**TRANG THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN**

Tên đề tài luận án: **CÁC TÍNH CHẤT VẬN CHUYỂN CỦA CẤU TRÚC LỚP**

Ngành: Vật lý lý thuyết và Vật lý toán

Mã số: 62440103

Họ tên nghiên cứu sinh: Đặng Khánh Linh

Khóa đào tạo: 23 (2013 – 2016)

Người hướng dẫn khoa học: PGS. TS Nguyễn Quốc Khánh

Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Khoa học tự nhiên – Đại học Quốc gia TP Hồ Chí Minh.

**1. TÓM TẮT NỘI DUNG LUẬN ÁN**

Luận án tập trung tính toán một số đặc trưng vận chuyển cho Graphene lớp kép (Bilayer graphene – BLG) theo cơ chế tán xạ tạp chất Coulomb tại $=0K$ , $T\ne 0K $và khảo sát độ dẫn điện nhiệt độ hữu hạn của lớp thứ nhất (chúng tôi luôn chọn là BLG) trong sự hiện diện của lớp thứ hai bởi tán xạ Coulomb bị chắn trong một vài cấu trúc lớp đôi. Các cấu trúc đó là lớp đôi BLG – BLG (2BLG), lớp đôi BLG – Khí điện tử hai chiều (2DEG). Hai lớp đơn trong mỗi cấu trúc lớp đôi đó được phân cách nhau bởi một lớp đệm điện môi. Bằng việc sử dụng lý thuyết vận chuyển Boltzmann và gần đúng thời gian hồi phục, chúng tôi tính độ dẫn điện nhiệt độ không của BLG trong bốn mô hình chắn khác nhau: không chắn (unscreened), Thomas – Fermi (TF), quá chắn (overscreened), gần đúng pha ngẫu nhiên (RPA). Chúng tôi tính độ dẫn nhiệt, độ dẫn điện nhiệt độ hữu hạn sử dụng hàm chắn TF, RPA $T=0K$, RPA $T\ne 0K$. Ảnh hưởng của đế, khoảng cách giữa hai lớp graphene đơn (MLG) và khoảng cách giữa lớp graphene đơn đầu tiên với đế lên sự phụ thuộc mật độ hạt tải, nhiệt độ của suất nhiệt điện khuếch tán $S\_{d}$ trong BLG được chúng tôi khảo sát bằng phương pháp giải số. Tiếp theo, chúng tôi tính hàm điện môi của BLG – BLG, BLG – GaAs (khí điện tử trong cấu trúc dị chất GaAs/AlGaAs) như là hàm của nhiệt độ, khoảng cách giữa hai lớp và hằng số điện môi của lớp đệm. Cuối cùng, chúng tôi tính độ dẫn điện nhiệt độ hữu hạn của lớp thứ nhất trong các lớp đôi BLG – BLG, BLG – 2DEG và so sánh chúng với độ dẫn điện của chỉ một mình BLG.

