**TÓM TẮT THÔNG TIN LUẬN ÁN**

Tên đề tài luận án: *Nghiên cứu tương tác giữa graphene và đế bán dẫn bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ*

Ngành: Khoa học vật liệu

Mã số ngành: 62 44 01 22

Họ tên nghiên cứu sinh: Vũ Hoàng Nam

Khóa đào tạo: 2014

Người hướng dẫn chính: PGS.TS Cao Minh Thì. Người hướng dẫn phụ: TS Lê Minh Hưng

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

**1. TÓM TẮT NỘI DUNG LUẬN ÁN**:

Đối tượng nghiên cứu của đề tài luận án là vật liệu graphene với hai mục đích nghiên cứu chính: (i) xác định cách thức mở vùng cấm năng lượng cho siêu mạng graphene thông qua bẻ gãy đối xứng chiral của nó bởi một thế ngoài sắc nhọn cảm ứng từ đế bán dẫn silicon carbide; (ii) xác định cơ chế truyền điện tích và hành vi của hàng rào Schottky của tiếp giáp van der Waals giữa graphene và đế bán dẫn silicon khi có sự kết hợp giữa thế truyền điện tích và sự dịch mức Fermi graphene. Hai mục đích này được thực hiện bằng việc sử dụng các phương pháp tính toán lượng tử dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ.

**2. NHỮNG KẾT QUẢ MỚI CỦA LUẬN ÁN**:

Đối với mục đích thứ nhất, các kết quả chính và kết luận: Cho siêu mạng graphene có tâm của vùng Brillouin siêu mạng gấp vào góc của vùng Brillouin nguyên tố, siêu mạng có góc quay 0 < φ < 30° tăng cường cả sự tán xạ ngược ngoại hố Dirac và tán xạ ngược nội hố Dirac, qua đó khởi tạo sự trộn lẫn các hố không tương đương tại điểm Dirac sơ cấp dẫn đến sự bẻ gãy đối xứng chiral mạnh và mở vùng cấm năng lượng lớn tại đó. Hơn nữa, nếu áp đặt một thế ngoài sắc nhọn phân bố không đồng nhất lên siêu mạng này, sự trồi lên và trộn lẫn các hố không tương đương tại điểm Dirac sơ cấp sẽ được tăng cường hơn, nhờ vậy vùng cấm năng lượng được mở rộng hơn nữa.

Đối với mục đích thứ hai, các kết quả chính và kết luận: Không có sự truyền điện tích giữa graphene và trạng thái bề mặt định xứ của đế bán dẫn silicon do sự ghìm mức Fermi tại trạng thái bề mặt đế và sự ngăn cản từ điện trường của lực đẩy trao đổi Pauli của tiếp giáp van der Waals. Sự truyền điện tích giữa graphene và đế có thể xảy ra khi không có sự tham gia của trạng thái bề mặt định xứ hoặc có sự tham gia của trạng thái bề mặt tính kim loại của đế. Sự truyền điện tích sẽ gây ra sự dịch mức Fermi graphene và một thế truyền điện tích kèm theo nhưng không gây ra sự kém nhạy của độ cao hàng rào Schottky như quan niệm từ mô hình tiếp giáp truyền thống, mà ngược lại nó có thể đánh thủng giới hạn Schottky-Mott của hàng rào tiếp giáp.

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

Các kết quả nghiên cứu của luận án sẽ giúp thúc đẩy hơn nữa việc tích hợp vật liệu graphene cũng như các tính chất điện tử độc đáo của nó vào các vật liệu bán dẫn được đi kèm với công nghệ bán dẫn hiện tại.

|  |  |
| --- | --- |
| **TẬP THỂ CÁN BỘ HƯỚNG DẪN**  PGS.TS Cao Minh Thì | **NGHIÊN CỨU SINH**    Vũ Hoàng Nam |
|  |  |

**XÁC NHẬN CỦA CƠ SỞ ĐÀO TẠO**

**HIỆU TRƯỞNG**

**THESIS INFORMATION**

Thesis title: *Density functional theory investigation of the electronic properties of graphene on semiconductor substrates*

Speciality: Materials science

Code: 62 44 01 22

Name of PhD Student: Vu Hoang Nam

Academic year: 2014

Principal Supervisor: Assoc Prof. Dr. Cao Minh Thi, Associate Supervisor: Dr. Le Minh Hung

At: VNUHCM - University of Science

**1. SUMMARY**:

By employing the quantum computational methods based on density functional theory, the present doctoral thesis focus on two main research objectives: (i) to determine the mechanism of energy bandgap opening for different graphene superlattices through the breaking of their chiral symmetry (or intervalley scattering) by an external atomic-scale sharp potential induced by a silicon carbide substrate surface, and (ii) to investigate the charge transport mechanism and the behavior of the Schottky barrier at the van der Waals interface between graphene and the silicon substrate.

**2. NOVELTY OF THESIS**:

The main results and conclusions for the first objective are as follows: Under the modulation of the atomic-scale sharp potential on the graphene superlattices, with the superlattice Brillouin zone (SBZ) center folded into the primitive graphene Brillouin zone corner, a superlattice with a rotational angle of φ = 30° facilitates intervalley scattering at the edge of the SBZ, whereas an unrotated superlattice (φ = 0°) is favorable to intravalley scattering. For a superlattice with a rotational angle in the range of 0° < φ < 30°, the intervalley and intravalley scatterings may be comparable to each other, leading to the emergence of mixed inequivalent replica Dirac cones (or intervalley scattering) at the SBZ center, and generating a significant energy bandgap at the primitive Dirac point. We also show that the intervalley scattering can also generate an energy gap at the secondary Dirac point.

For the second objective, we show that there is no charge transfer between the localized surface states of the silicon substrate and graphene, while the metallic surface state of the substrate transfers its spilled-out electron to graphene but prevents the development of a depletion region of free carriers in the subsurface region of the substrate due to strong electrostatic screening property of the metallic surface state. In the absence of surface states, the behavior of transferred charges is quite free in the interfacial layer, thus the effective distance of simple plane capacitor model of the charge transfer potential should be treated as a variable instead of fixing it as in the conventional metal/semiconductor interface models. More interestingly, the sensitivity of the Schottky barrier height of the van der Waals interface between graphene and the silicon substrate can overcome the Schottky-Mott limit and the recently proposed barrier models due to dependence of the charge transfer potential on the Fermi level shift in graphene.

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

The results of the thesis will further facilitate the integration of graphene materials and their unique electronic properties into semiconductor materials in conjunction with current semiconductor technology.

|  |  |
| --- | --- |
| **SUPERVISOR**  Assoc Prof. Dr. Cao Minh Thi | **PhD STUDENT**  Vu Hoang Nam |

CERTIFICATION

UNIVERSITY OF SCIENCE

**PRESIDENT**