

# ẢNH HƯỞNG CỦA BIẾN DẠNG VÀ ĐIỆN TRƯỜNG NGOÀI LÊN TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ CỦA ĐƠN LỚP HfSiSP<sub>2</sub>

## EFFECT OF STRAIN AND EXTERNAL ELECTRIC FIELD ON ELECTRONIC PROPERTIES OF HfSiSP<sub>2</sub> MONOLAYER

Nguyễn Quang Cường<sup>1</sup>, Nguyễn Ngọc Hiếu<sup>1</sup>, Dụng Văn Lữ<sup>2\*</sup>, Lê Thị Phương Thảo<sup>2</sup>, Võ Thị Tuyết Vi<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Trường Đại học Duy Tân, Việt Nam

<sup>2</sup>Trường Đại học Sư phạm - Đại học Đà Nẵng, Việt Nam

<sup>3</sup>Trường Đại học Y-Dược - Đại học Huế, Việt Nam

\*Tác giả liên hệ / Corresponding author: dvlv@ued.udn.vn

(Nhận bài / Received: 16/4/2024; Sửa bài / Revised: 13/6/2024; Chấp nhận đăng / Accepted: 15/6/2024)

**Tóm tắt** - Trong bài báo này, các đặc tính cấu trúc, điện tử và truyền dẫn của đơn lớp hai chiều HfSiSP<sub>2</sub> được khảo sát bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). Phân tích phổ phonon và mô phỏng động lực phân tử *ab-initio* cho thấy, đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> có cấu trúc bền vững về mặt động học và có độ ổn định nhiệt tốt. Kết quả tính toán chỉ ra đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> ở trạng thái cơ bản là một bán dẫn có vùng cấm xiên với độ rộng vùng cấm là 0,63 eV. Bên cạnh đó, ảnh hưởng của biến dạng cơ học và điện trường ngoài lên tính chất điện tử của HfSiSP<sub>2</sub> là đáng kể. Biến dạng đã làm thay đổi một cách đáng kể độ rộng vùng cấm của HfSiSP<sub>2</sub>. Ngoài ra, các đặc trưng truyền dẫn của HfSiSP<sub>2</sub> cũng đã được tính toán trong bài báo này. Kết quả cho thấy HfSiSP<sub>2</sub> có tiềm năng ứng dụng cho thiết bị linh kiện điện tử.

**Từ khóa** - Vật liệu hai chiều; tính chất điện tử; lý thuyết phiếm hàm mật độ; mô phỏng động lực học phân tử; bán dẫn có vùng cấm xiên

### 1. Tổng quan

Trong những năm gần đây, các vật liệu mới Janus đã thu hút được sự quan tâm rộng rãi do các đặc tính nổi bật được tạo ra bởi tính bất đối xứng gương của chúng, cùng với việc khám phá lý thuyết ngày càng tăng và nhiều báo cáo về chế tạo thành công các loại vật liệu hai chiều tương tự graphene. Vật liệu hai chiều đã được nghiên cứu sâu rộng do các đặc tính nổi bật được tạo ra bởi tính chất đặc biệt của vật liệu thấp chiều mà vật liệu khối không có được [1]. Do cấu trúc điện tử của chúng có thể điều chỉnh với độ dẫn điện trong phạm vi rộng, vật liệu 2D (từ kim loại, đến chất bán dẫn và chất cách điện) đã cho thấy nhiều hứa hẹn trong các ứng dụng khác nhau, bao gồm cả điện tử nano [2], quang điện tử [3-5], xúc tác [6-7] và cảm biến [8].

Vật liệu monochalcogenide nhóm IV được tiên đoán là có nhiều ứng dụng trong thực tế, đặc biệt là trong công nghệ phân tách nước [9]. Bằng nhiều phương pháp khác nhau, một loạt các lớp nano của vật liệu monochalcogenide nhóm IV đã được tổng hợp thành công bằng thực nghiệm gần đây, chẳng hạn như SiP [10].

Trong nghiên cứu [11] đã chỉ ra rằng, các đơn lớp Janus MGeSiP<sub>4</sub> (M = Ti, Zr hoặc Hf) có cấu trúc đều là chất bán dẫn có vùng cấm xiên với độ rộng vùng cấm  $E_g$  có giá trị

**Abstract** - In this paper, the structural, electronic, and transport properties of two-dimensional monolayer HfSiSP<sub>2</sub> were considered by the density functional theory (DFT). The analysis of the phonon spectra and *ab-initio* molecular dynamics simulations confirms that HfSiSP<sub>2</sub> monolayer has a dynamically stable structure and high thermal stability. The obtained results show that, HfSiSP<sub>2</sub> is an indirect semiconductor with a band gap of 0.63 eV. Besides, it is indicated that the effect of mechanical strain and external electric field on the electronic properties of HfSiSP<sub>2</sub> monolayer is significant. The applied strain significantly changes the band gap of HfSiSP<sub>2</sub>. In addition, the transport characteristics of HfSiSP<sub>2</sub> monolayer were also investigated in this work. The results showed that HfSiSP<sub>2</sub> has potential applications for electronic components.

