cấu trúc khối của nó [8]. Sử dụng phương pháp Lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT), Demirci và cs. đã cho thấy rằng đơn lớp GaSe là một chất bán dẫn vùng cấm xiên với độ rộng vùng cấm 1,77 eV ở trạng thái cân bằng [11]. Đơn lớp GaSe bền vững về mặt cơ học và là vật liệu hoàn hảo để sử dụng trong các transistor bán dẫn hiệu ứng trường [12] và trong các thiết bị quang – điện tử nano [10]. Ren và cs. đã chỉ ra rằng đơn lớp GaSe có các đặc tính quang xúc tác và có thể được sử dụng làm chất xúc tác quang trong các ứng dụng tách nước [13]. Nhóm của Zhou đã nghiên cứu sự phát sinh điều hòa bậc hai trong tinh thể GaSe xếp lớp và quan sát được cường độ tạo ra điều hòa bậc hai mạnh nhất đối với GaSe trong số tất cả các tinh thể 2D [14]. Mặt khác, các ứng dụng tiên tiến thường đòi hỏi các vật liệu với tính chất điện tử, quang học có thể được điều chỉnh theo chủ ý bằng các tham số điều khiển bên ngoài [15]. Do đó, nếu điều chỉnh và kiểm soát các thuộc tính điện tử, quang học của các đơn lớp thì có thể chế tạo một loạt các thiết bị nano điều chỉnh được. Bên cạnh đó, Zhou và cs. đã chứng minh rằng có thể điều khiển được độ rộng vùng cấm của đơn lớp GaSe bằng quá trình hấp phụ các nguyên tử khí trên bề mặt của nó [16]. Các nghiên cứu gần đây của chúng tôi đã chứng minh rằng điện trường hoặc biến dạng có thể làm thay đổi các tính chất điện tử cơ bản, như cấu trúc vùng năng lượng và độ rộng vùng cấm, hay các đặc trưng quang học của vật liệu đơn lớp họ monochalcogenide nhóm III, bao gồm InSe [17], GaS [18] và GaTe [19]. Bên cạnh đó, Huang và cs. đã công bố rằng năng lượng vùng cấm của đơn lớp GaSe phụ thuộc rất lớn vào biến dạng, đặc biệt là trong trường hợp biến dạng kéo [20]. Ngoài ra, tính chất cơ học của đơn lớp GaSe được Yagmurcukardes và cs. nghiên cứu một cách chi tiết [8]. Các tính toán cho thấy đơn lớp GaSe có các cơ tính tuyệt vời và sự chuyển pha bán dẫn – kim loại cũng đã được tìm thấy trong đơn lớp GaSe khi nó chịu ảnh hưởng của biến dạng trục [8].

pISSN 1859-1388
eISSN 2615-9678

Trong bài báo này, chúng tôi trình bày các kết quả nghiên cứu về các tính chất điện tử và tính chất quang học của đơn lớp GaSe khi có mặt của biến dạng bằng Lý thuyết phiếm hàm mật độ. Các nghiên cứu của chúng tôi tập trung vào ảnh hưởng của biến dạng lên cấu trúc vùng năng lượng điện tử, độ rộng vùng cấm và các đỉnh hấp thụ quang cũng như hệ số hấp thụ quang của đơn lớp GaSe.

