

HỆ SỐ HẤP THỤ SÓNG ĐIỆN TỬ TRONG MoS_2 ĐƠN LỚP DƯỚI ẢNH HƯỞNG CỦA TƯƠNG TÁC ĐIỆN TỬ – TẠP CHẤT

PHẠM PHÚ DỨC¹, NGUYỄN NGỌC HIẾU², LÊ THỊ THU PHƯƠNG^{3,*}

¹Học viên Cao học, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

²Viện Nghiên cứu và Phát triển công nghệ cao, Trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng

³Trung tâm VLLT và VLTT, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

*Email: lethithuphuong@dhsphue.edu.vn

Tóm tắt: Trong công trình này, chúng tôi khảo sát sự hấp thụ sóng điện tử trong MoS_2 đơn lớp đặt trong từ trường tĩnh vuông góc. Hệ số hấp thụ sóng điện tử được tính toán bằng lý thuyết nhiễu loạn khi xét đến sự tán xạ điện tử – tạp chất. Phổ hấp thụ cho thấy sự xuất hiện các đỉnh cộng hưởng cyclotron-tạp chất đối với quá trình hấp thụ một và hai photon. Vị trí các đỉnh cộng hưởng (năng lượng photon cộng hưởng) tỉ lệ với cường độ từ trường (B), trong khi đó nhiệt độ không ảnh hưởng đến vị trí các đỉnh cộng hưởng. Ngoài ra, độ rộng vạch phổ của các đỉnh cộng hưởng tăng tuyến tính theo từ trường nhưng hầu như không thay đổi theo nhiệt độ. Đóng góp của các quá trình hấp thụ hai photon là nhỏ hơn nhiều so với quá trình hấp thụ một photon nhưng là đáng kể và cần phải được tính đến khi nghiên cứu các quá trình quang phi tuyến.

Từ khóa: hệ số hấp thụ, cộng hưởng cyclotron, tán xạ điện tử – tạp chất.

1. MỞ ĐẦU

Graphene là vật liệu hai chiều đơn lớp nguyên tử đầu tiên được chế tạo thành công với các tính chất vật lý nổi trội và tiềm năng ứng dụng to lớn mà các vật liệu truyền thống không có [1]. Tuy nhiên, sự khuyết thiếu vùng cấm trong graphene làm giới hạn khả năng ứng dụng của nó trong các thiết bị điện tử logic. Điều này đã thúc đẩy các nhà khoa học nghiên cứu và chế tạo các vật liệu hai chiều đơn lớp khác với một số đặc tính tương tự graphene nhưng có vùng cấm hữu hạn. Các cấu trúc đơn lớp dichalcogenide kim loại chuyển tiếp (TMDs) với công thức chung là MX_2 (M là kim loại chuyển tiếp thuộc các nhóm từ IV tới VI, X là nguyên tố chalcogen như S, Se, Te) là một trong số các vật liệu đơn lớp tương tự graphene được quan tâm nghiên cứu mạnh mẽ. Trong số này, MoS_2 đơn lớp là vật liệu tiêu biểu, được chế tạo thành công đầu tiên với nhiều tính chất vật lý thú vị. MoS_2 đơn lớp có khả năng chuyển từ bán dẫn vùng cấm gián tiếp với độ rộng 1,2 eV sang vùng cấm trực tiếp với độ rộng 1,9 eV [2, 3]. Đồng thời, vật liệu này sở hữu tốc độ mở/đóng cao (10^8) và độ

linh động hạt tải khá lớn ($200 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) ở nhiệt độ phòng [4]. Các tính chất điện tử của MoS_2 cũng phụ thuộc mạnh vào số lớp, khiến nó phù hợp cho các ứng dụng đa dạng trong lĩnh vực quang điện tử [5].

