

NGHIÊN CỨU CÁC TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ VÀ TRUYỀN DẪN CỦA VẬT LIỆU HAI CHIỀU ĐƠN LỚP JANUS TiSiSeP_2 BẰNG LÝ THUYẾT PHIẾM HÀM MẬT ĐỘ

Võ Thị Tuyết Vi^{1*}, Nguyễn Quang Cường², Nguyễn Ngọc Hiếu²

¹Khoa Cơ bản, Trường Đại học Y - Dược, Đại học Huế, 06 Ngô Quyền, Huế, Việt Nam

²Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Trường Đại học Duy Tân, 03 Quang Trung, Đà Nẵng, Việt Nam

* Tác giả liên hệ Võ Thị Tuyết Vi <vothituyetvi@hueuni.edu.vn>

(Ngày nhận bài: 11-07-2023; Hoàn thành phản biện: 16-08-2023; Ngày chấp nhận đăng: 16-08-2023)

Tóm tắt. Trong bài báo này, các tính chất điện tử và truyền dẫn của vật liệu hai chiều đơn lớp Janus TiSiSeP_2 được nghiên cứu bằng pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). Các tính toán cho thấy đơn lớp TiSiSeP_2 có cấu trúc bền vững và có khả năng tổng hợp được bằng thực nghiệm. Ở trạng thái cơ bản, đơn lớp Janus TiSiSeP_2 là bán dẫn với vùng cấm gián có bề rộng là 1,23 eV khi được tính bằng phiếm hàm lai HSE06. Các đặc trưng điện tử của TiSiSeP_2 phụ thuộc rất lớn vào biến dạng, đặc biệt là độ rộng vùng cấm. Bên cạnh đó, các đặc trưng truyền dẫn của TiSiSeP_2 cũng đã được tính toán một cách hệ thống trong bài báo này. Các kết quả nghiên cứu góp phần hiểu rõ hơn về các tính chất vật lý của vật liệu hai chiều đơn lớp Janus TiSiSeP_2 .

Từ khóa: Vật liệu Janus hai chiều, tính chất điện tử, độ linh động của điện tử, lý thuyết phiếm hàm mật độ

Investigation on electronic and transport properties of two-dimensional Janus TiSiSeP_2 monolayer using density functional theory

Vo Thi Tuyet Vi^{1*}, Nguyen Quang Cuong², Nguyen Ngoc Hieu²

¹Faculty of Basic Science, University of Medicine and Pharmacy, Hue University, Vietnam

²Institute of Research and Development, Duy Tan University, 03 Quang Trung, Da Nang, Vietnam

* Correspondence to Vo Thi Tuyet Vi <vothituyetvi@hueuni.edu.vn>

(Received: 11 July 2023; Revised: 16 August 2023; Accepted: 16 August 2023)

Abstract. In this paper, the electronic and transport properties of two-dimensional (2D) Janus TiSiSeP_2 monolayer were studied using density functional theory (DFT). The results exhibited that the Janus TiSiSeP_2 monolayer is structurally stable and can be experimentally synthesized. At the ground state, the Janus TiSiSeP_2 monolayer is an indirect semiconductor with a band gap of 1.23 eV at the hybrid functional HSE06 level. The electronic characteristics of TiSiSeP_2 depend highly on an applied strain, especially the band gap. Besides, the transport characteristics of TiSiSeP_2 are also systematically investigated in the present work. Our findings contributed to a better understanding of the physical properties of 2D Janus TiSiSeP_2 monolayer.

Keywords: Two-dimensional Janus materials, electronic properties, electron mobility, density functional theory

1 Mở đầu

Các vật liệu hai chiều (2D) có cấu trúc lớp là một trong những họ vật liệu đã được các nhà khoa học đặc biệt quan tâm trong hơn một thập kỷ qua. Các đại diện tiêu biểu cho vật liệu 2D là graphene, silicene, germanene, các hợp chất kim loại-monochalcogenide hay dichalcogenide, ... Các vật liệu này có tính chất vật lý và hoá học nổi trội, vì vậy chúng được ứng dụng vào các thiết bị nano thế hệ mới [1–3]. Vào năm 2017, hai nhóm độc lập đã đồng thời tổng hợp cấu trúc bất đối xứng Janus MoSSe bằng các phương pháp thực nghiệm khác nhau [4, 5]. Đơn lớp Janus MoSSe được tạo ra bằng cách thay thế một lớp nguyên tử S (Se) bằng một lớp nguyên tử Se (S) trong đơn lớp MoS₂ (MoSe₂). Sự khám ra cấu trúc Janus hai chiều đã thúc đẩy việc nghiên cứu họ vật liệu này ngày càng gia tăng. Sự phá vỡ cấu trúc đối xứng gương theo phương thẳng đứng trong vật liệu Janus đã làm xuất hiện nhiều tính chất vật lý mới lạ mà không tồn tại trong vật liệu đối xứng [6, 7]. Vì vậy, chúng được kỳ vọng sẽ được ứng dụng vào trong các thiết bị điện tử nano thế hệ mới.