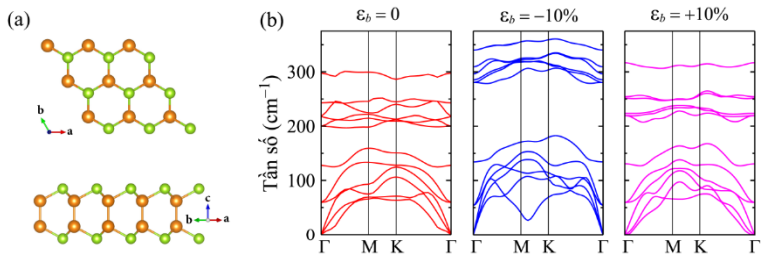
2 Mô hình tính toán

Trong bài báo này, các tính toán được thực hiện bằng Lý thuyết phiếm hàm mật độ với gói phần mềm mô phỏng Quantum Espresso [21]. Phương pháp gần đúng gradient tổng quát của Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) đã được sử dụng để mô tả các trao đổi tương quan [22]. Phương pháp DFT có hiệu chỉnh (DFT-D2) của Grimme [23] đã được sử dụng để xem xét các lực tương tác yếu van der Waals có thể tồn tại giữa các lớp Ga và Se trong cấu trúc của GaSe. Vùng Brillouin trong các tính toán của chúng tôi được khảo sát bằng phương pháp chia lưới Monkhorst–Pack với lưới chia ($15 \times 15 \times 1$). Ngưỡng động năng đối với các sóng phẳng được sử dụng cho các tính toán này là 500 eV. Tất cả cấu trúc nguyên tử của đơn lớp GaSe đã được tối ưu hóa với ngưỡng hội tụ của lực tác dụng lên từng nguyên tử là 0,01 eV/Å và ngưỡng hội tụ của năng lượng toàn phần là 10^{-6} eV. Để tránh sự tương tác nếu có giữa các lớp lân cận, chúng tôi sử dụng khoảng cách chân không là 20 Å theo phương vuông góc với bề mặt vật liệu.

3 Kết quả và thảo luận

Đơn lớp GaSe có cấu trúc hình lục giác hình thành từ bốn lớp nguyên tử được xếp chồng lên nhau theo thứ tự của Se–Ga–Ga–Se như minh họa trong Hình 1a. Về mặt hình học, cấu trúc của đơn lớp GaSe thuộc nhóm không gian D_{3h}. Ô đơn vị của đơn lớp GaSe chứa bốn nguyên tử, bao gồm hai nguyên tử Ga và hai nguyên tử Se. Ở trạng thái cân bằng, bề dày của đơn lớp GaSe là Δ = 4,814 Å và hằng số mạng của nó là a = 3,818 Å. Chiều dài liên kết giữa các nguyên tử Ga và Se là $d_{Ga–Se}$ = 2,497 Å và giữa các nguyên tử Ga với nhau là $d_{Ga–Ga}$ = 2,468 Å. Kết quả tính toán của chúng tôi tương đồng với các nghiên cứu DFT trước đây [8, 20].

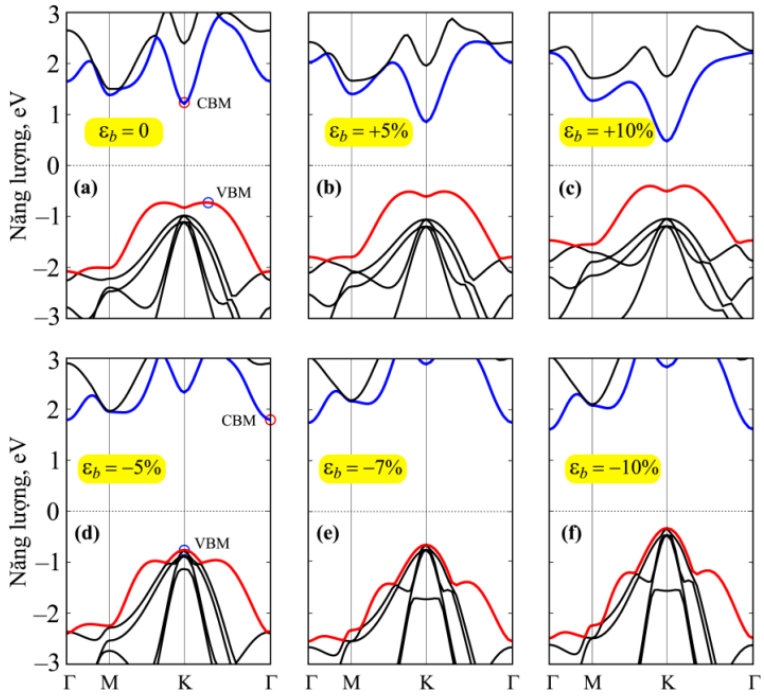
Trước tiên, chúng tôi thực hiện các tính toán phổ phonon của đơn lớp GaSe trong toàn vùng Brillouin thứ nhất để kiểm tra độ bền động học của nó. Ô đơn vị của đơn lớp GaSe chứa bốn nguyên tử, do đó phổ phonon của nó sẽ có 12 nhánh dao động. Các tính toán DFT cho phổ phonon của đơn lớp GaSe được trình bày trên Hình 1b. Có thể thấy rằng, có 12 nhánh dao động trong phổ phonon của đơn lớp GaSe, bao gồm chín nhánh quang và ba nhánh âm. Hình 1b cho thấy không có khoảng cách giữa các nhánh âm và nhánh quang. Đối với các nhánh dao động quang, tại điểm Γ, chỉ có ba nhánh quang không suy biến, trong khi có đến ba nhánh quang bị suy biến đôi. Tần số dao động quang lớn nhất vào khoảng 300 cm^{-1}. Kết quả tính toán của chúng tôi cho thấy rằng không có tần số âm trong phổ phonon của đơn lớp GaSe. Điều này có nghĩa là cấu trúc của đơn lớp GaSe ổn định về mặt động học.



