TRƯỜNG ĐẠI HỌC SÀI GÒN
**TẠP CHÍ KHOA HỌC**
**ĐẠI HỌC SÀI GÒN**
ISSN 1859 - 3208
Số 87, Tập 1, 2023

SAIGON UNIVERSITY
**SCIENTIFIC JOURNAL**
**OF SAIGON UNIVERSITY**
No. 87, Vol. 1, 2023

*Email: tcdhsg@sgu.edu.vn ; Website: http://sj.sgu.edu.vn/*

# TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ VÀ ĐỘ LINH ĐỘNG CỦA HẠT TẢI TRONG VẬT LIỆU HAI CHIỀU ĐƠN LỚP $HfSiSeP_2$

## *Electronic properties and carrier mobility of two-dimensional Janus $HfSiSeP_2$ monolayer*

Võ Thị Tuyết Vi[(1)], Nguyễn Quang Cường[(2)],
Nguyễn Ngọc Hiếu[(2)], Đặng Xuân Dự[(3)], Lê Công Nhân[(3)(*)]

[(1)]Trường Đại học Y – Dược, Đại học Huế
[(2)]Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao
[(3)]Trường Đại học Sài Gòn

**TÓM TẮT**

Trong bài báo này, các đặc trưng cấu trúc, tính chất điện tử và truyền dẫn của đơn lớp Janus hai chiều $HfSiSeP_2$ bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Các tính toán về phổ dao động và mô phỏng động học phân tử đã khẳng định đơn lớp $HfSiSeP_2$ có độ ổn định động học và độ bền nhiệt học cao. Kết quả tính toán của chúng tôi đã chỉ ra rằng $HfSiSeP_2$ là vật liệu bán dẫn có vùng cấm xiên với độ rộng vùng cấm là 0,58 eV. Bên cạnh đó, chúng tôi cũng xem xét ảnh hưởng của biến dạng cơ học lên tính chất điện tử của vật liệu. Biến dạng không chỉ làm thay đổi độ rộng vùng cấm mà còn gây ra sự chuyển pha bán dẫn – kim loại trong vật liệu $HfSiSeP_2$. Ngoài ra, các kết quả tính toán cũng chỉ ra rằng điện tử trong Janus $HfSiSeP_2$ có độ linh động rất cao, vượt quá $2\times10^3$ $cm^2V^{-1}s^{-1}$, và phù hợp cho các ứng dụng trong các thiết bị điện tử nano.

***Từ khoá:*** *vật liệu Janus hai chiều, tính chất điện tử, độ linh động hạt tải, lý thuyết phiếm hàm mật độ.*

**ABSTRACT**

In this paper, the structural, electronic, and transport properties of two-dimensional Janus $HfSiSeP_2$ monolayer are examined by the density functional theory. The analysis of the phonon spectra and *ab-initio* molecular dynamics simulations confirms that Janus $HfSiSeP_2$ monolayer is highly dynamic and thermally stable. The obtained results show that $HfSiSeP_2$ exhibits indirect semiconducting characteristics with a band gap of 0.58 eV. Besides, we also consider the effect of mechanical strain on the electronic properties of the examined material. The applied strain not only changes the band gap but also causes a semiconductor – metal phase transition in $HfSiSeP_2$. In addition, our calculated results also indicate that Janus $HfSiSeP_2$ has superior electron mobility, exceeding $2\times10^3$ $cm^2V^{-1}s^{-1}$, which is suitable for applications in nanoelectronic devices.