Gần đây, đơn lớp hai chiều gồm bảy lớp nguyên tử MoSi₂N₄ được chế tạo thành công bằng phương pháp lắng đọng hơi hoá học [8]. Đơn lớp hai chiều MoSi₂N₄ được tạo thành bởi một lớp MoN₂ được kẹp giữa hai lớp Si-N. Vật liệu này là bán dẫn với vùng cấm xiên (độ rộng vùng cấm khoảng 1,94 eV), độ bền cao (~66 GPa) và có cấu trúc tinh thể độ ổn định cao ở điều kiện bình thường. Các tính toán bằng lý thuyết hàm mật độ dự đoán một họ gồm 72 vật liệu hai chiều có cấu trúc đơn lớp tương tự MoSi₂N₄, bao gồm chất bán dẫn, kim loại và bán kim loại từ tính [9]. Họ vật liệu này có công thức hoá học tổng quát là MA₂Z₄, với M là kim loại chuyển tiếp, A là Si, Ge và Z là N, P, As. Sự đa dạng của các phần tử trong MA₂Z₄ cho

phép khả năng tìm kiếm các vật liệu có độ rộng vùng cấm và các đặc trưng từ tính khác nhau, đây là điều cần thiết cho các ứng dụng trong điện tử, quang điện tử và điện tử học spin.

Tiếp nối thành công của việc tổng hợp vật liệu Janus và họ vật liệu MA₂Z₄, Sibatov và các cộng sự đã đề xuất cấu trúc bất đối xứng Janus XMoSiN₂ (X = S, Se, Te) [10] dựa trên vật liệu MoSi₂N₄. Chất này thu được bằng cách loại bỏ SiN ra khỏi một bề mặt của đơn lớp MoSi₂N₄ và thay thế nguyên tử N còn lại ở cùng bề mặt đó bằng nguyên tử X để thu được một cấu trúc Janus mới gồm năm lớp nguyên tử. Theo xu hướng này, chúng tôi xây dựng mô hình và nghiên cứu các tính chất điện tử của đơn lớp Janus TiSiSeP₂ được tạo thành từ vật liệu TiSi₂P₄ bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). Đầu tiên, chúng tôi khảo sát cấu trúc và các tham số cấu trúc tinh thể của đơn lớp Janus TiSiSeP₂. Tiếp theo, chúng tôi kiểm tra sự ổn định của hợp chất này ở điều kiện thông thường bằng việc tính toán phổ phonon và năng lượng cố kết. Các tính chất điện tử như cấu trúc vùng năng lượng, công thoát điện tử, độ rộng vùng cấm của Janus TiSiSeP₂ được nghiên cứu một cách chi tiết. Bên cạnh đó, ảnh hưởng của biến dạng phẳng lên các đặc trưng điện tử của đơn lớp TiSiSeP₂ cũng được khảo sát. Cuối cùng, chúng tôi khảo sát độ linh động của hạt tải trong vật liệu này thông qua phương pháp thế biến dạng.

2 Phương pháp tính toán

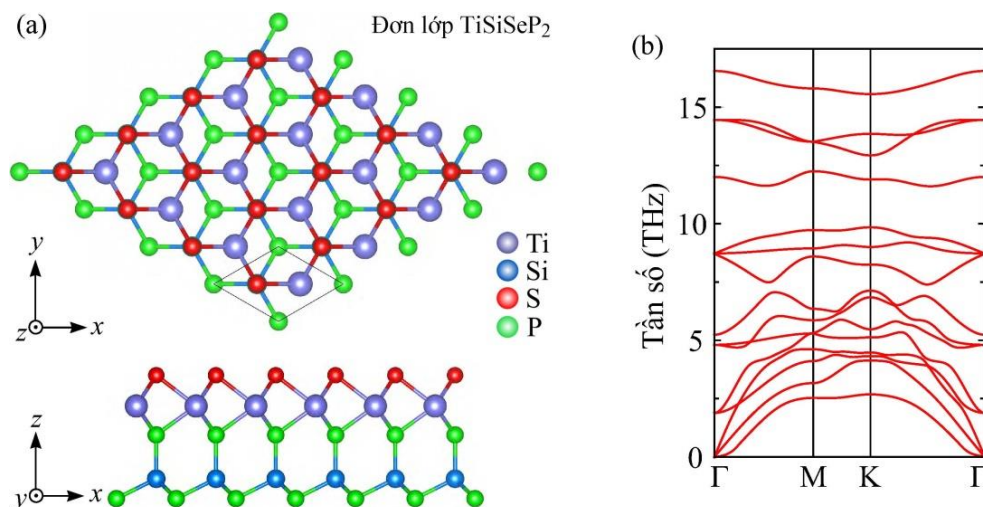
Trong bài báo này, tất cả các tính toán đều được thực hiện bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) dựa trên gói phần mềm mô phỏng Vienna ab initio simulation package (VASP) [11,12]. Chúng tôi sử dụng phương pháp gần đúng gradient suy rộng (GGA) với phiếm hàm PBE (Perdew, Burke và Ernzerhof) [13] hay hàm lai