Hình 1. Cấu trúc nguyên tử theo các góc nhìn khác nhau (a) và các phổ phonon (b) của đơn lớp GaSe ở trạng thái cân bằng (ε_b = 0) và khi bị biến dạng –10% và +10%

Để nghiên cứu ảnh hưởng của dạng phẳng (hay biến dạng hai chiều) đến các tính chất điện tử của đơn lớp GaSe, chúng tôi định nghĩa biến dạng phẳng là $_b$ trong đó và lần lượt là hằng số mạng của GaSe ở trạng thái cân bằng và khi có biến dạng. Chúng tôi tiến hành cho đơn lớp biến dạng dọc đồng thời dọc theo hai trục *a* và *b* (biaxial strain) ε_b trong khoảng từ −10% đến 10%. Các dấu "+" và "– " tương ứng với các trường hợp biến dạng kéo và biến dạng nén. Để kiểm tra sự ổn định về mặt động học của cấu trúc của đơn lớp GaSe khi bị biến dạng, phổ phonon của đơn lớp GaSe khi bị biến dạng đã được tính toán. Có thể thấy rằng đơn lớp GaSe vẫn ổn định về mặt động học khi bị biến dạng lên đến ±10% (Hình 1b).

Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp GaSe ở trạng thái cân bằng trong vùng Brillouin thứ nhất dọc theo hướng đối xứng cao Γ-M-K-Γ được biểu diễn ở Hình 2a. Kết quả tính toán đã chỉ ra rằng, ở trạng thái cân bằng, đơn lớp GaSe là một chất bán dẫn có vùng cấm xiên với năng lượng vùng cấm là 1,903 eV. Giá trị này khá gần với kết quả đạt được của Huang và cs. (1,83 eV) [20]. Tuy nhiên, bài toán về độ rộng vùng cấm của vật liệu nano phụ thuộc lớn vào cách tiếp cận trong tính toán DFT, tức là phụ thuộc vào các phiếm hàm năng lượng [20]. Mặc dù vậy, về mặt vật lý, sử dụng các phiếm hàm khác nhau trong tính toán DFT có thể thu được các giá trị độ rộng vùng cấm khác nhau nhưng không làm thay đổi các tính chất vật lý cơ bản của vật liệu. Ở trạng thái cân bằng, cực tiểu vùng dẫn (CBM) nằm ngay tại điểm K trong vùng Brillouin thứ nhất, trong khi cực đại vùng hóa trị (VBM) nằm trên đường thẳng KΓ. Chú ý vào vùng con cao nhất của vùng hóa trị, có thể thấy rằng sự chênh lệch về mặt năng lượng giữa VBM và của vùng con cao nhất tại điểm K là không lớn. Đồng thời, chúng ta biết rằng tính chất điện tử của các vật liệu 2D rất nhạy với sự biến đổi cấu trúc. Do đó, có thể kỳ vọng biến dạng có thể làm cho VBM chuyển từ vị trí trên đường thẳng KΓ sang điểm K và đơn lớp GaSe trở thành bán dẫn với vùng cấm thẳng.