***Keywords****: two-dimensional Janus material, electronic properties, carrier mobility, density functional theory.*

[(*)]Tác giả liên hệ: lcnhan@sgu.edu.vn

## 1. Giới thiệu

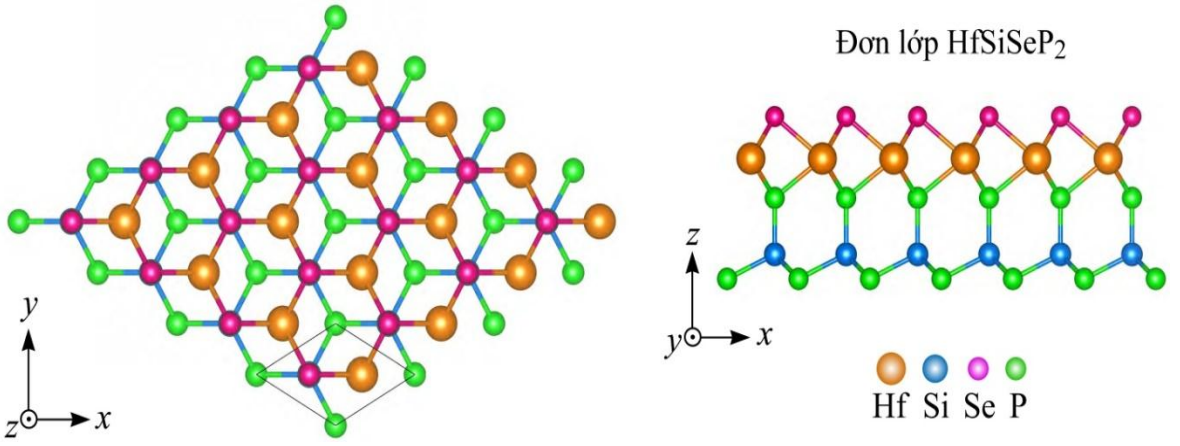
Kể từ khi graphene được bóc tách thành công vào năm 2004 [1], vật liệu hai chiều (2D) đã trở thành tâm điểm nghiên cứu trong suốt thời gian qua nhờ vào các tính chất vật lý và hoá học tuyệt vời của chúng. Chính vì vậy, vật liệu 2D đã được ứng dụng trong nhiều lĩnh vực khác nhau như điện tử, quang điện tử, xúc tác quang phân tách nước [2–4]. Một bước tiến mới trong việc mở rộng vật liệu 2D là sự tổng hợp thực nghiệm thành công đơn lớp Janus MoSSe vào năm 2017 [5, 6]. Cấu trúc đối xứng theo phương thẳng đứng bị phá vỡ trong vật liệu Janus đã làm xuất hiện nhiều đặc tính hấp dẫn so với cấu trúc nguyên thuỷ, do đó khả năng ứng dụng của vật liệu Janus rất phong phú. Sự khám phá ra đơn lớp MoSSe đã thu hút sự quan tâm đặc biệt của cộng đồng khoa học đối với các cấu trúc bất đối xứng Janus [7, 8].

Cùng với sự phát triển liên tục của vật liệu 2D, trong một nghiên cứu gần đây của Hong và cộng sự [9], lần đầu tiên đơn lớp $MoSi_2N_4$ được chế tạo thành công bằng thực nghiệm. Hệ 2D mới này có cấu trúc bảy lớp nguyên tử và nó là một chất bán dẫn có độ bền đáng kể cũng như độ linh động của hạt tải cao [9]. Thành tựu mới nhất này mở đường cho việc khám phá một họ các tấm nano $MA_2Z_4$, trong đó M là kim loại chuyển tiếp, A là Si hoặc Ge và Z có thể là N, P hoặc As [10]. Cấu trúc xếp lớp độc đáo của chúng với khả năng thay đổi thành phần của các lớp khác nhau tạo ra nhiều cơ hội để đạt được các đặc tính đa dạng [10].

Sau khi khám phá ra họ vật liệu 2D $MA_2Z_4$ có cấu trúc bảy lớp nguyên tử, các nhà khoa học đã nỗ lực tạo ra cấu trúc Janus dựa trên họ vật liệu $MA_2Z_4$ này, chẳng hạn như $XMoSiN_2$ (X = S, Se, Te) [11]. Bằng cách loại bỏ hai lớp nguyên tử Si và N cùng một phía và thay thế lớp nguyên tử N ở phía đó bằng một lớp nguyên tử X, Sibatov và các cộng sự đã tạo ra được cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng (được gọi là cấu trúc Janus) $XMoSiN_2$ với nhiều tính chất vật lý đặc biệt [11]. Tiếp nối các thành công này, chúng tôi sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ để nghiên cứu một cách hệ thống các đặc trưng về cấu trúc tinh thể, các tính chất điện tử và tính chất truyền dẫn của đơn lớp Janus 2D $HfSiSeP_2$.

## 2. Phương pháp tính toán

Trong bài báo này, chúng tôi đã sử dụng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) dựa trên gói phần mềm mô phỏng Vienna ab initio simulation package (VASP) [12, 13] để khảo sát các đặc trưng về cấu trúc tinh thể và tính chất điện tử của đơn lớp $HfSiSeP_2$. Gần đúng gradient suy rộng (GGA) với phiếm hàm PBE (Perdew, Burke và Ernzerhof) [14] được dùng để khảo sát tương tác trao đổi tương quan. Tương tác van der Waals (vdW) giữa các lớp được nghiên cứu bởi phương pháp phiếm hàm mật độ cải tiến DFT-D2 của Grimme [15]. Năng lượng ngưỡng trong phương pháp sóng phẳng là 500 eV và lưới ($15 \times 15 \times 15$) *k*-mesh được dùng cho vùng Brillouin bằng phương pháp chia lưới Monkhorst-Pack. Ngưỡng hội tụ về năng lượng và lực lần lượt là $10^{-6}$ eV và $10^{-3}$ eV/A. Một khoảng chân không 20 Å dọc theo trục z đã được tạo ra để loại bỏ tương tác giữa các lớp lân cận. Phổ phonon của đơn lớp được khảo sát thông qua gói mô phỏng PHONOPY [16] với siêu ô ($4 \times 4 \times 1$). Chúng tôi sử dụng phương pháp thế biến dạng [17] để nghiên cứu độ linh động của hạt tải với các tham số truyền dẫn được tính toán bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ.