HSE06 (Heyd, Scuseria và Ernzerhof) [14] để nghiên cứu các tương tác trao đổi tương quan trong vật liệu. Chúng tôi dùng phương pháp phiếm hàm mật độ cải tiến DFT-D2 của Grimme [15] để khảo sát các tương tác van der Waals tồn tại trong cấu trúc lớp. Đối với vật liệu bất đối xứng Janus, sự hiệu chỉnh lưỡng cực cần được tính đến trong quá trình khảo sát thế tĩnh điện do có sự khác nhau về độ âm điện giữa các lớp nguyên tử ở các bên khác nhau trong vật liệu [16]. Ngưỡng hội tụ về lực trong quá trình tối ưu hoá cấu trúc là 10^{-3} eV/Å. Năng lượng ngưỡng trong phương pháp sóng phẳng được chọn là 500 eV. Vùng Brillouin được chia thành lưới $(15 \times 15 \times 1)$ k -mesh bằng phương pháp chia lưới Monkhorst-Pack. Để loại bỏ tương tác giữa các lớp lân cận, một khoảng chân không 20 Å được thiết lập theo phương thẳng đứng (dọc theo trục Oz). Phổ phonon của vật liệu được tính toán thông qua gói mô phỏng PHONOPY [17] với siêu ô $(4 \times 4 \times 1)$. Độ linh động của hạt tải được xác định thông qua phương pháp thế biến dạng [18].

3 Kết quả và thảo luận

3.1 Cấu trúc và độ ổn định

Cấu trúc của đơn lớp Janus 2D TiSiSeP₂ sau khi được tối ưu hoá được trình bày ở Hình 1(a).



Hình 1. Cấu trúc tinh thể theo các góc nhìn khác nhau (a) và phổ phonon (b) của vật liệu hai chiều đơn lớp Janus TiSiSeP₂

Janus TiSiSeP₂ có cấu trúc bất đối xứng được tạo thành bởi năm lớp nguyên tử theo thứ tự P-Si-P-Ti-Se. Kết quả tính toán các tham số cấu trúc của đơn lớp Janus TiSiSeP₂ chỉ ra rằng TiSiSeP₂ có hằng số mạng là 3,50 Å và bề dày là 6,25 Å. Giá trị hằng số mạng của TiSiSeP₂ gần bằng với hằng số mạng của đơn lớp TiSi₂P₄ (3,53 Å) [9].

Để kiểm tra độ ổn định của vật liệu trong điều kiện thông thường, chúng tôi tiến hành thực hiện tính toán phổ phonon dựa trên lý thuyết phần tử hữu hạn thông qua gói mô phỏng PHONOPY [17]. Vì ô đơn vị chứa 5 nguyên tử nên phổ phonon của đơn lớp TiSiSeP₂ gồm 15 nhánh dao động, trong đó có 3 nhánh dao động âm ở miền tần số thấp và 12 nhánh dao động quang ở miền tần số cao hơn. Kết quả tính toán cho thấy phổ dao động của TiSiSeP₂ chỉ chứa các tần số dương trong toàn miền Brillouin như được mô tả trong Hình 1(b). Điều này khẳng định rằng đơn lớp Janus TiSiSeP₂ ổn định về mặt động học và về nguyên tắc chúng ta có thể tổng hợp được đơn lớp này bằng thực nghiệm. Hình 1(b) cũng cho thấy rằng các dao động âm và dao động quang có phần chồng lấn lên nhau dẫn đến có sự tán xạ mạnh giữa các phonon âm và phonon quang. Hệ quả là vật liệu TiSiSeP₂ có thể có độ dẫn nhiệt thấp.

Bên cạnh đó, chúng tôi đánh giá độ bền của các liên kết hoá học trong cấu trúc Janus TiSiSeP₂ thông qua việc tính toán năng lượng cố kết. Độ lớn của năng lượng cố kết được xác định bởi biểu thức sau:

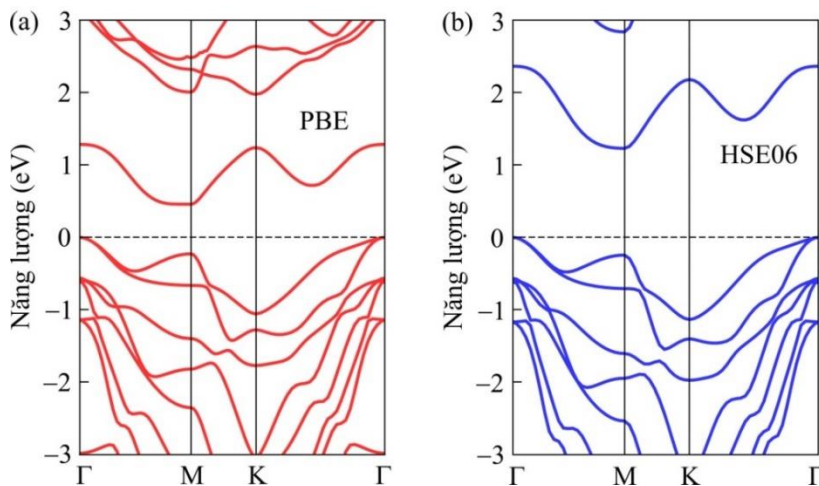
$$E_c = \frac{N_{Ti}E_{Ti} + N_{Si}E_{Si} + N_{Se}E_{Se} + N_P E_P - E_{tot}}{N_{Ti} + N_{Si} + N_{Se} + N_P}, \quad (1)$$