**Key words** - Two-dimensional material; electronic properties; density functional theory; AIMD simulation; indirect semiconductor

từ 0,77 eV đến 1,01 eV dựa trên các tính toán bằng phiếm hàm lai. Janus MGeSiP<sub>4</sub> có tiềm năng ứng dụng đầy hứa hẹn trong các thiết bị quang điện tử và cơ điện vì sự chuyển pha từ bán dẫn sang kim loại khi biến dạng hai trục. Điều này cho thấy các kim loại nhóm IVB này (Ti, Zr, Hf) trong các đơn lớp với chalcogenide sẽ có nhiều tính chất vật lý thú vị.

Gần đây, Gao và cộng sự báo cáo rằng đơn lớp Janus hai chiều STiXY<sub>2</sub> (X = Si, Ge; Y = N, P, As) là chất bán dẫn có vùng cấm xiên có  $E_g$  từ 0,215 eV đến 0,990 eV với cấu trúc tinh thể ổn định [12]. Thêm nữa, các hợp chất Janus hai chiều SZrAZ<sub>2</sub> (A = Si, Ge; Z = P, As) là bán dẫn có vùng cấm xiên với độ ổn định động học và nhiệt học [13]. Các kết quả này cung cấp những hiểu biết sâu sắc cho việc nghiên cứu các đơn lớp Janus mới có nhiều ứng dụng trong các thiết bị điện tử.

Theo hướng nghiên cứu này, nhóm tác giả thiết kế và nghiên cứu các tính chất điện tử và truyền dẫn của đơn lớp hai chiều Janus HfSiSP<sub>2</sub> bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). Độ ổn định của cấu trúc được tính toán bằng cách phân tích phổ phonon và mô phỏng động học phân tử *ab-initio*. Ngoài ra, nhóm tác giả còn xem xét ảnh hưởng của biến dạng cơ học và điện trường ngoài lên tính chất điện

<sup>1</sup> Institute of Research and Development, Duy Tan University, Viet Nam (Nguyen Quang Cuong, Nguyen Ngoc Hieu)

<sup>2</sup> The University of Danang - University of Science and Education, Viet Nam (Dung Van Lu, Le Thi Phuong Thao)

<sup>3</sup> University of Medicine and Pharmacy, Hue University, Vietnam (Vo Thi Tuyet Vi)

tử của vật liệu này. Bên cạnh đó, độ linh động điện tử trong đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> cũng được tính toán một cách chi tiết.

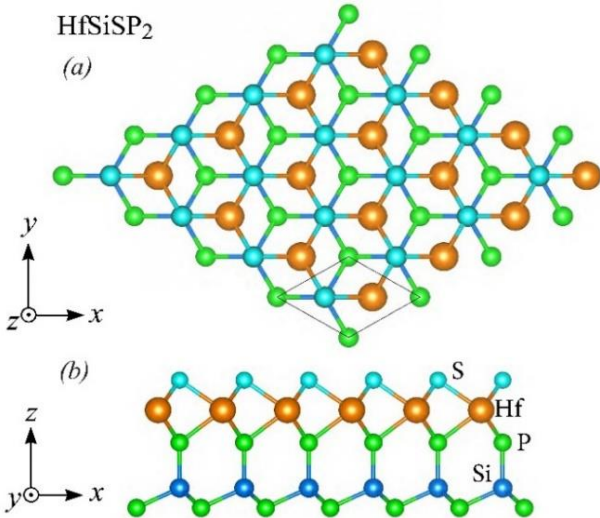
## 2. Phương pháp nghiên cứu

Trong bài báo này, tất cả tính toán được thực hiện bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) với gói phần mềm mô phỏng Vienna ab initio simulation package (VASP) [14, 15]. Phương pháp gần đúng gradient suy rộng (GGA) với phiếm hàm PBE (Perdew, Burke và Ernzerhof) [16] được dùng để khảo sát các tương tác trao đổi tương quan. Phiếm hàm lai HSE06 (Heyd, Scuseria và Ernzerhof) được dùng để tính toán giá trị  $E_g$  một cách chính xác hơn [17]. Chúng tôi sử dụng phương pháp phiếm hàm mật độ cải tiến DFT-D2 của Grimme [18] để tính toán tương tác van der Waals (vdW) trong vật liệu có cấu trúc lớp. Đồng thời, nhóm tác giả sử dụng phương pháp chia lưới Monkhorst-Pack để chia vùng Brillouin thành lưới ( $15 \times 15 \times 15$ ) k-mesh. Năng lượng ngưỡng được thiết lập trong phương pháp sóng phẳng là 500 eV. Ngưỡng hội tụ lực tác dụng lên mỗi nguyên tử trong việc tối ưu hoá cấu trúc là 10<sup>-3</sup> eV/Å. Các tương tác giữa các lớp lân cận được loại bỏ bằng cách thêm một khoảng chân không 20 Å dọc theo trục z của vật liệu. Phần mềm mô phỏng PHONOPY [19] đã được sử dụng để tính toán phổ dao động với siêu ô ( $4 \times 4 \times 1$ ). Để khảo sát thể tinh điện ở các mặt khác nhau của vật liệu bất đối xứng Janus, sự hiệu chỉnh lưỡng cực cần được xem xét [20]. Chúng tôi sử dụng phương pháp thể biến dạng (DP) [21] để tính toán độ linh động của hạt tải.