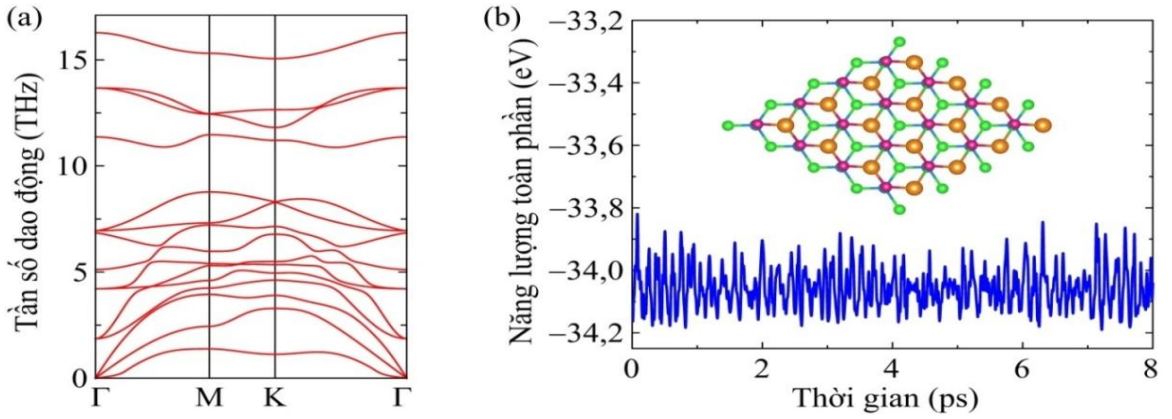

**Hình 1:** Cấu trúc tinh thể của đơn lớp $HfSiSeP_2$ theo các góc nhìn khác nhau

## 3. Kết quả và thảo luận

### *3.1. Cấu trúc tinh thể*

Hình 1 trình bày cấu trúc tinh thể đã được tối ưu hoá của đơn lớp 2D Janus $HfSiSeP_2$. Cấu trúc tinh thể của đơn lớp Janus $HfSiSeP_2$ có tính bất đối xứng và gồm năm lớp nguyên tử được xếp theo thứ tự P-Si-P-Hf-Se. Janus $HfSiSeP_2$ thu được bằng cách loại bỏ lớp SiP ra khỏi một bên của đơn lớp $HfSi_2P_4$ và thay thế lớp nguyên tử P còn lại ở cùng bề mặt đó bằng lớp nguyên tử Se. Ở trạng thái cân bằng, hằng số mạng và bề dày của đơn lớp Janus $HfSiSeP_2$ lần lượt là 3,61 Å là 6,37 Å. Chúng tôi thấy rằng kết quả hằng số mạng của Janus $HfSiSeP_2$ bằng với hằng số mạng của đơn lớp $HfSi_2P_4$ (3,61 Å) [10].

Chúng tôi đánh giá độ ổn định động học và nhiệt học của đơn lớp 2D Janus $HfSiSeP_2$ bằng cách khảo sát phổ phonon dựa trên lý thuyết phần tử hữu hạn thông qua gói mô phỏng PHONOPY [16] và mô phỏng động học phân tử (AIMD). Đơn lớp $HfSiSeP_2$ có 5 nguyên tử trong ô đơn vị nên phổ phonon của nó chứa 15 nhánh dao động, bao gồm 03 nhánh âm học và 12 nhánh quang học. Từ Hình 2(a), chúng ta thấy rằng trong toàn miền Brillouin không có bất kỳ nhánh dao động nào có tần số dao động âm. Điều này chứng minh rằng Janus $HfSiSeP_2$ có độ ổn định động học cao và có khả năng tồn tại trong thực tế. Bên cạnh đó, chúng tôi cũng kiểm tra độ ổn định nhiệt của Janus $HfSiSeP_2$ bằng mô phỏng động học phân tử (AIMD) ở nhiệt độ phòng trong thời gian 8 ps với mỗi bước là 1 fs. Sự phụ thuộc vào thời gian của năng lượng toàn phần của hệ Janus bằng mô phỏng AIMD được biểu diễn ở Hình 2(b). Kết quả thu được cho thấy năng lượng của đơn lớp $HfSiSeP_2$ thăng giáng trong khoảng 0,5 eV trong suốt thời gian mô phỏng. Ngoài ra, không có sự biến dạng đáng kể, không có sự phá vỡ liên kết cũng như không có sự chuyển pha trong cấu trúc $HfSiSeP_2$ sau thời gian 8 ps. Điều này chứng tỏ đơn lớp Janus $HfSiSeP_2$ ổn định nhiệt ở nhiệt độ phòng.

