**TRANG THÔNG TIN LUẬN ÁN**

Tên đề tài luận án: **Tính chất điện tử và quang-từ của một số hệ đơn lớp hai chiều có cấu trúc tương tự graphene**

Ngành: **Vật lý lý thuyết và Vật lý toán**

Mã số ngành: **62440103**

Họ tên nghiên cứu sinh: **Đỗ Mười**

Khóa đào tạo: **2017**

Người hướng dẫn khoa học: CBHD 1: **PGS.TS. Nguyễn Ngọc Hiếu**

CBHD 2: **PGS.TS. Huỳnh Vĩnh Phúc**

Cơ sở đào tạo: **Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG.HCM**

**1. TÓM TẮT NỘI DUNG LUẬN ÁN**:

Các vật liệu hai chiều có cấu trúc tương tự graphene như silicene, germanene và các hợp chất dichalcogenide kim loại chuyển tiếp rất được quan tâm trong thời gian gần đây do chúng có nhiều tính chất vật lý hấp dẫn. Các vật liệu này có tương tác spin-quỹ đạo khá mạnh nên có nhiều triển vọng ứng dụng vào trong lĩnh vực điện tử học spin. Sử dụng lý thuyết trường lượng tử và các tính toán cơ bản trong cơ học lượng tử, luận án khảo sát các tính chất điện tử và quang-từ của một số vật liệu có cấu trúc tương tự graphene. Nội dung chủ yếu nghiên cứu các vấn đề sau:

- Khảo sát tính chất hấp thụ quang-từ của các vật liệu đơn lớp silicene và germanene trong từ trường và điện trường có xét đến ảnh hưởng của tán xạ phonon và tạp chất. Từ kết quả khảo sát về hệ số hấp thụ quang-từ, luận án đã tính toán được độ rộng vạch phổ hấp thụ của các vật liệu này.

- Khảo sát độ truyền dẫn phân cực theo spin-valley trong silicene và germanene đơn lớp. Tính toán hàm điện môi Ehrenreich-Cohen và chỉ ra quy luật biến thiên của độ dẫn Hall lượng tử khi có mặt điện trường ngoài.

- Khảo sát tính chất điện tử và quang-từ của các đơn lớp dichalcogenide kim loại chuyển tiếp MoS2 và WS2. Các tính chất quang-từ tuyến tính và phi tuyến của các đơn lớp MoS2 và WS2 đã được nghiên cứu bằng phương pháp gần đúng ma trận mật độ. Tính chất điện tử của WS2 trong trường ngoài đã được khảo sát thông qua Hamiltonian đơn hạt.

**2. NHỮNG KẾT QUẢ MỚI CỦA LUẬN ÁN**:

- Thu được tính chất quang-từ trong các đơn lớp cấu trúc vênh như silicene, germanene. Đã thu được các công thức giải tích cho hệ số hấp thụ quang-từ trong các cơ chế tán xạ hạt tải-photon, hạt tải-photon-tạp chất và hạt tải-photon-phonon. Kết quả nghiên cứu cho thấy, trong phổ hệ số hấp thụ quang từ của silicene và germanene có xuất hiện một chuỗi các đỉnh trong cả ba cơ chế tán xạ với cường độ đỉnh lớn nhất do chuyển dời giữa mức Landau tại *n*  0 và mức Landau tại *n*  1. Cường độ đỉnh trong phổ hấp thụ quang từ trong trường hợp tán xạ hạt tải-tạp chất là lớn nhất và giảm dần khi chỉ số mức Landau tăng dần. Bên cạnh đó, khi xét riêng các mode phonon thì kết quả cho thấy phổ hấp thụ quang từ trong trường hợp mode phonon âm theo phương thẳng đứng (ZA phonon) là lớn nhất. Những kết quả này được công bố trên tạp chí *Physical Review B* **101** (2020) 205408.

