

CỘNG HÒA XÃ HỘI CHỦ NGHĨA VIỆT NAM

Độc lập - Tự do - Hạnh phúc

NHỮNG ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN

I. Thông tin

Họ và tên của nghiên cứu sinh: **NGUYỄN QUANG CƯỜNG**

Tên luận án: **Tính chất điện tử và đặc trưng tiếp xúc trong cấu trúc xếp lớp van der Waals dựa trên MA_2Z_4 (M = kim loại chuyển tiếp; A = Si, Ge; Z = N, P)**

Ngành: Vật lý lý thuyết và vật lý toán

Mã số: 9 44 01 03

Người hướng dẫn khoa học: 1. PGS.TS. Nguyễn Văn Chương

2. PGS.TS. Lê Thị Thu Phương

Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế, Việt Nam

II. Những đóng góp mới của luận án

Luận án nghiên cứu về tính chất điện tử và đặc trưng tiếp xúc trong các cấu trúc xếp chồng bởi họ vật liệu MA_2Z_4 (M = kim loại chuyển tiếp; A = Si, Ge; Z = N, P) và các đơn lớp kim loại và bán dẫn khác. Các kết quả chính của luận án có những đóng góp mới như sau:

1. Cung cấp thông tin về cấu trúc hình học và tính chất điện tử của các cấu trúc dị thể đã xây dựng. Kết quả cho thấy các cấu trúc dị thể này bền vững về mặt năng lượng và động học.

2. Đã khảo sát ảnh hưởng của cấu trúc tinh thể đến tính chất điện tử của vật liệu. Rào thế tiếp xúc được hình thành trong các cấu trúc dị thể kim loại–bán dẫn có thể được tùy chỉnh bằng cách thay đổi kiểu xếp chồng giữa các đơn lớp.

3. Đã đề ra một phương án mở một vùng cấm nhỏ trong graphene. Sự xếp chồng giữa graphene và Janus $MoGeSiN_4$ đã làm xuất hiện một vùng cấm nhỏ trong graphene gây ra bởi sự phá vỡ đối xứng mạng tinh thể.

4. Đã có phát hiện mới về cấu trúc dị thể $MoSH/MoSi_2N_4$ có hình thành rào thế Schottky với chiều cao rào thế nhỏ, rất phù hợp cho các linh kiện điện tử thế hệ mới với điện thế tiếp xúc nhỏ.

5. Xác định được quy luật biến đổi đặc tính tiếp xúc trong các cấu trúc dị thể dưới điện trường ngoài và biến dạng. Thông qua biến dạng hay điện trường, các mức năng lượng dải biên trong cấu trúc dịch chuyển, giúp chuyển đổi loại tiếp xúc Schottky hoặc biến đổi sang tiếp xúc Ohmic trong các cấu trúc dị thể kim loại–bán dẫn. Trong cấu trúc dị thể bán dẫn–bán dẫn, sự dịch chuyển các mức năng lượng dải biên gây ra sự chuyển đổi tiếp xúc chuyển tiếp dị thể.

Huế, ngày 19 tháng 11 năm 2024

Đại diện hướng dẫn khoa học

Nghiên cứu sinh

PGS. TS. Lê Thị Thu Phương

Nguyễn Quang Cường

SOCIALIST REPUBLIC OF VIETNAM

Independence – Freedom – Happiness

THE NEW CONTRIBUTIONS OF THE THESIS

I. Information

Full name of PhD student: **NGUYEN QUANG CUONG**

Title of the thesis: **Electronic properties and contact characteristics in van der Waals layered structures based on MA_2Z_4 (M = transition metal; A = Si, Ge; Z = N, P)**

Major: Theoretical Physics and Mathematical Physics

Code: 9 44 01 03

Supervisors: 1. Assoc. Prof. Dr. Nguyen Van Chuong
2. Assoc. Prof. Dr. Le Thi Thu Phuong

Training institution: University of Education, Hue University

II. The new contributions of the thesis

The thesis investigated the electronic properties and contact characteristics in stacked heterostructures composed of the MA_2Z_4 material family (M = transition metal; A = Si, Ge; Z = N, P) and various monolayers of metals and semiconductors. The main results of the thesis have the following new contributions:

1. Providing information on the geometric structure and electronic properties of heterostructures built from the MA_2Z_4 material family (M = transition metal; A = Si, Ge; Z = N, P). The results indicate that these structures are energetically and dynamically stable.

2. Investigated the influence of crystal structure on the electronic properties of materials. Schottky barriers formed in metal-semiconductor heterostructures can be customized by varying the stacking arrangements between monolayers.

3. Proposed a method to induce a small band gap in graphene. The stacking between graphene and Janus $MoGeSiN_4$ has introduced a small band gap in graphene due to the breaking of crystal lattice symmetry.

4. A new discovery has been made regarding the $MoSH/MoSi_2N_4$ heterostructure, which forms a Schottky barrier with a low barrier height, making it highly suitable for next-generation electronic devices with low contact voltage.

5. The transformation laws of contact characteristics in constructed heterostructures under external electric fields and deformation have been identified. Through deformation or electric field techniques, the energy levels of band edges in heterostructure can be shifted, facilitating the conversion from Schottky contacts to Ohmic contacts in metal-semiconductor heterostructures. In semiconductor-semiconductor heterostructures, shifting of band edge energy levels leads to the transition of type-II heterojunctions.

Hue, November 19, 2024

Supervisor

PhD student

Assoc. Prof. Dr. Le Thi Thu Phuong

Nguyen Quang Cuong