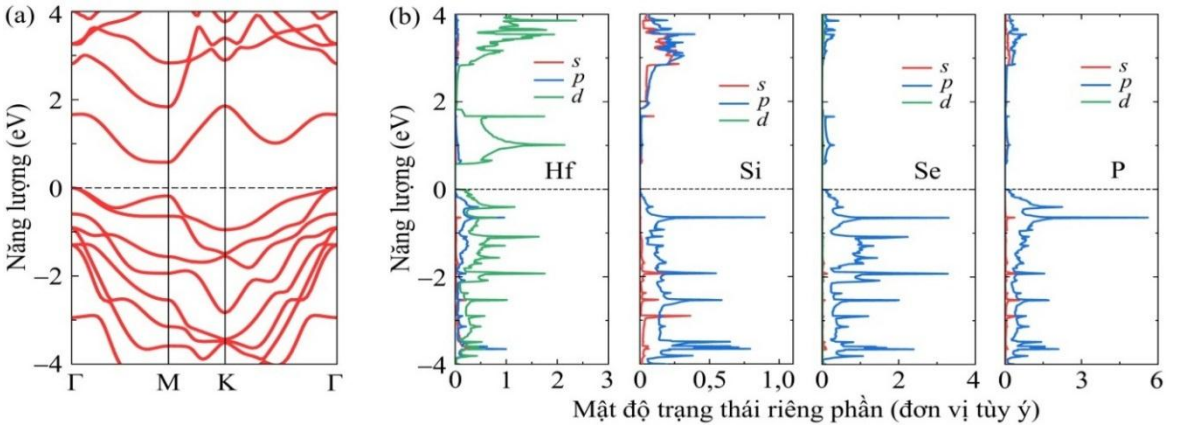



**Hình 2:** Phổ phonon (a) và sự thăng giáng năng lượng toàn phần của đơn lớp $HfSiSeP_2$ sau 8 ps ở nhiệt độ phòng (300 K) theo các tính toán bằng phương pháp động học phân tử. Hình chèn ở trong (b) là cấu trúc tinh thể $HfSiSeP_2$ ở cuối quá trình mô phỏng động học phân tử

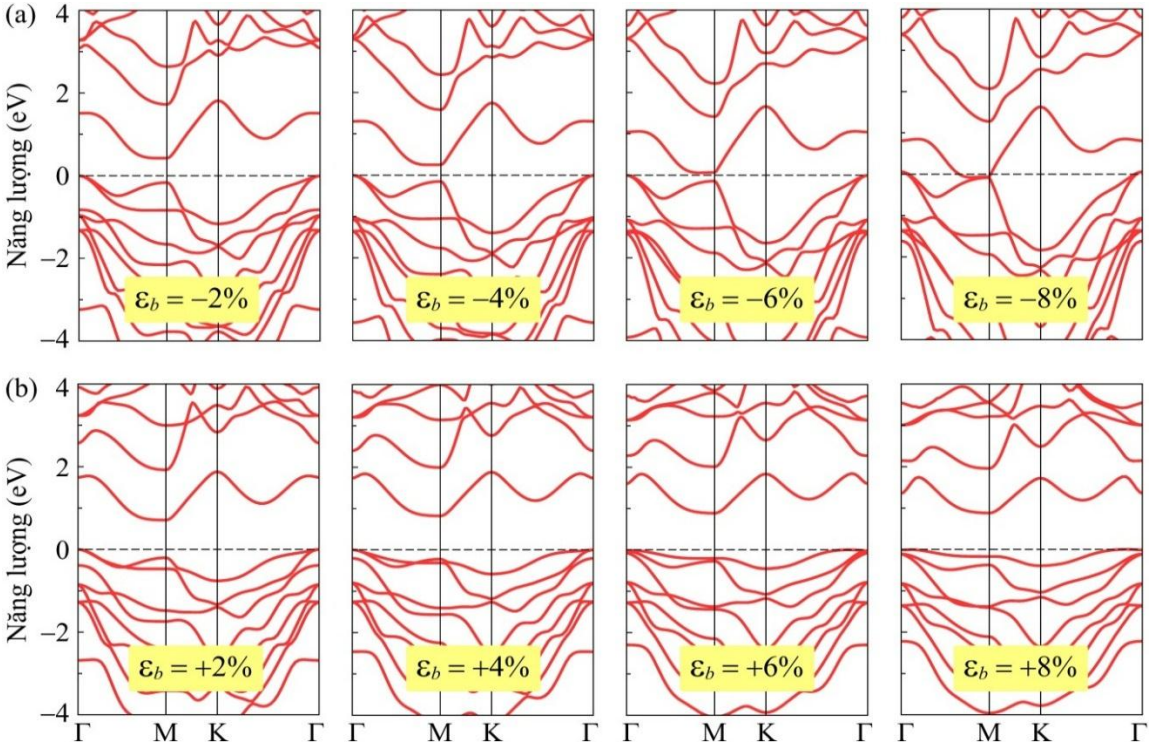
### *3.2. Tính chất điện tử ở trạng thái cân bằng và dưới ảnh hưởng của biến dạng*