**2. NHỮNG KẾT QUẢ MỚI CỦA LUẬN ÁN**

Với BLG: sử dụng mô hình BLG chuẩn đơn giản (BLG không gap, phổ tán sắc có dạng parabol trong gần đúng năng lượng thấp, hóa thế không đổi theo nhiệt độ) và giới hạn chỉ xét cơ chế tán xạ tạp chất tích điện, chúng tôi thực hiện tính độ dẫn điện $σ$, độ dẫn nhiệt $κ\_{e}$ theo nhiệt độ $T $với ba gần đúng cho hàm điện môi (gần đúng Thomas Fermi (TF), RPA $T=0K$, RPA $T\ne 0K$). Kết quả là gần đúng TF cho giá trị sai khác nhiều so với RPA $T=0K$, RPA $T\ne 0K$ mà RPA $T\ne 0K$ là gần đúng chính xác hơn hết. Chúng tôi cũng tính độ dẫn điện $σ(T)$ trong RPA. Kết quả cho thấy dạng đường cong $σ$ theo nhiệt độ và sự tồn tại nhiệt độ chuyển pha là một đặc trưng phổ quát của BLG. Ngoài ra, giá trị độ dẫn điện phụ thuộc đáng kể vào khoảng cách *c* giữa hai lớp graphene đơn (MLG) và tăng khi khoảng cách *d* giữa lớp graphene đơn đầu tiên và đế tăng trong khi nhiệt độ chuyển pha giảm chậm theo sự tăng của *d*. Bên cạnh đó, trong miền nhiệt độ thấp, độ dốc của dạng tuyến tính theo *T* của $σ$ có giá trị không đổi cũng được chúng tôi tìm thấy. Sau đó, chúng tôi tính đến sự phụ thuộc vào *T* , mật độ hạt tải *n* của suất nhiệt điện khuếch tán $S\_{d}$ theo các giá trị khác nhau của $c,d, κ$ ($κ$ là hằng số điện môi nền trung bình của môi trường) theo RPA $T\ne 0K$. Kết quả chúng tôi thấy $S\_{d}$ tăng theo sự tăng của $T, c,d,κ$ và nó là hàm giảm theo $n.$ Tại miền nhiệt độ thấp $S\_{d}$ tăng tuyến tính theo $T$ (công thức Mott) cho mọi giá trị $c,d,κ$. Một kết quả ấn tượng là bởi sự tăng của $d$, $S\_{d}$ trên nền với $κ$ nhỏ vẫn có thể lớn hơn $S\_{d}$ trên nền với $κ$ lớn. Các kết quả này đã được chúng tôi đăng tải trong bài báo *International Journal of Modern Physics B 32, 1850064 (2017)*.

Trong trường hợp hệ lớp đôi 2BLG, chúng tôi đã tính hàm điện môi $ε\left(q,T\right) $của hệ này có so sánh với BLG và rút ra được những kết quả: với sự phụ thuộc $T$ của hàm điện môi thì dạng đồ thị giống với BLG nhưng giá trị lớn hơn nhiều; với sự phụ thuộc $d$ thì giá trị của hàm điện môi hệ 2BLG ban đầu tăng theo $d$ sau đó không đổi khi $d$ tăng; với sự phụ thuộc $ε\_{2}$ thì hàm điện môi của hệ là hàm giảm theo $ε\_{2}$. Khi tính $σ$ của lớp thứ nhất (lớp BLG) trong hệ 2BLG, chúng tôi thấy dạng đường cong theo $T$ của $σ$ và sự tồn tại nhiệt độ chuyển pha là giống với BLG nhưng giá trị $σ$ lớn hơn nhiều. Nhiệt độ chuyển pha khá nhạy cảm với$ ε\_{2}$. Giá trị của $σ$ lớp thứ nhất ban đầu giảm mạnh và sau đó không đổi khi $d$ tăng. Giá trị này tăng mạnh theo sự tăng $ε\_{2}$ và tăng yếu theo $ε\_{3}$. Các kết quả này đã được chúng tôi đăng tải trong bài báo *Superlattices and Microstructures 114, 406 (2018)*.

Đối với lớp đôi BLG-GaAs, chúng tôi cũng tính hàm điện môi $ε\left(q,T\right) $của hệ này có so sánh với BLG và rút ra được những kết quả: sự phụ thuộc $T$ của hàm điện môi giống với trường hợp BLG khi $T$ nhỏ và giống với GaAs (2DEG) khi $T$ lớn. Giá trị của nó thì lớn hơn trường hợp BLG không nhiều. Sự phụ thuộc của $ε\left(q,T\right)$ vào $d, ε\_{2}$ thì tương tự như của hệ 2BLG. Khi tính $σ$ của lớp thứ nhất (lớp BLG) trong hệ BLG-GaAs, chúng tôi thấy ở dạng đường cong theo $T$ của $σ$, sự tồn tại nhiệt độ chuyển pha giống với ở BLG, 2BLG nhưng giá trị của 2BLG là lớn nhất, sau đó là của BLG-GaAs. Nhiệt độ chuyển pha khá nhạy cảm với $ε\_{2},d$ và nhiệt độ chuyển pha ở hệ BLG-GaAs là lớn nhất khi so sánh với 2BLG, BLG. Sự phụ thuộc $d, ε\_{2}$ của $σ$ của lớp thứ nhất là tương tự như trong hệ 2BLG. Các kết quả này đã được chúng tôi đăng tải trong bài báo *Superlattices and Microstructures 116, 181 (2018)*.