trong đó, E_{Ti} , E_{Si} , E_{Se} và E_P tương ứng là năng lượng đơn nguyên tử của các thành phần Ti, Si, Se và P; E_{tot} là năng lượng toàn phần của TiSiSeP₂; N_{Ti} , N_{Si} , N_{Se} và N_P lần lượt là số nguyên tử Ti, Si, Se và P trong ô đơn vị. Kết quả tính toán của chúng tôi chỉ ra đơn lớp TiSiSeP₂ có năng lượng cố kết là -6,07 eV. Giá trị tuyệt đối của năng lượng cố kết này cao hơn giá trị năng lượng cố kết của các cấu trúc Janus cùng loại là STiXY₂ (X = Si, Ge; Y = N, P, As) [19]. Điều này có nghĩa rằng các liên kết nội phân tử trong đơn lớp TiSiSeP₂ là vững chắc và TiSiSeP₂ ổn định về mặt năng lượng.

3.2 Tính chất điện tử

Trong mục này, chúng tôi trình bày nghiên cứu về các tính chất điện tử của đơn lớp Janus TiSiSeP₂. Hình 2 biểu diễn cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp TiSiSeP₂. Các tính toán bằng phương pháp PBE cho thấy rằng đơn lớp TiSiSeP₂ là bán dẫn có vùng cấm xiên với cực tiểu vùng dẫn (CBM) và cực đại vùng hoá trị (VBM)

nằm lần lượt tại điểm M và điểm G trong vùng Brillouin. Năng lượng vùng cấm của TiSiSeP₂ được tính theo phương pháp PBE có độ lớn là 0,46 eV. Tuy nhiên, phương pháp PBE có nhược điểm là đánh giá chưa chính xác độ rộng vùng cấm của các chất bán dẫn. Do đó, trong bài báo này, chúng tôi đã tính toán cấu trúc vùng năng lượng điện tử bằng cách sử dụng phương pháp phiếm hàm lai HSE06 để khắc phục hạn chế này. Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp TiSiSeP₂ tính bằng phương pháp HSE06 được thể hiện ở Hình 2(b). Chúng ta thấy rằng cấu trúc vùng năng lượng điện tử được tính bằng phương pháp PBE và HSE06 có cùng dáng điệu. Vị trí của CBM và VBM trong miền Brillouin trong cả hai phương pháp là không thay đổi. Tuy nhiên, giá trị năng lượng vùng cấm được tính theo phương pháp HSE06 là lớn hơn nhiều giá trị độ rộng vùng cấm tính theo phương pháp PBE. Cụ thể trong trường hợp này, đơn lớp Janus TiSiSeP₂ có độ rộng vùng cấm 1,23 eV khi sử dụng phiếm hàm lai HSE06. Kết quả tính toán của chúng tôi cho thấy một điều thú vị rằng, trong khi đơn lớp TiSi₂P₄ [10] là một kim loại thì cấu trúc Janus của nó (TiSiSeP₂) lại là một bán dẫn có vùng cấm khá rộng như biểu diễn ở Hình 2. Rõ ràng rằng, ảnh hưởng của sự thay đổi cấu trúc nguyên tử lên các đặc trưng điện tử trong trường hợp này là rất lớn.



Hình 2. Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của TiSiSeP₂ được tính toán với phiếm hàm PBE (a) và HSE06 (b)

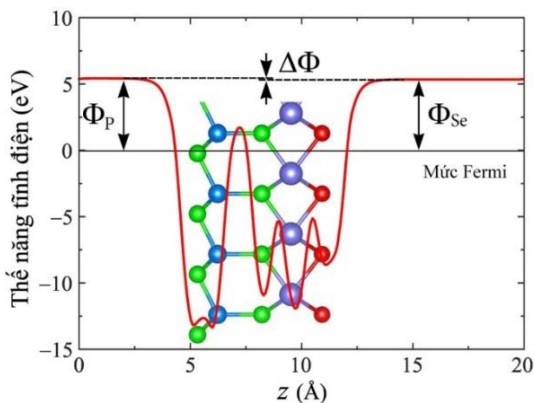
Một trong những tính chất điện tử quan trọng của vật liệu là công thoát điện tử. Đây là đại lượng cho biết khả năng thoát khỏi bề mặt vật liệu của các điện tử. Công thoát điện tử được tính toán dựa vào biểu thức sau:

$$\Phi = E_{CK} - E_F, \quad (2)$$

trong đó, E_{CK} và E_F lần lượt là mức chân không và mức Fermi.