Hình 2. Cấu trúc vùng năng lượng của đơn lớp GaSe ở trạng thái cân bằng ($\varepsilon_b = 0$) (a) và khi bị biến dạng (b–f)

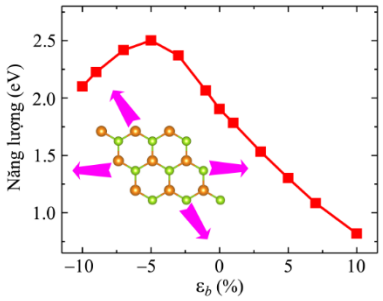
pISSN 1859-1388
eISSN 2615-9678

Trên Hình 2, chúng tôi biểu diễn cấu trúc vùng năng lượng của đơn lớp GaSe bị biến dạng ở các mức độ khác nhau của ε_b. Các kết quả tính toán cho thấy rằng biến dạng kéo không làm thay đổi ví trí của CBM và VBM. Trong trường hợp biến dạng nén, sự thay đổi vị trí của CBM và VBM đã xảy ra. Tính toán của chúng tôi cho thấy, tại $\varepsilon_b = -5\%$, vị trí của CBM đã chuyển từ điểm K sang điểm Γ còn vị trí của VBM đã chuyển sang điểm K như thể hiện rõ trong Hình 2d. Biến dạng không chỉ làm thay đổi vị trí của CBM và VBM mà còn làm thay đổi một cách đáng kể độ rộng của vùng cấm. Trong khi biến dạng kéo làm giảm nhanh độ rộng vùng cấm của đơn lớp GaSe thì năng lượng của vùng cấm phụ thuộc khá phức tạp vào biến dạng nén. Có thể thấy rằng biến dạng nén làm cho độ rộng vùng cấm E_g của đơn lớp GaSe tăng và đạt cực đại bằng 2,501 eV tại $\varepsilon_b = -5\%$ rồi lại giảm xuống nếu tiếp tục tăng cường độ biến dạng nén (Hình 3). Biến dạng kéo làm giảm nhanh một cách khá tuyến tính năng lượng vùng cấm của đơn lớp GaSe. Xu hướng giảm năng lượng vùng cấm này tương đồng với các kết quả được tính toán trước đó [8].

Tiếp theo, chúng tôi tính toán các đặc trưng quang học cơ bản của đơn lớp GaSe dưới tác dụng của biến dạng. Trong bài báo này, chúng tôi khảo sát cho trường hợp ánh sáng tới bị phân cực vuông góc (dọc theo trục *c*) với năng lượng của photon trong khoảng từ 0 đến 10 eV. Các đặc trưng quang học cơ bản của vật liệu có thể được tính toán thông qua hàm điện môi của nó. Hàm điện môi $\varepsilon(\omega)$ được tính theo biểu thức (1)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i \times \varepsilon_2(\omega), \quad (1)$$

trong đó $\varepsilon_1(\omega)$ và $\varepsilon_2(\omega)$ lần lượt là phần thực và phần ảo của $\varepsilon(\omega)$. Về nguyên tắc, có thể thu được phần ảo $\varepsilon_2(\omega)$ thông qua tổng của các dịch chuyển giữa các trạng thái trống và lấp đầy. Bằng cách sử dụng phép chuyển đổi Kramer–Kronig, có thể nhận được phần thực $\varepsilon_1(\omega)$ theo biểu thức (2) và (3) [24, 25].



Hình 3. Sự phụ thuộc của năng lượng vùng cấm vào độ biến dạng ε_b

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{Ve^2}{2\pi\hbar m^2\omega^2}\int d^3\mathbf{k}\sum_{nn'}\langle \mathbf{k}n|p_i|\mathbf{k}n'\rangle\langle \mathbf{k}n'|p_j|\mathbf{k}n\rangle \times f_{\mathbf{k}n}(1-f_{\mathbf{k}n'})\delta(E_{\mathbf{k}n'}-E_{\mathbf{k}n}-\hbar\omega), \quad (2)$$

và

$$\varepsilon_1(\omega) = 1+\frac{2}{\pi}P\int_0^\infty \frac{\omega'\varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2-\omega^2}d\omega', \quad (3)$$

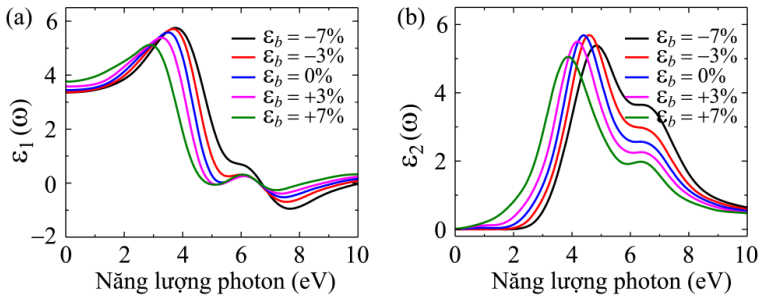
trong đó ω là tần số góc; *e* là điện tích điện tử; *m* là khối lượng điện tử; *V* là thể tích ô đơn vị; $p = (p_x, p_y, p_z)$ là toán tử xung lượng; $|knp\rangle$ là hàm sóng với vecto sóng **k**; f_{kn} là hàm phân bố Fermi.