Trong phần này, chúng tôi khảo sát các tính chất điện tử của đơn lớp 2D Janus $HfSiSeP_2$ bằng cách sử dụng phiếm hàm trao đổi tương quan PBE. Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của $HfSiSeP_2$ được thể hiện ở Hình 3(a). Chúng ta thấy rằng đơn lớp $HfSiSeP_2$ có cực tiểu vùng dẫn (CBM) nằm ở điểm M và cực đại vùng hoá trị (VBM) nằm ở điểm Γ trong miền Brillouin. Điều đó chứng tỏ rằng Janus $HfSiSeP_2$ là chất bán dẫn có vùng cấm xiên. Kết quả tính toán của chúng tôi chỉ ra rằng Janus $HfSiSeP_2$ có độ rộng vùng cấm là 0,58 eV. Trong khi đó, nghiên cứu trước đây đã chứng minh rằng đơn lớp 2D $HfSi_2P_4$ là kim loại [10]. Như vậy, cấu trúc bất đối xứng Janus được tạo ra có những đặc trưng điện tử cơ bản khác với vật liệu đối xứng tương ứng của nó. Ngoài ra, để đánh giá sự đóng góp của các obitan nguyên tử vào việc hình thành cấu trúc vùng năng lượng điện tử, chúng tôi tiến hành tính toán mật độ trạng thái điện tử riêng phần (PDOS). Hình 2(b) biểu diễn PDOS của đơn lớp Janus $HfSiSeP_2$. Có thể thấy rõ rằng vùng dẫn của $HfSiSeP_2$ được tạo thành bởi sự đóng góp chính của obitan *d* của nguyên tử Hf. Trong khi đó, các obitan *d*-Hf, *p*-Se và *p*-P đóng góp vào sự hình thành vùng hoá trị, trong đó obitan *p* của nguyên tử P có vai trò ưu thế hơn cả so với các obitan còn lại.

Các tính chất điện tử của vật liệu 2D phụ thuộc rất lớn vào sự biến đổi cấu trúc nguyên tử của nó. Một sự thay đổi nhỏ trong cấu trúc nguyên tử cũng có thể làm xuất hiện nhiều đặc tính điện tử mới. Chính vì vậy, biến dạng cơ học thường được sử dụng như là một phương pháp phổ biến để điều chỉnh các thuộc tính điện tử của vật liệu 2D [18, 19]. Trong bài báo này, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của biến dạng phẳng $\varepsilon_b$ (biến dạng đồng thời dọc theo hai trục *x* và *y*) lên các tính chất điện tử của $HfSiSeP_2$. Độ biến dạng $\varepsilon_b$ được định nghĩa là $\varepsilon_b = (a - a_0)/a_0$, trong đó $a_0$ là hằng số mạng ở trạng thái cân bằng và *a* là hằng số mạng của vật liệu khi đã bị biến dạng. Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu sự biến đổi của các tính chất điện tử dưới tác dụng của biến dạng phẳng có giá trị biến thiên từ –6% đến 6%, trong đó dấu "–" ứng với biến dạng nén và dấu "+" ứng với biến dạng kéo.



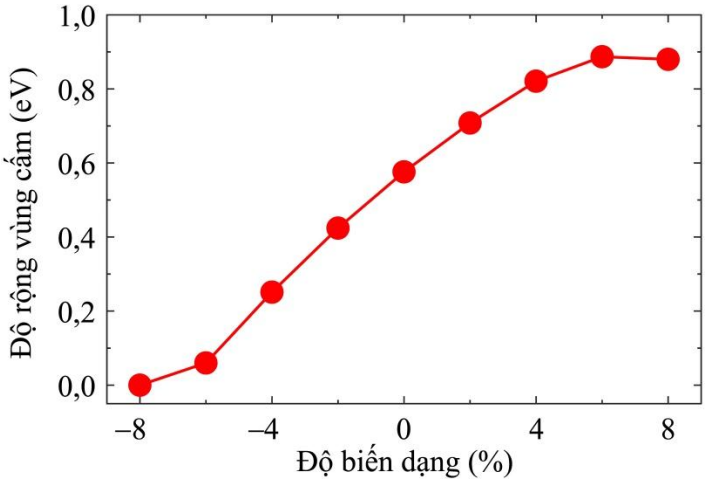

**Hình 3:** (a) Cấu trúc vùng năng lượng điện tử và (b) mật độ trạng thái riêng phần của đơn lớp $HfSiSeP_2$. Mức Fermi được thiết lập tại giá trị 0 eV




**Hình 4:** Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp $HfSiSeP_2$ khi bị biến dạng nén (a) và biến dạng kéo (b)