- Thu nhận được biểu thức giải tích của hàm điện môi Ehrenreich-Cohen cho silicene và germanene và chỉ ra được sự khác nhau về độ hấp thụ quang giữa silicene và germanene. Thu được độ dẫn Hall lượng tử theo spin-valley khi có mặt của điện trường và tương tác spin-quỹ đạo trong đơn lớp silicene và germanene. Kết quả nghiên cứu đã chỉ ra rằng độ dẫn Hall phụ thuộc mạnh vào vị trí của mức Fermi. Khi mức Fermi nằm trong vùng cấm, độ dẫn Hall sẽ bị lượng tử hóa. Những kết quả này được công bố trên tạp chí *Journal of Materials Science* **55** (2020) 14848.

- Bằng phương pháp gần đúng ma trận mật độ, luận án đã nghiên cứu tính chất quang-từ tuyến tính và phi tuyến của đơn lớp MoS2 thông qua việc tính toán các hệ số hấp thụ quang-từ và độ thay đổi chiết suất tỉ đối. Kết quả nghiên cứu đã chỉ ra được sự phụ thuộc vào năng lượng photon và từ trường của hệ số hấp thụ và độ thay đổi chiết suất tỉ đối. Khi xét quá trình chuyển dời liên vùng giữa các mức Landau, đã thu được một chuỗi các đỉnh trong phổ hệ số hấp thụ và độ thay đổi chiết suất tỉ đối của MoS2 trong khi đó các phổ này chỉ chứa một đỉnh đối với các chuyển dời nội vùng. Những kết quả này được công bố trên tạp chí *Optik* **209** (2020) 164581 và *Journal of Applied Physics* **123** (2018) 034301.

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

Các vật liệu đơn lớp hai chiều có cấu trúc tương tự graphene như silicene, germanene và các hợp chất dichalcogenide kim loại chuyển tiếp có nhiều triển vọng ứng dụng trong các thiết bị quang-điện tử. Do đó, nghiên cứu tính chất điện tử và quang-từ sẽ góp phần làm sáng tỏ thêm các tính chất vật lý của chúng để từ đó có định hướng ứng dụng các vật liệu này vào trong các thiết bị quang-điện tử trong tương lai.

Bên cạnh những kết quả đã đạt được trong luận án này, một số bài toán khác về tính chất điện tử và quang-từ chúng tôi muốn tiếp tục khảo sát đầy đủ hơn nữa như: khảo sát sự phụ thuộc vào nhiệt độ của giá trị đỉnh hệ số hấp thụ quang-từ, khảo sát ảnh hưởng của nhiệt độ bất kỳ lên độ dẫn spin-valley-Hall, khảo sát các tính chất nhiệt của các vật liệu… Những nghiên cứu này được kỳ vọng là sẽ góp phần hoàn thiện bức tranh vật lý của các hệ vật liệu hai chiều có cấu trúc tương tự graphene.

**TẬP THỂ CÁN BỘ HƯỚNG DẪN NGHIÊN CỨU SINH**

**PGS.TS. Nguyễn Ngọc Hiếu PGS.TS. Huỳnh Vĩnh Phúc Đỗ Mười**

**XÁC NHẬN CỦA CƠ SỞ ĐÀO TẠO**

**HIỆU TRƯỞNG**

**THESIS INFORMATION**

Thesis title: **Electronic and magneto-optical properties of some two-dimensional graphene-like monolayers**

Speciality: **Theoretical and Mathematical Physics**

Code: 62440103

Name of PhD Student: **Đỗ Mười**

Academic year: **2017**

Supervisors:

1. **Assoc. Prof. Dr. Nguyễn Ngọc Hiếu**
2. **Assoc. Prof. Dr. Huỳnh Vĩnh Phúc**

At: **VNUHCM - University of Science**

**1. SUMMARY**:

Two-dimensional graphene-like materials, such as silicene, germanene, and transition metal dichalcogenide compounds, are of great interest due to their superior physical properties. Due to their strong spin-orbit coupling effect, these materials have great potential for applications in spintronics. The main goal of the thesis is to investigate the electronic and magneto-optical properties of two-dimensional graphene-like materials by using quantum field theory and basic principles in quantum mechanics. The main content of the thesis is the following issues:

- Investigate the magneto-optical properties of silicene and germanene monolayers in magnetic and electric fields. The influence of phonon-impurity scattering on the magneto-optical properties is also included in our calculations. Based on calculated results for the magneto-optical absorption coefficient, we obtain the full-width at half-maximum of the resonant peaks of the investigated structures.