Hệ số hấp thụ $A(\omega)$ có thể được tính toán từ phần thực và phần ảo của hàm điện môi theo biểu thức (4) [26]:

$$A(\omega) = \frac{\omega\sqrt{2}}{c}\left[\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2+\varepsilon_2(\omega)^2}-\varepsilon_1(\omega)\right]^{1/2}. \quad (4)$$

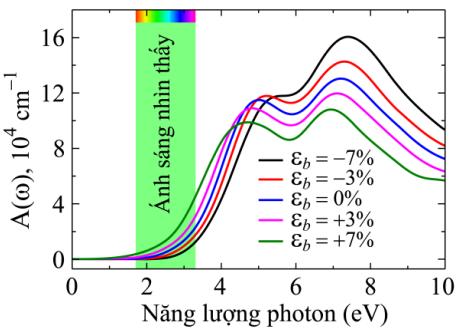
Trên Hình 4, chúng tôi trình bày các kết quả tính toán ảnh hưởng của biến dạng lên phần thực và phần ảo của hàm điện môi trong đơn lớp GaSe. Từ Hình 4a, có thể thấy rằng biến dạng nén gần như không làm thay đổi hằng số điện môi tĩnh ε(0) của vật liệu trong khi biến dạng kéo làm tăng mạnh hằng số điện môi tĩnh của nó từ 3,454 ở trạng thái cân bằng lên 3,778 tại $\varepsilon_b = 7\%$. Trong phổ quang học của $\varepsilon_2(\omega)$, đỉnh chính nằm trong miền tử ngoại gần (ở vị trí khoảng 4,5 eV). Biến dạng không chỉ làm giảm cường độ của đỉnh mà còn làm dịch chuyển vị trí của đỉnh. Các tính toán của chúng tôi cho thấy rằng, biến dạng kéo đã làm cho đỉnh chính trong phổ quang học của $\varepsilon_2(\omega)$ dịch chuyển về miền năng lượng thấp hơn trong khi đỉnh này sẽ dịch chuyển về miền năng lượng cao hơn trong trường hợp đơn lớp GaSe chịu ảnh hưởng của biến dạng nén.

DOI: 10.26459/hueuni-jns.v129i1C.5882



Hình 4. (a) Phần thực $\varepsilon_1(\omega)$ và (b) phần ảo $\varepsilon_2(\omega)$ của hằng số điện môi của đơn lớp GaSe khi có mặt của biến dạng ε_b