Ảnh hưởng của biến dạng phẳng lên cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp Janus $HfSiSeP_2$ được biểu diễn ở Hình 4. Chúng ta thấy rằng cấu trúc vùng năng lượng của $HfSiSeP_2$ bị tác động lớn khi có mặt biến dạng. Dưới ảnh hưởng của biến dạng nén, các vị trí của CBM và VBM không bị thay đổi trong miền Brillouin, tuy nhiên, các mức năng lượng vùng dẫn tiến gần về phía mức Fermi làm cho độ rộng vùng cấm của $HfSiSeP_2$ giảm dần. Ở giá trị biến dạng nén –8% đã xảy ra sự chuyển pha

từ bán dẫn sang kim loại trong đơn lớp $HfSiSeP_2$. Khi tác dụng biến dạng kéo lên $HfSiSeP_2$, cấu trúc vùng năng lượng cũng có sự thay đổi rõ rệt. Biến dạng kéo đã làm dịch chuyển vị trí của VBM. Cụ thể, lúc biến dạng đạt giá trị +6%, vị trí của VBM đã di chuyển từ điểm Γ sang điểm nằm trên đường KΓ. Biến dạng kéo cũng làm thay đổi giá trị năng lượng vùng cấm của đơn lớp $HfSiSeP_2$. Sự biến đổi của độ rộng vùng cấm dưới tác dụng của biến dạng phẳng được thể hiện rõ ở Hình 5. Như vậy, các đặc tính điện tử của đơn lớp Janus $HfSiSeP_2$ đã bị thay đổi khi có mặt biến dạng. Biến dạng không chỉ làm thay đổi vị trí của VBM, điều chỉnh độ rộng vùng cấm của $HfSiSeP_2$ mà còn gây ra sự chuyển pha từ bán dẫn sang kim loại. Điều này cho thấy khả năng ứng dụng trong các thiết bị cơ điện tử của đơn lớp Janus $HfSiSeP_2$.




**Hình 5:** Sự phụ thuộc của độ rộng vùng cấm vào độ biến dạng của đơn lớp $HfSiSeP_2$

### *3.3. Độ linh động của hạt tải*

Một trong những đặc trưng truyền dẫn quan trọng của vật liệu là độ linh động của hạt tải vì nó quyết định khả năng ứng dụng của vật liệu đó vào các thiết bị điện tử. Chúng tôi sử dụng phương pháp thế biến dạng để tính toán độ linh động của hạt tải trong đơn lớp $HfSiSeP_2$ dựa vào biểu thức [17]:

$$\mu_{2D} = \frac{e\hbar^3 C_{2D}}{k_B T m^* \bar{m} E_d^2}, \quad (1)$$

trong đó $e$, $\hbar$ và $k_B$ lần lượt là điện tích của điện tử, hằng số Planck rút gọn và hằng số Boltzmann; $C_{2D}$ và $E_d$ là mô đun đàn hồi và hằng số thế biến dạng; $m^*$ 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 bằng 300 K (nhiệt độ phòng) trong tính toán ở phần này.

Khối lượng hiệu dụng của hạt tải đóng vai trò quan trọng trong việc xác định độ linh động của hạt tải, vì khối lượng hiệu dụng càng nhỏ thì khả năng đáp ứng với trường ngoài càng nhanh nên độ linh động càng lớn. Bằng cách khớp các giá trị năng lượng xung quanh CBM và VBM theo hàm parabol ở biểu thức (2), chúng ta thu được độ linh động của electron và lỗ trống tương ứng:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2}\right|, \quad (2)$$

với $E(k)$ là năng lượng phụ thuộc vectơ sóng $k$. Khối lượng hiệu dụng của hạt tải trong đơn lớp $HfSiSeP_2$ được liệt kê ở Bảng