**3. CÁC ỨNG DỤNG/ KHẢ NĂNG ỨNG DỤNG TRONG THỰC TIỄN HAY NHỮNG VẤN ĐỀ CÒN BỎ NGỎ CẦN TIẾP TỤC NGHIÊN CỨU**

Cho đến nay, các hệ graphene lớp kép là một trong những cấu trúc lớp được nghiên cứu nhiều kể cả lý thuyết lẫn thực nghiệm. Do đó, nghiên cứu các đại lượng vận chuyển của graphene lớp kép và các cấu trúc lớp đôi có thành phần graphene hay graphene lớp kép là một hướng nghiên cứu rất quan trọng, có ý nghĩa khoa học và thực tiễn. Kết quả thu được của luận án có thể cung cấp thêm những thông tin hữu ích cho việc tìm kiếm những ứng dụng để chế tạo những linh kiện điện tử hiện đại cũng như góp phần phát triển lý thuyết về vật liệu graphene.

|  |  |
| --- | --- |
| **CÁN BỘ HƯỚNG DẪN****PGS. TS. Nguyễn Quốc Khánh** | **NGHIÊN CỨU SINH****Đặng Khánh Linh** |

**XÁC NHẬN CỦA CƠ SỞ ĐÀO TẠO**

**PHÓ HIỆU TRƯỞNG**

**Trần Lê Quan**

**THESIS INFORMATION**

Thesis title: **TRANSPORT PROPERTIES OF LAYERED STRUCTURES**

Specialty: Theoretical and Mathematical Physics

Code: 62440103

PhD student: Dang Khanh Linh

Academic year: 23 (2013 – 2016)

Supervisor: Assoc. Prof. Nguyen Quoc Khanh

At: University of Science – VNU. HCMC.

**1. ABSTRACT**

The aim of the thesis is to calculate some of transport properties of bilayer graphene (BLG) impacted by Coulomb impurity scattering at $T=0K$ , $T\ne 0K $, and the finite – temperature electrical conductivity of the first layer which always is BLG in presence of the second one due to the screened Coulomb scattering in several double layer structures. These structures include BLG – BLG, BLG – 2DEG (two dimensional electron gas) double layers separated by a dielectric spacer. By using Boltzmann transport theory and relaxation time approximation, we calculates the zero – temperature electrical conductivity of BLG within four different screening models: unscreened, Thomas – Fermi (TF), overscreened, random phase approximation (RPA). We also calculate the finite temperature electron conductivity, thermal conductivity of BLG using TF, zero- and finite- temperature RPA screening functions. The effects of the substrate, interlayer distance, and distance between the first layer and the substrate on temperature, density dependence of diffusion thermopower $S\_{d }$in BLG are investigated numerically. Next, we calculate the dielectric function of BLG – BLG, BLG – GaAs (2DEG) as a function of temperature, interlayer distance, and spacer dielectric constant. Finally, we calculate the finite – temperature electrical conductivity of the first layer in BLG – BLG, BLG – 2DEG and compare with that of BLG.