(2,21 Å) ngắn nhất, ngắn hơn liên kết ngắn nhất trong TiSiSP<sub>2</sub> (2,25 Å) [12]. Điều này là do Hf có độ âm điện nhỏ (1,30) và bán kính lớn hơn nguyên tử Ti.

Kết quả tính toán của nhóm tác giả chỉ ra hằng số mạng của HfSiSP<sub>2</sub> được tối ưu hoá là 3,57 Å, gần với hằng số mạng của TiSiSP<sub>2</sub> (3,46 Å) [12]. Bề dày của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> là 6,24 Å, hoàn toàn giống với bề dày của SMOsiP<sub>2</sub> trong nghiên cứu của nhóm tác giả trước đó [22]. Các độ dài liên kết giữa các nguyên tử trong cấu trúc Janus HfSiSP<sub>2</sub> lần lượt là  $d_{S-Hf} = 2,53$  Å,  $d_{Hf-P} = 2,60$  Å,  $d_{P-Si} = 2,21$  Å và  $d_{Si-P} = 2,28$  Å.

Tiếp theo, nhóm tác giả thực hiện tính toán phổ dao động để kiểm tra độ ổn định của vật liệu. Phổ phonon của đơn lớp Janus HfSiSP<sub>2</sub> được thể hiện trong Hình 2(a). Ô đơn vị của HfSiSP<sub>2</sub> có 5 nguyên tử nên phổ phonon bao gồm 15 nhánh dao động, với 3 nhánh dao động âm ở miền tần số thấp và 12 nhánh dao động quang ở miền tần số cao hơn. Từ Hình 2(a), chúng ta thấy rằng, có một khoảng tần số mà ở đó cả các dao động âm và dao động quang cùng tồn tại. Điều này có thể dẫn đến là có sự tán xạ mạnh giữa các phonon âm và phonon quang và làm cho Janus HfSiSP<sub>2</sub> có thể có độ dẫn nhiệt thấp. Đặc điểm quan trọng nhất là trong toàn miền Brillouin không có sự xuất hiện của tần số với giá trị âm. Điều này cho thấy tính ổn định về mặt động học của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub>. Khi phổ phonon của vật liệu có chứa các tần số dao động âm thì lực phục hồi chống lại sự dịch chuyển của các nguyên tử bị triệt tiêu. Do đó, cấu trúc của các vật liệu với phổ phonon có chứa các tần số dao động âm là không bền.

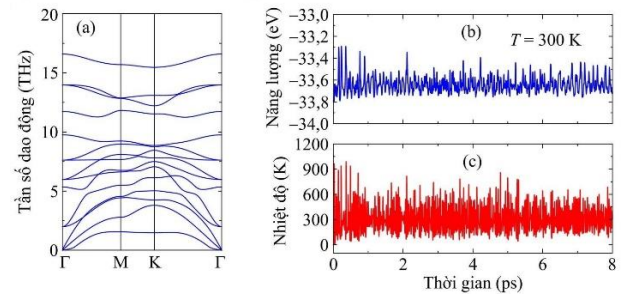


**Hình 1.** Cấu trúc tinh thể đã được tối ưu hóa của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> theo các góc nhìn: (a) từ trên xuống; (b) từ mặt bên

## 3. Kết quả nghiên cứu và thảo luận

### 3.1. Cấu trúc tinh thể và độ ổn định

Cấu trúc tinh thể đã được tối ưu hoá của đơn lớp Janus HfSiSP<sub>2</sub> được trình bày ở Hình 1. Ô đơn vị của đơn lớp Janus HfSiSP<sub>2</sub> chứa 5 nguyên tử. Từ Hình 1, chúng ta thấy rằng đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> có cấu trúc bất đối xứng và được tạo thành bởi năm lớp nguyên tử xếp chồng lên nhau theo thứ tự S-Hf-P-Si-P. Tính toán cho thấy rằng độ dài liên kết Hf-P (2,60 Å) là dài nhất so với các liên kết hóa học giữa các nguyên tử khác trong hợp chất, dài hơn liên kết dài nhất trong TiSiSP<sub>2</sub> (2,51 Å) [12]; và độ dài liên kết P-Si



**Hình 2.** (a) Phổ dao động mạng, (b) sự thăng giáng năng lượng toàn phần và (c) nhiệt độ của hệ trong quá trình mô phỏng động học phân tử ở nhiệt độ phòng