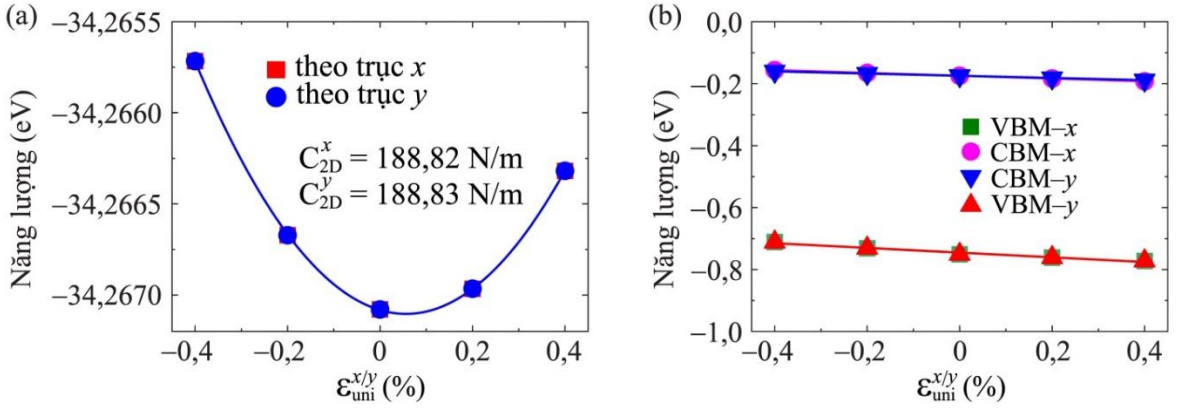
1. Chúng ta thấy rằng khối lượng hiệu dụng của electron và lỗ trống đều thể hiện tính bất đẳng hướng theo hai hướng truyền dẫn *x* và *y*. Đồng thời, khối lượng hiệu dụng của electron theo hướng *y* nhỏ hơn của lỗ trống theo hướng đó, chứng tỏ rằng electron phản ứng với trường ngoài nhanh hơn nên độ linh động của nó sẽ lớn hơn so với lỗ trống.

Mô đun đàn hồi và hằng số thế biến dạng được tính toán thông qua các biểu thức sau:

$$C_{2D} = \frac{1}{S_0}\frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_{uni}^2}, \quad (3)$$

$$E_d = \frac{\Delta E}{\varepsilon_{uni}}, \quad (4)$$

trong đó *E* là năng lượng toàn phần của hệ, $S_0$ là diện tích ô đơn vị, $\varepsilon_{uni}$ là độ biến dạng dọc theo các hướng truyền dẫn *x* và *y*; *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*. Sự phụ thuộc của năng lượng toàn phần của $HfSiSeP_2$ theo độ biến dạng trục được trình bày ở Hình 6(a). Hằng số thế biến dạng đàn hồi được xác định bằng cách khớp các giá trị năng lượng phụ thuộc biến dạng của CBM và VBM theo hàm tuyến tính như Hình 6(b). Bảng 1 liệt kê các giá trị thu được của các tham số truyền dẫn của đơn lớp $HfSiSeP_2$. Từ Bảng 1 chúng ta thấy rằng mô đun đàn hồi của electron và lỗ trống theo hai hướng *x* và *y* là như nhau. Ngoài ra, hằng số thế biến dạng của electron theo hướng *x* lớn hơn theo hướng *y*, trong khi đó $E_d$ của lỗ trống có giá trị đẳng hướng dọc theo hai hướng truyền dẫn.




**Hình 6:** Sự thay đổi năng lượng toàn phần (a) và năng lượng tại cực tiểu vùng dẫn (CBM) và cực đại vùng hóa trị (VBM) theo các biến dạng trục dọc theo trục *x* và *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 thế biến dạng $E_d$ (eV) và độ linh động hạt tải $\mu$ ($cm^2V^{-1}s^{-1}$) dọc theo hướng *x(y)* của $HfSiSeP_2$. $m_0$ là khối lượng điện tử tự do

| | $m_x^*$ | $m_y^*$ | $C_{2D}^x$ | $C_{2D}^y$ | $E_d^x$ | $E_d^y$ | $\mu_x$ | $\mu_y$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Electron | 2,28 | 0,21 | 188,82 | 188,83 | –4,52 | –3,55 | 125,16 | 2193,32 |
| Lỗ trống | 0,88 | 1,15 | 188,82 | 188,83 | –7,60 | –7,60 | 78,55 | 60,11 |

Kết quả tính toán của chúng tôi cho thấy rằng độ linh động của hạt tải trong đơn lớp Janus $HfSiSeP_2$ có tính bất đẳng hướng theo hai hướng truyền dẫn *x* và *y*. Đồng thời, độ linh động của electron lớn hơn độ linh động của lỗ trống cả theo hai hướng. Electron trong $HfSiSeP_2$ có độ linh động rất cao, với giá trị là 125,16 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ theo hướng *x* và 2193,32 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ theo hướng *y*. Chúng ta biết rằng đơn lớp $MoS_2$ là vật liệu được ứng dụng rộng rãi trong các thiết vị điện tử với độ linh động là 200 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ [20]. Như vậy, độ linh động của electron theo hướng *y* trong $HfSiSeP_2$ lớn hơn rất nhiều lần so với $MoS_2$.