Tính chất truyền dẫn quang-từ là một trong các đặc trưng quan trọng của vật liệu. Đặc biệt, nghiên cứu các quá trình hấp thụ cộng hưởng có vai trò quan trọng cho các ứng dụng trong lĩnh vực quang-điện tử. Các hiệu ứng cộng hưởng (cộng hưởng cyclotron, cộng hưởng từ-phonon, cộng hưởng electron-phonon) cung cấp các thông tin về cấu trúc vật liệu và cơ chế tán xạ của hạt tải bên trong vật liệu. Chẳng hạn, từ việc phân tích phổ hấp thụ cộng hưởng, ta có thể thu được các thông số như khối lượng hiệu dụng của hạt tải, khoảng cách giữa các mức năng lượng Landau, thừa số Lande (g), v.v. Mặt khác, ở nhiệt độ thấp, tương tác điện tử – tạp chất là nổi trội so với các tương tác khác, ảnh hưởng của tương tác này lên sự dịch chuyển trạng thái điện tử do hấp thụ sóng điện từ là rất đáng kể. Do vậy, nghiên cứu ảnh hưởng của tương tác điện tử – tạp chất lên quá trình hấp thụ quang-từ trong vật liệu giúp hiểu rõ hơn về cơ chế và cường độ tán xạ điện tử – tạp chất, chẳng hạn như sự mở rộng các mức Landau và xác suất dịch chuyển trạng thái của điện tử. Các nghiên cứu về sự hấp thụ quang-từ dưới ảnh hưởng của tương tác điện tử – tạp chất đã được tiến hành gần đây trong graphene [6] và silicene [7].

Trong công trình này, chúng tôi tiến hành khảo sát hệ số hấp thụ sóng điện từ trong MoS_2 đơn lớp được đặt trong một từ trường vuông góc dưới ảnh hưởng của tương tác điện tử – tạp chất. Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn để tính toán hệ số hấp thụ của quá trình hấp thụ một và hai photon. Các kết quả giải tích được tính số với các tham số cụ thể để thấy được sự phụ thuộc của phổ hấp thụ vào năng lượng photon, từ trường và nhiệt độ của hệ. Bài báo được cấu trúc như sau: Trong mục 2, chúng tôi giới thiệu biểu thức của hệ số hấp thụ sóng điện từ trong MoS_2 đơn lớp đặt trong từ trường vuông góc. Các kết quả tính số và thảo luận được trình bày ở mục 3. Cuối cùng, một số kết luận quan trọng được đưa ra ở mục 4.

2. BIỂU THỨC GIẢI TÍCH CỦA HỆ SỐ HẤP THỤ SÓNG ĐIỆN TỪ TRONG MoS_2 ĐƠN LỚP DƯỚI ẢNH HƯỞNG CỦA TƯƠNG TÁC ĐIỆN TỬ – TẠP CHẤT

Trong tính toán này, chúng tôi xét một đơn lớp tinh thể MoS_2 với mặt phẳng mạng được giả thiết nằm trong mặt phẳng (x, y) . Đặt một từ trường tĩnh, đều (\vec{B}) vuông góc với lớp MoS_2 , đồng thời chọn thế vec-tơ tương ứng của từ trường trong chuẩn Landau là $\vec{A} = (-By, 0, 0)$. Khi đó, biểu thức của năng lượng hạt tải ở trạng thái $|\alpha\rangle$ được cho bởi [8]

$$E_\alpha \equiv E_{n,s,\eta,\tau} = s\tau\bar{\lambda} + \eta\sqrt{\bar{\Delta}_{s\tau}^2 + n(\hbar\omega_c)^2}, \quad (1)$$

với chỉ số mức Landau $n = 1, 2, 3, \dots$, $\bar{\Delta}_{s\tau} = \bar{\Delta} - s\tau\bar{\lambda}$, $\bar{\Delta} = \Delta/2$, $\bar{\lambda} = \lambda/2$, trong đó Δ và λ tương ứng là độ rộng vùng cấm và năng lượng tương tác spin-quỹ đạo (spin-orbit coupling) trong đơn lớp MoS_2 , $\tau = 1$ (-1) đối với thung lũng K (K'), chỉ số vùng $\eta = 1$ (-1) mô tả vùng dẫn (vùng hóa trị), $s = 1$ (-1) tương ứng với