Chúng tôi cũng kiểm tra độ ổn định nhiệt học của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> ở nhiệt độ phòng (300 K) bằng phần mềm mô phỏng động học phân tử (AIMD) trong thời gian 8 ps (với mỗi bước là 1 fs). Độ thăng giáng năng lượng toàn phần theo thời gian mô phỏng và cấu trúc tinh thể sau khi gia nhiệt được biểu diễn ở Hình 2(b) và 2(c). Kết quả cho thấy, năng lượng toàn phần biến thiên trong một khoảng nhỏ (0,20 eV) trong suốt thời gian mô phỏng. Đồng thời, không có sự chuyển đổi cấu trúc cũng như không có sự phá vỡ liên kết trong đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub>. Điều này chứng tỏ cấu trúc HfSiSP<sub>2</sub> ổn định về mặt nhiệt học.

Thông số để đánh giá độ bền về mặt năng lượng của vật liệu là năng lượng cố kết, nó được tính theo biểu thức:

$$E_{coh} = \frac{E_{tot} - (N_{Hf}E_{Hf} + N_{Si}E_{Si} + N_{S}E_{S} + N_{P}E_{P})}{N_{Hf} + N_{Si} + N_{S} + N_{P}} \quad (1)$$

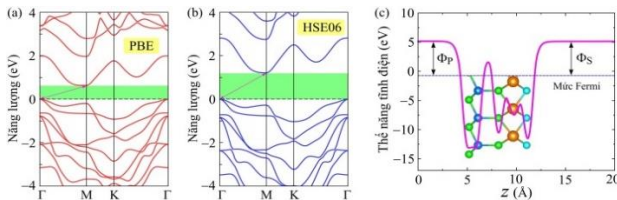
Trong đó,  $E_{tot} = -35,216$  eV là tổng năng lượng của đơn lớp;  $N_{Hf}$ ,  $N_{Si}$ ,  $N_{S}$ ,  $N_{P}$  và  $E_{Hf} = -2,699$  eV,  $E_{Si} = -0,085$  eV,

$E_S = -0,093$  eV,  $E_P = -0,097$  eV lần lượt là số nguyên tử và năng lượng của đơn nguyên tử Hf, Si, S và P. Thay các giá trị năng lượng vào biểu thức (1), ta tính được năng lượng cố kết  $E_{coh} = -6,429$  eV. Như vậy, đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> có giá trị  $E_{coh}$  âm và cao hơn so với TiSiSP<sub>2</sub> [12], thể hiện rằng HfSiSP<sub>2</sub> có độ ổn định về mặt năng lượng và độ bền liên kết nội phân tử cao.

Ngoài ra, hệ số đàn hồi  $C_{ij}$  cũng được tính toán để khẳng định độ ổn định cơ học của đơn lớp Janus HfSiSP<sub>2</sub>. Đối với các cấu trúc 2D, các hệ số đàn hồi cần tính toán là  $C_{11} = 150,4$  N/m,  $C_{12} = 44,67$  N/m và  $C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2 = 52,87$  N/m. Các hằng số này được ước tính từ sự thay đổi năng lượng của hệ dưới tác dụng của các biến dạng nhỏ trong khoảng từ  $-1,5\%$  đến  $+1,5\%$  với các bước  $0,5\%$  theo hai hướng trong mặt phẳng ( $x$  và  $y$ ). Hệ số đàn hồi  $C_{ij}$  của HfSiSP<sub>2</sub> tuân theo tiêu chuẩn của Born-Huang về điều kiện ổn định cơ học [23]. Do đó, đơn lớp 2D Janus HfSiSP<sub>2</sub> ổn định về mặt cơ học, điều này hứa hẹn cho việc tổng hợp thực nghiệm.

### 3.2. Tính chất điện tử

Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> được kiểm tra bằng cách sử dụng phương pháp PBE và phương pháp lai HSE06. Kết quả thu được được biểu diễn như trong Hình 3. Phương pháp PBE cho kết quả rằng, HfSiSP<sub>2</sub> là chất bán dẫn có vùng cấm xiên có  $E_g = 0,63$  eV với cực đại vùng hóa trị (VBM) tại điểm  $\Gamma$  và cực tiểu vùng dẫn (CBM) tại điểm M. Giá trị  $E_g$  này lớn hơn so với độ rộng vùng cấm của STiSiP<sub>2</sub> (0,50 eV) [12], nhưng nhỏ hơn của SMoSiP<sub>2</sub> (1,01 eV) [22]. So với kết quả PBE, hình dạng cấu trúc vùng của đơn lớp không thay đổi nhiều khi dùng phương pháp lai HSE06. Tuy nhiên, giá trị  $E_g$  tăng lên đáng kể (1,21 eV), lớn hơn so với STiSiP<sub>2</sub> (1,14 eV) [12], nhưng nhỏ hơn SMoSiP<sub>2</sub> (1,46 eV) [22].



**Hình 3.** Cấu trúc vùng năng lượng được tính bằng phương pháp PBE (a) và HSE06 (b) và thể tinh điện (c) của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub>.