**2. NEW RESULTS**

For the BLG, using gapless BLG with a quadratic dispersion, temperature – independent chemical potential, we calculate the electrical conductivity, thermal conductivity using the TF, zero- and finite – temperature RPA screening and find large differences between the results of these models. Assuming that the finite – temperature RPA is the best screening model, we calculate temperature dependence of conductivity and show that the conductivity depends remarkably on interlayer distance *c* and increases with increasing distance between the first layer and the substrate *d.* We also find that the conductivity has a linear temperature metallic behavior with constant slope at low temperature and a quadratic temperature insulating behavior at higher temperature. The phase transition temperature decreases slowly as *d* increases. These features of electric conductivity is universal for BLG. After that, we study the temperature and density dependence of diffusion thermopower $S\_{d}$ for different values $c, d, κ$ ($κ$ is background dielectric constant). We show that $S\_{d}$ increases with increasing $T, c, d, κ$ and decreases with increasing *n.* At low temperature, the linear behavior of $S\_{d}$ is found for all substrates, *c, d*, showing that the Mott formula being obeyed. The other important result is that by increasing *d,* $S\_{d}$for substrate with lower $κ$ may be larger than that for substrate with higher $κ$. These results have been published in the ISI paper *International Journal of Modern Physics B 32, 1850064 (2017).*

For BLG-BLG double-layer, we have investigated the dependence of dielectric function on temperature, interlayer distance *d*, and spacer dielectric constant $ε\_{2}$. We show that the temperature dependence of BLG – BLG dielectric function is similar to BLG but its magnitude is greater than that of BLG. We also find that the BLG – BLG dielectric function decreases with increasing $ ε\_{2}$ and increases strongly as interlayer distance increases for small *d* then remains almost constant for larger *d*. After that, we have investigated the dependence of electrical conductivity of the first BLG layer in presence of the second one due to the screened Coulomb scattering on *T*, *d,* $ε\_{2}, $substrate dielectric constant $ε\_{3}$. The results show that the conductivity of the first BLG layer is greater than that of BLG, however, the shapes of conductivity curves are similar. The transition temperature is sensitive to $ε\_{2}$. The conductivity of the first layer shows strong increase with increasing $ε\_{2 }$, increases weakly with $ε\_{3}$ (its $ε\_{3}$ dependence is notable for large *T* but becomes very weak at small *T*) and decreases rapidly at small $d$ as *d* increases, then remains almost constant for larger interlayer distance$.$ These results have been published in the ISI paper *Superlattices and Microstructures 114, 406 (2018).*

In case of BLG – 2DEG double-layer, we have also studied the dependence of the dielectric function $ε(q,T) $of BLG-GaAs (2DEG) on temperature *T*, wave-vector $ q, $interlayer distance *d*, and spacer dielectric constant $ε\_{2}$. We find that the temperature dependence of BLG – GaAs dielectric function is similar to BLG at low *T* and it is similar to GaAs (2DEG) at higher *T*. The dependence of $ε(q,T) $of BLG-GaAs (2DEG) on $d, ε\_{2}$ are similar to BLG – BLG. Investigating the dependence of the electrical conductivity $σ$ of BLG layer in presence of GaAs (2DEG) one due to the charged impurity scattering on *T*, we show that the $σ$ is greater (less) than that of BLG (BLG – BLG) however, the shapes of conductivity curves are similar. The transition temperature is sensitive to $ε\_{2}, d$ and its value is the highest (compared with BLG and BLG – BLG). The dependence of conductivity of the first layer of BLG-GaAs (2DEG) on $d, ε\_{2}$ are similar to that of BLG – BLG. These results have been published in the ISI paper *Superlattices and Microstructures 116, 181 (2018).*

**3. POSSIBLE APPLICATIONS**

Bilayer graphene systems have been intensively investigated experimentally and theoretically. It is shown that transport properties of bilayer graphene and double layer systems consisting of graphene or bilayer graphene are very important. The results presented in this thesis provide useful information for finding application of the systems to modern electronic devices and contribute to the theoretical understanding of graphene based materials.

|  |  |
| --- | --- |
| **SUPERVISOR****Assoc. Prof. Nguyen Quoc Khanh** | **PhD STUDENT****Dang Khanh Linh** |

**CONFIRMATION OF THE UNIVERSITY OF SCIENCE**

**VICE PRESIDENT**

**Tran Le Quan**