Đối với các vật liệu có cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng như Janus, có tồn tại một điện trường nội tại ở bên chúng do sự có sự khác nhau về độ âm điện giữa các lớp nguyên tử ở hai bên. Do đó, để khảo sát thể tính điện trong các cấu trúc Janus cần phải tính đến sự hiệu chỉnh lưỡng cực [16].

Thể tính điện của đơn lớp Janus TiSiSeP_2 với sự hiệu chỉnh lưỡng cực được biểu diễn ở Hình 3. Rõ ràng rằng vì cấu trúc bất đối xứng nên độ sâu của các nhánh trong thể tính điện là khác nhau và hình dạng thể tính điện là bất đối xứng. Đồng thời, có sự chênh lệch mức chân không ở hai bề mặt của vật liệu dẫn đến công thoát điện tử ở hai bề mặt vật liệu là khác nhau. Tuy vậy, sự chênh lệch mức chân không giữa hai bề mặt khác nhau $\Delta\Phi$ của TiSiSeP_2 là không đáng kể. Kết quả tính toán cho thấy rằng công thoát điện tử ở bề mặt P là 5,42 eV và ở bề mặt Se là 5,34 eV. Điều này có nghĩa rằng các điện tử có thể dễ dàng thoát ra khỏi bề mặt Se hơn là ở bề mặt P.

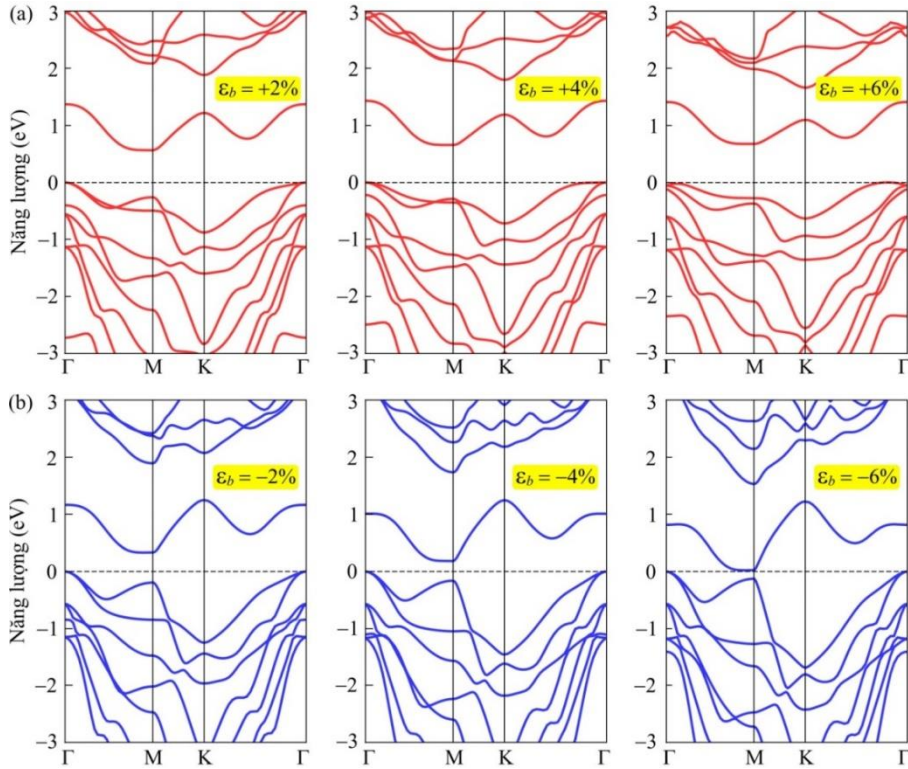


Hình 3. Thể năng tính điện của đơn lớp TiSiSeP_2 . Sự chênh lệch mức chân không được biểu diễn bằng đại lượng $\Delta\Phi$

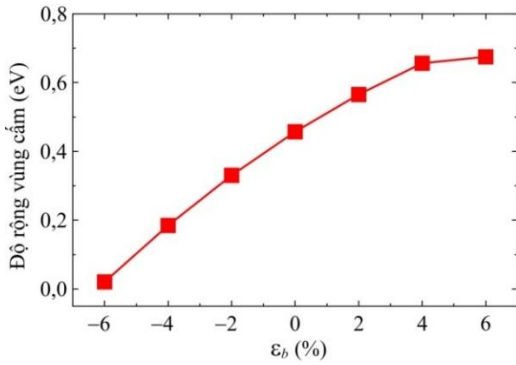
Ảnh hưởng của biến dạng phẳng lên tính chất điện tử

Các nghiên cứu trước đây đã chỉ ra rằng các tính chất điện tử của vật liệu 2D dễ bị thay đổi dưới tác dụng của các yếu tố bên ngoài [20, 21]. Do đó, trong bài báo này chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của biến dạng phẳng (bị kéo hoặc nén đồng thời dọc theo hai hướng x và y) lên các đặc trưng điện tử của đơn lớp Janus TiSiSeP_2 . Biến dạng được xem là cách thông dụng và dễ dàng nhất để làm thay đổi tính chất điện tử của vật liệu nano có cấu trúc lớp. Độ biến dạng ε_{xy} được định nghĩa là $\varepsilon_b = \frac{a-a_0}{a_0} \cdot 100\%$, trong đó a_0 và a là hằng số mạng trước và sau biến dạng. ε_b sẽ có giá trị dương nếu là biến dạng kéo và ngược lại. Ở đây chúng tôi nghiên cứu độ biến dạng có giá trị biến thiên từ -6% đến 6% .