$\Phi_P$  và  $\Phi_S$  lần lượt là công thoát điện tử ở mặt P và S

Bên cạnh đó, nhóm tác giả cũng tính toán thể tinh điện và công thoát  $\Phi$  của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub>. Đây là một trong những tính chất điện tử quan trọng cho thấy khả năng của electron thoát ra khỏi bề mặt vật liệu. Chúng phụ thuộc vào mức Fermi ( $E_F$ ) và mức chân không ( $E_{vac}$ ) thông qua công thức:

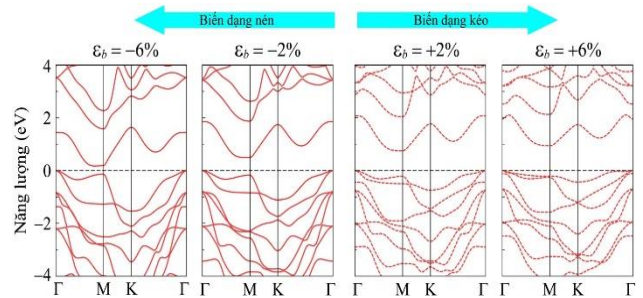
$$\Phi = E_{vac} - E_F \quad (2)$$

Sự tồn tại của một điện trường bên trong cấu trúc bất đối xứng của các đơn lớp Janus do sự khác nhau về độ âm điện của các nguyên tố thành phần gây ra sự chênh lệch mức chân không ở hai bề mặt vật liệu [24]. Do đó, sự hiệu chỉnh lưỡng cực đối với thể tinh điện cần được thêm vào đối với các cấu trúc bất đối xứng. Kết quả tính toán thu được chỉ ra rằng, mức Fermi  $E_F = -0,729$  eV và các mức chân không  $E_{vac}$  của S và P lần lượt là 0,512 eV và 0,516 eV, trong khi  $\Phi_S$  và  $\Phi_P$  được tính toán trên các mặt

S và P của lớp đơn HfSiSP<sub>2</sub> thay đổi từ 5,85 eV đến 5,89 eV, điều này có thể lý giải do độ âm điện của S (2,58) lớn hơn độ âm điện của P (2,19). Sự khác nhau ( $\Delta\Phi$ ) của hai bề mặt của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> khá nhỏ (0,039 eV), nhưng vẫn lớn hơn  $\Delta\Phi$  của TiSiSP<sub>2</sub> (0,022 eV) [12], điều này liên quan đến sự biến thiên nhỏ về độ âm điện của Si và các thành phần P ở các phía khác nhau của cấu trúc Janus.

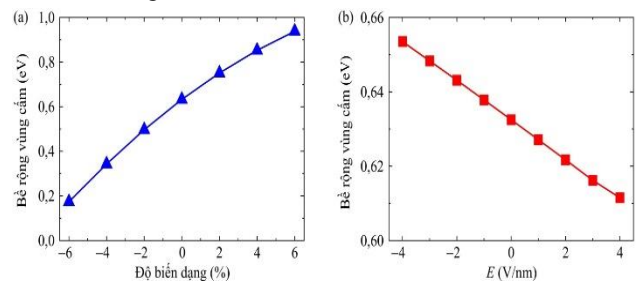
### 3.3. Ảnh hưởng của biến dạng và điện trường ngoài

Để nghiên cứu các tính chất của vật liệu cho các ứng dụng khác nhau, nhóm tác giả dùng phương pháp PBE để khảo sát cấu trúc điện tử khi chịu tác dụng của biến dạng cơ học và điện trường ngoài.



**Hình 4.** Cấu trúc vùng năng lượng của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> dưới ảnh hưởng của biến dạng

Ở đây, nhóm tác giả đánh giá tác động của biến dạng phẳng ( $\epsilon_b$ ) lên cấu trúc điện tử của vật liệu HfSiSP<sub>2</sub>. Biến dạng phẳng được định nghĩa  $\epsilon_b = (a - a_0)/a_0$ , trong đó  $a_0$  và  $a$  lần lượt là các hằng số mạng không bị biến dạng và bị biến dạng của cấu trúc Janus. Như được hiển thị trong Hình 4, cấu trúc vùng năng lượng của HfSiSP<sub>2</sub> bị thay đổi đáng kể khi biến dạng phẳng có độ lớn từ  $-6\%$  đến  $+6\%$  áp dụng vào đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub>. Ta nhận thấy, đơn lớp Janus HfSiSP<sub>2</sub> vẫn giữ bản chất là bán dẫn có vùng cấm xiên. Tuy nhiên,  $E_g$  bị thay đổi khi chịu tác dụng của biến dạng cơ học. Giá trị  $E_g$  giảm khi chịu biến dạng nén và tăng khi chịu biến dạng kéo. Điều này là do khoảng cách giữa các phân tử thay đổi. Sự biến đổi  $E_g$  của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> theo độ lớn của biến dạng được thể hiện ở Hình 5(a).