**4. Kết luận**

Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ để nghiên cứu là Janus $HfSiSeP_2$ có tiềm năng rất lớn trong các ứng dụng điện tử, quang điện tử, cấu trúc, các tính chất điện tử và truyền dẫn của đơn lớp Janus hai chiều $HfSiSeP_2$. Đơn lớp $HfSiSeP_2$ được chứng minh có độ ổn định động học và nhiệt học cao thông qua các tính toán phổ dao động và mô phỏng động học phân tử. Phương pháp PBE chỉ ra rằng $HfSiSeP_2$ là bán dẫn vùng cấm xiên với năng lượng vùng cấm là 0,58 eV. Kết quả tính toán cho thấy rằng biến dạng ảnh hưởng đáng kể lên các tính chất điện tử của $HfSiSeP_2$. Biến dạng vừa làm thay đổi cấu trúc vùng năng lượng, độ rộng vùng cấm, vừa gây ra sự chuyển pha từ bán dẫn sang kim loại. Ngoài ra, chúng tôi cũng khảo sát độ linh động của hạt tải trong đơn lớp $HfSiSeP_2$ và chỉ ra rằng độ linh động của electron theo hướng *y* cực kỳ cao, lên đến 2193,32 $cm^2V^{-1}s^{-1}$. Các kết quả trên chứng tỏ đơn lớp Janus hai chiều $HfSiSeP_2$ có tiềm năng ứng dụng rất lớn trong các thiết bị điện tử, quang điện tử và cơ điện tử nano.

**Lời cảm ơn:** Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sài Gòn trong đề tài mã số CSA2022-19.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] Novoselov KS, Geim AK, Morozov SV, Jiang D, Zhang Y, Dubonos SV, Grigorieva IV, Firsov AA. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science* 2004;306:666.

[2] 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.

[3] Poklonski NA, Vyrko SA, Siahlo AI, Poklonskaya ON, Ratkevich SV, Hieu NN, Kocherzhenko AA. Synergy of physical properties of low-dimensional carbon-based systems for nanoscale device design. *Mater. Res. Express* 2019**;**6(4):042002.

[4] Banszerus L, Schmitz LM, Engels S, Dauber J, Oellers M, Haupt F, Watanabe K, Taniguchi T, Beschoten B, Stampfer C. Ultrahigh-mobility graphene devices from chemical vapor deposition on reusable copper. *Sci. Adv.* 2015;1(6): e1500222.

[5] Lu A-Y, Zhu H, Xiao J, Chuu C-P, Han Y, Chiu M-H, Cheng CC, Yang CW, Wei K-H, Yang Y, Wang Y, Sokaras D, Nordlund D, Yang P, Muller DA, Chou M-Y, Zhang X, Li L-J. Janus monolayers of transition metal dichalcogenides. *Nat. Nanotechnol.* 2017;12:744.

[6] Zhang J, Jia S, Kholmanov I, Dong L, Er D, Chen W, Guo H, Jin Z, Shenoy VB, Shi L, Lou J. Janus Monolayer Transition-Metal Dichalcogenides. *ACS Nano.* 2017;11(8): 8192.

[7] 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.

[8] Vu TV, Vi VTT, Phuc HV, Kartamyshev AI, Hieu NN. Oxygenation of Janus group III monochalcogenides: First-principles insights into GaInXO (X = S, Se, Te) monolayers. *Phys. Rev. B.* 2021; 104: 115410.

[9] Hong Y-L, Liu Z, Wang L, Zhou T, Ma W, Xu C, Feng S, Chen L, Chen ML, Sun DM, Chen X-Q, Cheng H-M, Ren W. Chemical vapor deposition of layered two-dimensional MoSi2N4 materials. *Science.* 2020;369:670–674.

[10] Wang L, Shi Y, Liu M, Zhang A, Hong Y-L, Li R, Gao Q, Chen M, Ren W, Cheng H-M, Li Y, Chen X-Q. Intercalated architecture of $MA_2Z_4$ family layered van der Waals materials with emerging topological, magnetic and superconducting properties. *Nat. Commun.* 2021;12:2361.

[11] Sibatov RT, Meftakhutdinov RM, Kochaev AI. Asymmetric XMoSiN2 (X=S, Se, Te) monolayers as novel promising 2D materials for nanoelectronics and photovoltaics. *Appl. Surf. Sci.* 2022;585:152465.

[12] Kresse G, and Furthmüller F. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B.* 1996; 54: 11169.

[13] 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.

[14] Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys Rev Lett.* 1996;77(18):3865.

[15] Grimme S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *J. Comput. Chem.* 2006;27(15):1787-99.

[16] Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *J. Chem. Phys.* 1984; 81: 511.

[17] Bardeen J, Shockley W. Deformation Potentials and Mobilities in Non-Polar Crystals. *Phys. Rev.* 1950;80:72.

[18] Vi VTT, Linh TPT, Ngyyen CQ, Hieu NN. Tunable electronic properties of novel 2D Janus $MSiGeN_4$ (M = Ti, Zr, Hf) monolayers by strain and external electric field. *Adv. Theory Simul.* 2022; 5: 2200499.

[19] 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.

[20] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, Giacometti V, Kis A. Single-layer MoS2 transistors. *Nat. Nanotechnol.* 2011;6:147–50.

Ngày nhận bài: 31/7/2023 Ngày chấp nhận đăng: 20/12/2023