- Investigate the spin/valley-Hall conductivity of silicene and germanene. Calculate the Ehrenreich-Cohen dielectric function and demonstrate the dependence of the quantum Hall conductivity on an external electric field.

- Consideration of electronic and magneto-optical properties of transition metal dichalcogenide monolayers MoS2 and WS2­­. The linear and nonlinear magneto-optical properties of MoS2 and WS2­­ are studied by the compact density matrix method. The one-particle Hamiltonian is used to examine the electronic properties of the WS2 monolayer in the presence of the external fields.

**2. NOVELTY OF THESIS**:

- Obtaining magneto-optical properties of low-buckled monolayers silicene and germanene. Analytical formulas for the magneto-optical absorption coefficient with different scattering mechanisms, including carrier-photon, carrier-photon-impurity, and carrier-photon-phonon scattering, have been obtained. The calculated results indicate that there is a series of peaks in the magneto-optical absorption coefficient of silicene and germanene in all three investigated scattering mechanisms with the highest peak intensity causing the transition between *n*  0 and *n*  1 Landau levels. The intensity of peaks caused by the carrier-photon-impurity scattering is the highest and decreases as the Landau level index increases. Among the different phonon modes, it is found that the magneto-optical absorption coefficient in the case of the out-of-plane acoustic phonon is the highest compared to other phonon modes. These results are published in *Physical Review B* **101** (2020) 205408.

- Obtained the analytical expression of the Ehrenreich-Cohen dielectric function for silicene and germanene monolayers and figured out the difference in optical absorbance between silicene and germanene. The spin/valley-Hall quantum conductivity is obtained in silicene and germanene when the external electric field and spin-orbit coupling are included. It is found that the Hall conductivity of both silicene and germanene depends strongly on Fermi energy. When the Fermi level is in the forbidden band, the Hall conductivity is quantized. These results are published in *Journal of Materials Science* **55** (2020) 14848.

- Using the compact density matrix method, we investigated the linear and nonlinear magneto-optical properties of the MoS2 monolayer via the analysis of the magneto-optical absorption coefficient and refractive index changes. The calculated results have pointed out the dependence of the magneto-optical absorption coefficient and refractive index changes on the photon energy. It is found that the magneto-optical absorption coefficient and refractive index changes appear as a series of peaks in the inter-band, while the intra-band transitions result in only one peak. These results are published in *Optik* **209** (2020) 164581 and *Journal of Applied Physics* **123** (2018) 034301.

**3**. **APPLICATIONS/ APPLICABILITY/ PERSPECTIVE**

Two-dimensional graphene-like monolayers, such as silicene, germanene, and transition metal dichalcogenides, have many promising applications in optoelectronic devices. Therefore, studying the electronic and optical-magnetic properties is to gain a deeper understanding of these materials and thereby get a clear direction for their applications in future optoelectronic devices.

In addition to the results obtained in this thesis, some other problems of electronic and –magneto-optical properties of layered structures that may need to be further studied with bright prospects, such as the investigations of the dependence of the magneto-optical absorption coefficient and spin/valley-Hall conductivity on temperature, thermal characteristics of materials, etc. Results of these further studies are expected to complete the physical picture of two-dimensional graphene-like nanomaterials.

**SUPERVISORS PhD STUDENT**

**Assoc.Prof. Dr. Nguyễn Ngọc Hiếu Assoc.Prof. Dr. Huỳnh Vĩnh Phúc Đỗ Mười**

**CERTIFICATION**

**UNIVERSITY OF SCIENCE**

**PRESIDENT**