**Hình 5.** Sự phụ thuộc độ rộng vùng cấm vào biến dạng (a) và điện trường ngoài (b) của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub>

Các nghiên cứu trước đây [25-26] chỉ ra rằng, vùng cấm của monochalcogenide nhóm III và cấu trúc Janus của chúng phụ thuộc mạnh mẽ vào yếu tố bên ngoài. Việc áp dụng biến dạng có thể gây ra sự chuyển pha bán dẫn thẳng-xiên và ngược lại, hoặc sự chuyển pha bán dẫn-kim loại trong các đơn lớp. Tương tự, ảnh hưởng của điện trường ngoài  $E$  đến  $E_g$  của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> cũng được khảo sát và được thể hiện ở Hình 5(b). Tuy nhiên, nhóm tác giả chỉ xem xét với  $E$  có cường độ nằm trong khoảng từ 0 đến  $\pm 4$  V/nm (dấu âm và dấu dương tương ứng với điện trường

hướng theo chiều dương của trục  $z$  và ngược lại), gắn với giá trị (3 V/nm) được sử dụng trong các thí nghiệm gần đây trên các tấm 2D [27]. Từ Hình 5(b) có thể thấy, điện trường ngoài không ảnh hưởng nhiều đến  $E_g$ . Độ rộng vùng cấm thay đổi tuyến tính theo sự biến thiên của điện trường ngoài. Bề rộng vùng cấm thay đổi rất nhỏ (trung bình  $\Delta E_{g,th} = 0,005$  eV/nm), nó thay đổi từ 0,6052 đến 0,6587 eV khi điện trường ngoài biến thiên từ +4 đến -4 V/nm. Điều này có thể lí giải như sau. Khi đặt một điện trường vào vật liệu 2D, sự phân cực điện tích hiệu dụng trong vùng dẫn/hóa trị sẽ phản ứng với điện trường và có thể dẫn đến sự thay đổi năng lượng của electron trong vùng dẫn và vùng hóa trị.

### 3.4. Tính chất truyền dẫn

Cuối cùng, nhóm tác giả tính toán các đặc tính truyền dẫn của đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub>. Đây là một tham số rất quan trọng trong việc xác định các ứng dụng tiềm năng của vật liệu trong các thiết bị điện tử, đặc biệt là độ linh động của hạt tải  $\mu_{2D}$ . Phương pháp gần đúng thể biến dạng (DP) là một trong những phương pháp phổ biến nhất để tính toán độ linh động của hạt tải [21]. Độ linh động được kiểm tra bằng phương pháp DP theo phương trình sau [28]:

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

Trong đó,  $k_B$  và  $\hbar$  lần lượt là hằng số Boltzmann và hằng số Planck rút gọn;  $e$  là điện tích nguyên tố;  $T$  là nhiệt độ phòng (300 K); và  $C_{2D}$  là mô đun đàn hồi,  $E_d$  là hằng số thể biến dạng;  $m^*$  là khối lượng hiệu dụng của hạt tải, phụ thuộc vào cấu trúc vùng ở vùng lân cận các điểm cực trị, được xác định bằng cách khớp các giá trị theo hàm parabol bằng phương trình sau:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad (4)$$

Trong đó,  $E(k)$  biểu thị năng lượng phụ thuộc số sóng  $k$ . Và  $\bar{m} = \sqrt{m_x^* m_y^*}$  là khối lượng hiệu dụng trung bình.

Từ phương trình (4), bằng cách sử dụng  $m^*$ ,  $E_d$  và  $C_{2D}$  được tính toán, có thể ước tính  $\mu_x$  và  $\mu_y$  lần lượt theo các hướng truyền tải  $x$  và  $y$ . Kết quả tính toán cho thấy, HfSiSP<sub>2</sub> thể hiện độ linh động điện tử cao theo hướng  $x$  với  $m_x^* = 1,73m_0$  là  $\mu_x = 39,41$  cm<sup>2</sup>/Vs, trong khi theo hướng  $y$  với  $m_y^* = 4,99m_0$  là  $\mu_y = 23,79$  cm<sup>2</sup>/Vs. Các giá trị này thấp hơn so với đơn lớp TiSiSP<sub>2</sub> (với  $m_x^* = m_y^* = 1,59m_0$  là  $\mu_x = 204,15$  cm<sup>2</sup>/Vs và  $\mu_y = 237,85$  cm<sup>2</sup>/Vs) [12]. Do đó, độ linh động hạt tải của vật liệu được nghiên cứu là bất đẳng hướng đối với electron theo các hướng truyền dẫn  $x$  và  $y$ .