Hình 4 trình bày cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp Janus TiSiSeP_2 khi bị biến dạng kéo và biến dạng nén. Kết quả tính toán cho thấy rằng biến dạng ảnh hưởng lớn đến cấu trúc vùng năng lượng điện tử của TiSiSeP_2 . Biến dạng không chỉ làm thay đổi giá trị năng lượng vùng cấm mà còn làm thay đổi vị trí của VBM tức là khi biến dạng kéo đạt giá trị 6% , VBM của Janus TiSiSeP_2 dịch chuyển từ điểm Γ đến nằm trên đường thẳng ΓK . Tuy nhiên, CBM vẫn nằm ở điểm M nên cấu trúc TiSiSeP_2 vẫn giữ nguyên đặc tính bán dẫn vùng cấm xiên. Biến dạng làm thay đổi một cách đáng kể độ rộng của vùng cấm của TiSiSeP_2 như biểu diễn ở Hình 5. Trong khi biến dạng kéo có xu hướng làm tăng độ rộng vùng cấm của TiSiSeP_2 thì biến dạng nén lại làm giảm nhanh độ rộng vùng cấm của nó. Với các phân tích trên, chúng ta thấy rằng biến dạng đã làm thay đổi các tính chất điện tử của đơn lớp Janus TiSiSeP_2 , đặc biệt là biến dạng nén. Việc điều chỉnh được độ rộng vùng cấm trong cấu trúc TiSiSeP_2 đã làm cho vật liệu này có tiềm năng ứng dụng vào trong các thiết bị cơ-điện tử nano.



Hình 4. Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của TiSiSe₂ khi bị biến dạng kéo (a) và biến dạng nén (b)



Hình 5. Sự phụ thuộc của độ rộng vùng cấm của TiSiSe₂ vào độ biến dạng

Độ linh động của hạt tải

Độ linh động của hạt tải là một đại lượng quan trọng của vật liệu vì nó ảnh hưởng đến khả năng ứng dụng thực tế vào các thiết bị điện tử. Độ linh động của vật liệu 2D có thể được xác định bởi phương pháp thể biến dạng thông qua biểu thức sau [18]:

$$\mu_{2D} = \frac{e\hbar^3 C_{2D}}{k_B T m^* \bar{m} E_d^2}, \quad (3)$$

trong đó, e là điện tích của điện tử, \hbar là hằng số Planck rút gọn, C_{2D} là mô đun đàn hồi, E_d là hằng số thể biến dạng, k_B là hằng số Boltzmann, m^* và $\bar{m} = \sqrt{m_x m_y}$ là khối lượng hiệu dụng và khối lượng hiệu dụng trung bình của hạt tải. T là nhiệt độ và được chọn là 300 K (nhiệt độ phòng) trong các tính toán ở bài báo này.

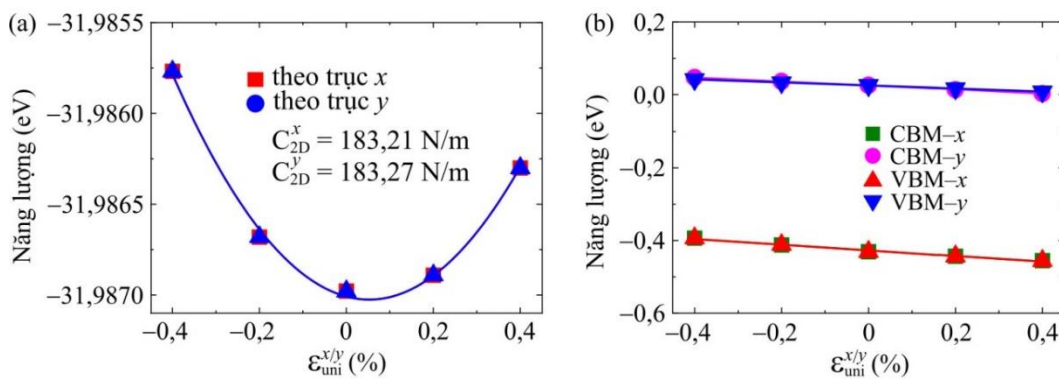
Khối lượng hiệu dụng là một trong những tham số ảnh hưởng trực tiếp đến độ linh động của hạt tải. Khối lượng hiệu dụng của hạt tải được xác định bằng cách khớp các giá trị xung quanh CBM (điện tử) và VBM (lỗ trống) theo hàm parabol $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right|$, với $E(k)$ là năng lượng phụ thuộc vectơ sóng k tại các điểm cực trị. Kết quả tính toán khối lượng hiệu dụng của hạt tải trong đơn lớp TiSiSe₂ được liệt kê ở Bảng 1. Rõ ràng rằng không có sự chênh lệch lớn về khối lượng hiệu dụng của lỗ trống theo hai hướng x và y . Trong khi đó, khối lượng hiệu dụng của electron giữa hướng x và hướng y có sự khác biệt đáng kể. Đồng thời, khối

lượng hiệu dụng của lỗ trống nhỏ hơn nhiều so với khối lượng hiệu dụng của electron. Điều này làm cho lỗ trống sẽ phản ứng nhanh hơn với trường ngoài.