Đặc trưng quan trọng nhất trong tính chất quang của vật liệu là hệ số hấp thụ. Đặc trưng này có vai trò quyết định trong việc xác định triển vọng ứng dụng của vật liệu trong các thiết bị quang – điện tử. Trên Hình 5, chúng tôi biểu diễn phổ hấp thụ quang $A(\omega)$ của đơn lớp GaSe khi có mặt của biến dạng. Sự hấp thụ quang của đơn lớp GaSe được kích hoạt trong miền ánh sáng nhìn thấy và cường độ hấp thụ của nó tăng nhanh rồi đạt cực đại trong miền ánh sáng tử ngoại gần. Trong miền năng lượng từ 0 đến 10 eV, phổ hấp thụ của đơn lớp có hai đỉnh hấp thụ, trong đó, ở trạng thái cân bằng, đỉnh hấp thụ chính nằm ở vị trí 7,211 eV với cường độ 13,041 × 10^4 cm^{-1}. Biến dạng làm thay đổi đáng kể phổ hấp thụ của đơn lớp GaSe. Từ Hình 5, có thể thấy cường độ hấp thụ được gia tăng một cách mạnh mẽ bởi biến dạng nén trong miền năng lượng từ 6 eV đến 8 eV. Bên cạnh đó, biến dạng cũng làm thay đổi vị trí của các đỉnh hấp thụ. Biến dạng nén làm đỉnh hấp thụ chính dịch chuyển về miền năng lượng cao hơn. Trong khi đó, đỉnh hấp thụ chính trong phổ hấp thụ của đơn lớp GaSe lại dịch chuyển về miền năng lượng thấp hơn (và cường độ của đỉnh cũng bị giảm) khi có mặt của biến dạng kéo. Đối với vùng ánh sáng nhìn thấy, các kết quả tính toán của chúng tôi đã chỉ ra rằng, hệ số hấp thụ của đơn lớp GaSe ở trong miền này lên đến là 2,244 × 10^4 cm^{-1} và có thể gia tăng do biến dạng kéo. Trong miền ánh sáng nhìn thấy, biến dạng kéo làm tăng đáng kể hệ số hấp thụ, lên đến 4,429 × 10^4 cm^{-1} tại ε_b = 7%, trong khi hệ số hấp thụ của đơn lớp GaSe giảm nhẹ khi chịu ảnh hưởng của biến dạng nén. Xu hướng thay đổi trong giá trị của hệ số hấp thụ do ảnh hưởng của biến dạng ở trong miền ánh sáng nhìn thấy là trái ngược với xu hướng thay đổi của nó trong miền ánh sáng tử ngoại gần. Với miền hấp thụ rộng và đặc biệt là có hệ số hấp thụ cao trong miền ánh sáng nhìn thấy, đơn lớp GaSe có nhiều triển vọng được ứng dụng vào trong các thiết bị quang – điện tử.



Hình 5. Ảnh hưởng của biến dạng ε_b lên hệ số hấp thụ $A(\omega)$ của đơn lớp GaSe

4 Kết luận

Trong bài báo này, các tính chất điện tử và quang học của đơn lớp GaSe bị biến dạng đã được nghiên cứu bằng Lý thuyết phiếm hàm mật độ. Các tính chất điện tử của đơn lớp GaSe phụ thuộc rất lớn vào biến dạng và có thể dễ dàng điều khiển được độ rộng vùng cấm của nó bằng biến dạng. Phổ hấp thụ quang của đơn lớp được kích hoạt trong miền ánh sáng nhìn thấy và cường độ hấp thụ đạt cực đại trong miền ánh sáng tử ngoại gần. Biến dạng không chỉ làm thay đổi một cách đáng

pISSN 1859-1388
eISSN 2615-9678

kể cường độ hấp thụ quang của đơn lớp GaSe mà còn làm dịch chuyển vị trí của các đỉnh hấp thụ. Các kết quả nghiên cứu của chúng tôi không chỉ cung cấp thêm nhiều thông tin về ảnh hưởng của biến dạng lên các tính chất điện tử và quang học của đơn lớp GaSe mà còn có thể làm động lực cho các nghiên cứu thực nghiệm trong tương lai vì triển vọng ứng dụng của nó trong các thiết bị quang – điện tử.

Thông tin tài trợ

Công trình được thực hiện với sự tài trợ của Bộ Giáo dục và Đào tạo (Việt Nam) (Đề tài mã số B2019-DNA-07).