Độ linh động lỗ trống trong HfSiSP<sub>2</sub> với  $m_x^* = -1,28m_0$  là  $\mu_x = -48,19$  cm<sup>2</sup>/Vs và  $m_y^* = -1,34m_0$  là  $\mu_y = -45,97$  cm<sup>2</sup>/Vs. Các giá trị này thấp hơn so với TiSiSP<sub>2</sub> (với  $m_x^* = m_y^* = -1,51m_0$  là  $\mu_x = -9,78,15$  cm<sup>2</sup>/Vs và  $\mu_y = -9,61$  cm<sup>2</sup>/Vs) [12]. Như vậy, độ linh động lỗ trống trong HfSiSP<sub>2</sub> cũng bất đẳng hướng theo hai hướng truyền dẫn. Độ linh động của điện tử trong cấu trúc HfSiSP<sub>2</sub> theo hướng  $x$  cao hơn nhiều so với theo hướng  $y$ , trong khi độ linh động của lỗ trống thì ngược lại. Điều này phù hợp với kết quả khối lượng hiệu dụng, với  $m_x^*$  thấp hơn so với  $m_y^*$  đối với electron. Kết quả còn cho thấy, có sự chênh lệch rất lớn về độ linh động giữa

lỗ trống và electron. Độ linh động của lỗ trống nhỏ hơn nhiều so với độ linh động của electron vì khối lượng hiệu dụng của lỗ trống nặng hơn nhiều so với khối lượng hiệu dụng của electron. Điều này có lợi cho các ứng dụng trong thiết bị điện tử của những vật liệu này.

## 4. Kết luận

Nhóm tác giả đã nghiên cứu các tính chất điện tử của đơn lớp Janus HfSiSP<sub>2</sub> dựa trên phương pháp lí thuyết phiếm hàm mật độ. Kết quả nghiên cứu của nhóm tác giả cho thấy rằng đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> có độ ổn định cấu trúc cao và có thể tồn tại trong thực tế. Các tính toán đã chỉ ra rằng, đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> là bán dẫn, sở hữu vùng cấm xiên với độ rộng vùng cấm  $E_g$  là 0,63 eV theo PBE và 1,21 eV theo HSE06. Giá trị  $E_g$  thay đổi khi đơn lớp chịu tác dụng của biến dạng cơ học và điện trường ngoài. Ảnh hưởng của biến dạng phẳng đến các đặc tính điện tử lớn hơn đáng kể so với ảnh hưởng của điện trường ngoài. Ngoài ra, độ linh động của hạt tải trong đơn lớp HfSiSP<sub>2</sub> có tính chất bất đẳng hướng. Điều này cho thấy tiềm năng của vật liệu này trong các ứng dụng thiết bị linh kiện điện tử.

**Lời cảm ơn:** Nghiên cứu này được tài trợ bởi Bộ Giáo dục và Đào tạo trong đề tài mã số B2023.DNA.23.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] G. R. Bhimanapati, *et al.*, "Recent advances in two-dimensional materials beyond graphene", *ACS Nano*, vol. 9, no. 2, pp.11509-11539, 2015. <https://doi.org/10.1021/acsnano.5b05556>.
- [2] M. Dragoman, A. Dinescu, and D. Dragoman, "2D materials nanoelectronics: new concepts, fabrication, characterization from microwaves up to optical spectrum", *Physica status solidi (a)*, vol. 216, no. 8, p. 1800724, 2019. <https://doi.org/10.1002/pssa.201800724>.
- [3] Z. Liu, H. Wang, J. Sun, R. Sun, Z. F. Wang, and J. Yang, "Penta-Pt<sub>2</sub>N<sub>4</sub>: an ideal two-dimensional material for nanoelectronics", *Nanoscale*, vol. 10, no. 34, pp. 16169-16177, 2018. <https://doi.org/10.1039/C8NR05561K>.
- [4] T. Tan, X. Jiang, C. Wang, B. Yao, and H. Zhang, "2D material optoelectronics for information functional device applications: status and challenges", *Advanced Science*, vol. 7, no. 11, p. 2000058, 2020. <https://doi.org/10.1002/adv.202000058>.
- [5] M. Zhao, *et al.*, "Advances in two-dimensional materials for optoelectronics applications", *Crystals*, vol. 12, no. 8, p. 1087, 2022. <https://doi.org/10.3390/cryst12081087>.
- [6] F. R. Fan, R. Wang, H. Zhang, and W. Wu, "Emerging beyond-graphene elemental 2D materials for energy and catalysis applications", *Chemical Society Reviews*, vol. 50, no. 19, pp. 10983-11031, 2021. <https://doi.org/10.1039/C9CS00821G>.
- [7] Y. Zhu, L. Peng, Z. Fang, C. Yan, X. Zhang, and G. Yu, "Structural engineering of 2D nanomaterials for energy storage and catalysis", *Advanced materials*, vol. 30, no. 15, p. 1706347, 2018. <https://doi.org/10.1002/adma.201706347>.
- [8] D. Tyagi, *et al.*, "Recent advances in two-dimensional-material-based sensing technology toward health and environmental monitoring applications", *Nanoscale*, vol. 12, no. 6, pp. 3535-3559, 2020. <https://doi.org/10.1039/C9NR10178K>.
- [9] Y. Cui, L. Peng, L. Sun, Q. Qian, and Y. Huang, "Two-dimensional few-layer group-III metal monochalcogenides as effective photocatalysts for overall water splitting in the visible range", *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 6, no. 45, pp. 22768-77, 2018. <https://doi.org/10.1039/C8TA08103D>.
- [10] C. Barreteau, B. Michon, C. Besnard, and E. Giannini, "High-pressure melt growth and transport properties of SiP, SiAs, GeP, and GeAs 2D layered semiconductors", *Journal of Crystal Growth*, vol. 443, pp. 75-80, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.03.019>.