Mô đun đàn hồi C_{2D} được xác định bởi $C_{2D} = \frac{1}{S_0} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_{uni}^2}$, với E là năng lượng toàn phần của hệ, S_0 là diện tích ô đơn vị, ε_{uni} là độ biến dạng dọc theo các hướng truyền dẫn x và y . Hình 6(a) biểu diễn sự phụ thuộc của năng lượng toàn phần của TiSiSeP₂ theo độ biến dạng trục. Kết quả tính toán cho thấy rằng, mô đun đàn hồi theo hai hướng x và y lần lượt là 183,21 N/m và 183,27 N/m.

Hằng số thể biến dạng E_d được tính toán bởi biểu thức $E_d = \frac{\Delta E}{\varepsilon_{uni}}$, với ΔE là độ lệch năng lượng của CBM và VBM so với mức chân không được gây ra bởi biến dạng dọc theo các hướng x và y . Bằng cách khớp các giá trị năng lượng phụ thuộc biến dạng của CBM và VBM theo hàm tuyến tính như được biểu diễn ở Hình 6(b), chúng ta sẽ thu được giá trị của hằng số thể biến dạng. Kết quả tính toán các tham số truyền dẫn được trình bày ở Bảng 1.

Kết quả ở Bảng 1 chỉ ra rằng các điện tử ở trong TiSiSeP₂ có khối lượng hiệu dụng rất lớn. Điều này phù hợp với cấu trúc vùng năng lượng của TiSiSeP₂ như biểu diễn ở Hình 4. Thật vậy, chúng ta thấy rằng cấu trúc vùng năng lượng lân cận điểm cực tiểu vùng dẫn CBM của TiSiSeP₂ khá phẳng. Từ công thức tính khối lượng hiệu dụng, chúng ta thấy rằng bán kính các đường cong ở phổ năng lượng càng lớn thì giá trị $\partial^2 E(k)/\partial k^2$ càng nhỏ và dẫn đến khối lượng hiệu dụng càng lớn. Khối lượng hiệu dụng càng lớn thì khả năng phản ứng lại với trường ngoài càng chậm. Do đó, với khối lượng hiệu dụng lớn, độ linh động của hạt tải trong TiSiSeP₂ có thể rất nhỏ. Các tính toán của chúng tôi cho thấy rằng có sự chênh lệch lớn trong độ linh động của điện tử và lỗ trống. Độ linh động của lỗ trống dọc theo các hướng truyền dẫn x và y lần lượt là 46,19 cm²V⁻¹s⁻¹ và 29,58 cm²V⁻¹s⁻¹, lớn hơn nhiều độ linh động của điện tử với $\mu_x = 3,56$ cm²V⁻¹s⁻¹ và $\mu_y = 1,26$ cm²V⁻¹s⁻¹. Sự chênh lệch lớn giữa độ linh động của điện tử và lỗ trống, đặc biệt là độ linh động của điện tử rất nhỏ như thế này cũng đã được tìm thấy trong các vật liệu Janus cùng nhóm có cấu trúc tương tự TiSiSeP₂, chẳng hạn như TiSiSn₂ [19].



Hình 6. Sự phụ thuộc của năng lượng toàn phần (a) và năng lượng của cực đại vùng hóa trị (VBM) và cực tiểu vùng dẫn (CBM) (b) của TiSiSeP₂ vào độ biến dạng dọc theo trục x/y $\varepsilon_{uni}^{x/y}$

Bảng 1. Khối lượng hiệu dụng của hạt tải m^* (m_0), mô đun đàn hồi C_{2D} (N/m), hằng số thể biến dạng E_d (eV) và độ linh động hạt tải μ (cm²V⁻¹s⁻¹) dọc theo hướng $x(y)$ của TiSiSeP₂. m_0 là khối lượng điện tử tự do

	m_x^*	m_y^*	C_{2D}^x	C_{2D}^y	E_d^x	E_d^y	μ_x	μ_y
Electron	4,14	19,7	183,21	183,21	-5,41	-4,17	3,56	1,26
Lỗ trống	1,06	1,66	183,21	183,21	-7,75	-7,75	46,19	29,58