Tài liệu tham khảo

1. Novoselov KS, Geim AK, Morozov SV, Jiang D, Zhang Y, Dubonos SV, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. Science. 2004;306:666-669.
2. Bhimanapati GR, Lin Z, Meunier V, Jung Y, Cha J, Das S, et al. Recent advances in two-dimensional materials beyond graphene. ACS Nano. 2015;9:11509-11539.
3. Lalmi B, Oughaddou H, Enriquez H, Kara A, Vizzini S, Ealet B, et al. Epitaxial growth of a silicene sheet. Appl Phys Lett. 2010;97:223109.
4. Woomer AH, Farnsworth TW, Hu J, Wells RA, Donley CL, Warren SC. Phosphorene: Synthesis, scale-up, and quantitative optical spectroscopy. ACS Nano. 2015;9:8869.
5. Coleman JN, Lotya M, O'Neill A, Bergin SD, King PJ, Khan U, et al. Two-dimensional nanosheets produced by liquid exfoliation of layered materials. Science. 2011;331:568-571.
6. Wang Z, Xu K, Li Y, Zhan X, Safdar M, Wang Q, et al. Role of Ga vacancy on a multilayer GaTe phototransistor. ACS Nano. 2014;8(5):4859-65.
7. Mukherjee B, Cai Y, Tan HR, Feng YP, Tok ES, Sow CH. NIR Schottky photodetectors based on individual single-crystalline GeSe nanosheet. ACS Appl Mater Interfaces. 2013;5(19):9594-604.
8. Yagmurcukardes M, Senger R, Peeters F, Sahin H. Mechanical properties of monolayer GaS and GaSe crystals. Phys Rev B. 2016;94(24):245407.
9. Xu K, Yin L, Huang Y, Shifa TA, Chu J, Wang F, et al. Synthesis, properties and applications of 2D layered $M^{III}X^{IV}$ (M = Ga, In; X= S, Se, Te) materials. Nanoscale. 2016;8(38):16802-18.
10. Lei S, Ge L, Liu Z, Najmaei S, Shi G, You G, et al. Synthesis and photoresponse of large GaSe atomic layers. Nano Lett. 2013;13(6):2777-81.
11. Demirci S, Avazlı N, Durgun E, Cahangirov S. Structural and electronic properties of monolayer group III monochalcogenides. Phys Rev B. 2017;95(11):115409.
12. Late DJ, Liu B, Luo J, Yan A, Matte HR, Grayson M, et al. GaS and GaSe ultrathin layer transistors. Adv Mater. 2012;24(26):3549-54.
13. Ren C, Wang S, Tian H, Luo Y, Yu J, Xu Y, et al. First-principles investigation on electronic properties and band alignment of group III monochalcogenides. Sci Rep. 2019;9(1):1-6.
14. Zhou X, Cheng J, Zhou Y, Cao T, Hong H, Liao Z, et al. Strong second-harmonic generation in atomic layered GaSe. J Am Chem Soc. 2015;137(25):7994-7.
15. Venkateshvaran D, Althammer M, Nielsen A, Geprägs S, Rao MR, Goennenwein ST, et al. Epitaxial $Zn_x Fe_{3-x}O_4$ thin films: a spintronic material with tunable electrical and magnetic properties. Phys Rev B. 2009;79(13):134405.
16. Zhou S, Liu C-C, Zhao J, Yao Y. Monolayer group-III monochalcogenides by oxygen functionalization: a promising class of two-dimensional topological insulators. npj Quantum Mater. 2018;3(1):1-7.
17. Khoa DQ, Nguyen DT, Nguyen CV, Vi VT, Phuc HV, Phuong LT, et al. Modulation of electronic properties of monolayer InSe through strain and external electric field. Chem Phys. 2019;516:213-7.
18. Pham KD, Vi VT, Thuan DV, Hieu NV, Nguyen CV, Phuc HV, et al. Tuning the electronic properties of GaS monolayer by strain engineering and electric field. Chem Phys. 2019;524:101-5.
19. Vi VT, Hieu NN, Hoi BD, Binh NT, Vu TV. Modulation of electronic and optical properties of GaTe monolayer by biaxial strain and electric field. Superlattices Microstruct. 2020;140:106435.
20. Huang L, Chen Z, Li J. Effects of strain on the band gap and effective mass in two-dimensional monolayer GaX (X= S, Se, Te). RSC Adv. 2015;5(8):5788-94.
21. Giannozzi P, Baroni S, Bonini N, Calandra M, Car R, Cavazzoni C, et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for

quantum simulations of materials. J Phys: Condens Matter. 2009;21(39):395502.

22. Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. Phys Rev Lett. 1996;77(18):3865.
23. Grimme S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. J Comput Chem. 2006;27(15):1787-99.
24. Delin A, Ravindran P, Eriksson O, Wills J. Full-potential optical calculations of lead chalcogenides. Int J Quantum Chem. 1998;69(3):349-58.
25. Karazhanov SZ, Ravindran P, Kjekshus A, Fjellvåg H, Svensson B. Electronic structure and optical properties of Zn X (X= O, S, Se, Te): A density functional study. Phys Rev B. 2007;75(15):155104.
26. Ravindran P, Delin A, Johansson B, Eriksson O, Wills J. Electronic structure, chemical bonding, and optical properties of ferroelectric and antiferroelectric $NaNO_2$. Phys Rev B. 1999;59(3): 1776.