- [11] N. T. Hiep, N. P. Q. Anh, H. V. Phuc, N. Q. Cuong, N. N. Hieu, and V. T. T. Vi, "Two-dimensional Janus MGeSiP<sub>4</sub> (M = Ti, Zr, and Hf) with an indirect band gap and high carrier mobilities: first-principles calculations", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 25, p. 8779, 2023. <https://doi.org/10.1039/D3CP00188A>.
- [12] Z. Gao, X. He, W. Li, Y. He, and K. Xiong, "First principles prediction of two-dimensional Janus STiXY<sub>2</sub> (X = Si, Ge; Y = N, P, As) materials", *Dalton Trans.*, vol. 52, pp. 8322-8331, 2023. <https://doi.org/10.1039/D3DT00813D>.
- [13] Z. Gao, Y. He, and K. Xiong Gao, "Strain and electric field induced electronic property modifications in two-dimensional Janus SZrAZ<sub>2</sub> (A = Si, Ge; Z = P, As) monolayers", *Dalton Transactions*, vol. 52, no. 43, pp. 15918-15927, 2023. <https://doi.org/10.1039/D3DT02904B>.
- [14] G. Kresse and J. Furthmüller, "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set", *Physical review B*, vol. 54, no. 16, pp. 11169-11186, 1996. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>.
- [15] G. Kresse and J. Furthmüller, "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set", *Computational materials science*, vol. 6, no. 1, pp. 15-50, 1996. [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0).
- [16] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple", *Physical review letters*, vol. 77, no. 18, pp. 3865, 1996. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.
- [17] J. Heyd and G. E. Scuseria, "Efficient hybrid density functional calculations in solids: Assessment of the Heyd-Scuseria-Ernzerhof screened Coulomb hybrid functional", *J. Chem. Phys.*, vol. 121, no. 3, pp. 1187-1192, 2004. <https://doi.org/10.1063/1.1760074>.
- [18] S. Grimme, "Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction", *J Comput Chem.*, vol. 27, no. 15, pp. 1787-99, 2006. <https://doi.org/10.1002/jcc.20495>.
- [19] A. Togo, L. Chaput, and I. Tanaka, "Distributions of phonon lifetimes in Brillouin zones", *Physical review B*, vol. 91, no. 9, pp. 094306, 2015. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.094306>.
- [20] L. Bengtsson, "Dipole correction for surface supercell calculations", *Phys. Rev. B.*, vol. 59, no. 19, p. 12301, 1999. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.12301>.
- [21] J. Bardeen and W. Shockley, "Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals", *Phys. Rev.*, vol. 80, no. 1, p. 72 1950. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.80.72>.
- [22] N. T. Hiep, *et al.*, "Structural, electronic, and transport properties of Janus XMoSiP<sub>2</sub> (X = S, Se, Te) monolayers: a first-principles study", *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 56, no. 38, p. 385306, 2023. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/acd707>.
- [23] N. T. Hung, A. R. T. Nugraha, and R. Saito, "Two-dimensional MoS<sub>2</sub> electromechanical actuators", *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 51, no. 7, p. 075306, 2018. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aaa68f>.
- [24] C. F. Fu, J. Sun, Q. Luo, X. Li, W. Hu, and J. Yang, "Intrinsic electric fields in two-dimensional materials boost the solar-to-hydrogen efficiency for photocatalytic water splitting", *Nano letters*, vol. 18, no. 10, pp. 6312-6317, 2018. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b02561>.
- [25] C. Ke, *et al.*, "Tuning the electronic, optical, and magnetic properties of monolayer GaSe with a vertical electric field", *Physical Review Applied*, vol. 9, no. 4, p. 044029, 2018. <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.9.044029>.
- [26] C. Ke, *et al.*, "Modification of the electronic and spintronic properties of monolayer GaGeTe with a vertical electric field", *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 52, no. 11, p. 115101, 2019. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aa9aa9>.
- [27] C. Vicario, B. Monoszlai, and C. P. Hauri, "GV/m single-cycle terahertz fields from a laser-driven large-size partitioned organic crystal", *Phys. review letters*, vol. 112, no. 21, p. 213901, 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.213901>.
- [28] W. Wan, S. Zhao, Y. Ge, and Y. Liu, "Phonon and electron transport in Janus monolayers based on InSe", *J. of Physics: Condensed Matter*, vol. 31, no. 43, p. 435501, 2019. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab2e7d>.