4. Kết luận

Các tính chất điện tử của đơn lớp Janus hai chiều TiSiSeP_2 đã được nghiên cứu bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ dựa trên gói phần mềm mô phỏng VASP. Các tính toán về phổ dao động và năng lượng cố kết đã khẳng định độ ổn định và khả năng tổng hợp được bằng thực nghiệm của Janus TiSiSeP_2 . Với các phiếm hàm PBE và HSE06, đơn lớp TiSiSeP_2 thể hiện đặc tính bán dẫn có vùng cấm xiên với giá trị vùng cấm lần lượt là 0,46 và

1,23 eV. Các tính toán về thế tĩnh điện cho thấy công thoát điện tử ở hai bề mặt của đơn lớp TiSiSeP_2 là khác nhau do cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng. Bên cạnh đó, chúng tôi cũng khảo sát ảnh hưởng của biến dạng lên tính chất điện tử của vật liệu. Ngoài ra, các kết quả tính toán của chúng tôi cũng chỉ ra rằng điện tử trong Janus TiSiSeP_2 có độ linh động kém. Kết quả tính toán của chúng tôi góp phần cung cấp thông tin vào bức tranh tổng quát của họ vật liệu hai chiều Janus dựa trên MA_2Z_4 .

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Đại học Huế trong đề tài mã số DHH2023-04-207.

Tài liệu tham khảo

- Lugovskoi AV, Katsnelson MI, Rudenko AN. Strong electron-phonon coupling and its influence on the transport and optical properties of hole-doped single-layer InSe. *Phys Rev Lett.* 2019;123:176401.
- Poklonski NA, Vyrko SA, Siahlo AI, Poklonskaya ON, Ratkevich SV, Hieu NN, et al. Synergy of physical properties of low-dimensional carbon-based systems for nanoscale device design. *Mater Res Express* 2019;6(4):042002.
- Banszerus L, Schmitz LM, Engels S, Dauber J, Oellers M, Haupt F, et al. Ultrahigh-mobility graphene devices from chemical vapor deposition on reusable copper. *Sci Adv.* 2015;1(6):e1500222.
- Lu A-Y, Zhu H, Xiao J, Chuu C-P, Han Y, Chiu M-H, et al. Janus monolayers of transition metal dichalcogenides. *Nat Nanotechnol.* 2017;12:744.
- Zhang J, Jia S, Kholmanov I, Dong L, Er D, Chen W, et al. Janus Monolayer Transition-Metal Dichalcogenides. *ACS Nano.* 2017;11(8):8192.
- Vu TV, Vi VTT, Nguyen CV, Phuc HV, Hieu NN. Computational prediction of electronic and optical properties of Janus Ga_2SeTe monolayer. *J Phys D: Appl Phys.* 2020;53(45):455302.
- Vu TV, Vi VTT, Phuc HV, Kartamyshev AI, Hieu NN. Oxygenation of Janus group III monochalcogenides: First-principles insights into GaInXO ($X = \text{S, Se, Te}$) monolayers. *Phys Rev B.* 2021;104:115410.
- Hong Y-L, Liu Z, Wang L, Zhou T, Ma W, Xu C, et al. Chemical vapor deposition of layered two-dimensional MoSi_2N_4 materials. *Science.* 2020;369:670-674.
- Wang L, Shi Y, Liu M, Zhang A, Hong Y-L, Li R, et al. Intercalated architecture of MA_2Z_4 family layered van der Waals materials with emerging topological, magnetic and superconducting properties. *Nat Commun.* 2021;12:2361.
- Sibatov RT, Meftakhutdinov RM, Kochaev AI. Asymmetric XMoSiN_2 ($X=\text{S, Se, Te}$) monolayers as novel promising 2D materials for nanoelectronics and photovoltaics. *Appl Surf Sci.* 2022;585:152465.
- Kresse G, Furthmüller F. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys Rev B.* 1996;54:11169.
- Kresse G, and Furthmüller F. Efficiency of *ab-initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Comput Mater Sci.* 1996;6:15.
- Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys Rev Lett.* 1996;77(18):3865.
- Heyd J, Scuseria GE. Efficient hybrid density functional calculations in solids: Assessment of the Heyd-Scuseria-Ernzerhof screened Coulomb hybrid functional. *J Chem Phys.* 2004;121:1187-1192.
- Grimme S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *J Comput Chem.* 2006;27(15):1787-99.
- Bengtsson L. Dipole correction for surface supercell calculations. *Phys Rev B.* 1999;59:12301
- Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *J Chem Phys.* 1984;81: 511.

18. Bardeen J, Shockley W. Deformation Potentials and Mobilities in Non-Polar Crystals. *Phys Rev.* 1950;80:72.
19. Gao Z, He X, Li W, He Y, Xiong K. First principles prediction of two-dimensional Janus STiXY₂ (X = Si, Ge; Y = N, P, As) materials. *Dalton Trans.* 2023;52:8322-8331.
20. Vi VTT, Linh TPT, Ngyyen CQ, Hieu NN. Tunable electronic properties of novel 2D Janus MSiGeN₄ (M = Ti, Zr, Hf) monolayers by strain and external electric field. *Adv Theory Simul.* 2022;5:2200499.
21. Vi VTT, 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.