spin hướng lên (xuống) và năng lượng cyclotron $\hbar\omega_c = at\sqrt{2}/a_c$ với $a_c = (\hbar/eB)^{1/2}$, t và a lần lượt là bán kính quỹ đạo điện tử, tích phân xen phủ (hopping integral) và hằng số mạng. Năng lượng hạt tải đối với trường hợp $n = 0$ được tính toán độc lập và cho bởi

$$E_{0,s,\tau} = -\tau(\bar{\Delta} - s\bar{\lambda}) + s\bar{\lambda}. \quad (2)$$

Ta có thể khai triển căn bậc hai trong công thức (1) và giản ước để thu được biểu thức có dạng đơn giản hơn cho năng lượng

$$E_{n,s,\eta,\tau} = (1 - \eta)s\tau\bar{\lambda} + \eta\bar{\Delta} + n\eta\frac{\hbar^2\omega_c^2}{2\bar{\Delta}_{s\tau}}, \quad (3)$$

trong đó chúng tôi đã sử dụng tính chất $\hbar\omega_c \ll \bar{\Delta}_{s\tau}$. Biểu thức (3) lúc này cho thấy sự phụ thuộc tuyến tính của các mức năng lượng Landau trong đơn lớp MoS₂ vào cường độ từ trường B và chỉ số mức n , tương tự như đối với giếng lượng tử và siêu mạng bán dẫn hai chiều truyền thống.

Các hàm riêng tương ứng, bao gồm cả mức không ($n = 0$), đối với thung lũng K và K' lần lượt được cho bởi [8]

$$\psi_{n,s}^{\eta,+1}(r, k_x) = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{\Theta_{n,s}^{\eta,+1}}} \begin{pmatrix} \Lambda_{n,s}^{\eta,+1} \phi_{n-1}(y - y_0) \\ \phi_n(y - y_0) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$\psi_{n,s}^{\eta,-1}(r, k_x) = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{\Theta_{n,s}^{\eta,-1}}} \begin{pmatrix} \phi_n(y - y_0) \\ \Lambda_{n,s}^{\eta,-1} \phi_{n-1}(y - y_0) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

trong đó k_x là thành phần theo phương x của vec-tơ sóng của điện tử, $\Theta_{n,s}^{\eta,\tau} = (\Lambda_{n,s}^{\eta,\tau})^2 + 1$, $\Lambda_{n,s}^{\eta,\tau} = \sqrt{n}\hbar\omega_c/(\bar{\Delta} - \tau s\bar{\lambda}) - \eta\tau\sqrt{(\bar{\Delta} - \tau s\bar{\lambda})^2 + n\hbar^2\omega_c^2}$ và $\phi_n(y - y_0)$ là các hàm riêng của các dao động tử điều hòa lượng tử có tâm tại $y_0 = a_c^2 k_x$, được cho bởi

$$\phi_n(y - y_0) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! a_c \sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2a_c^2}\right] H_n\left(\frac{y - y_0}{a_c}\right), \quad (6)$$

với $H_n\left(\frac{y - y_0}{a_c}\right)$ là đa thức Hermite bậc n đối số $(y - y_0)/a_c$.

Bây giờ ta giả sử các tạp chất được phân bố một cách ngẫu nhiên, đồng nhất trong mặt phẳng hai chiều của mạng tinh thể. Khi đó, xác suất chuyển dời của điện tử giữa các trạng thái $|\alpha\rangle$ và $|\alpha'\rangle$ gây ra bởi tán xạ điện tử - tạp chất đối với quá trình hấp thụ ℓ photon được cho bởi biểu thức [9]

$$W_{\alpha\alpha'}^\ell = \frac{2\pi n_i}{\hbar S_0} \sum_k \sum_{\ell=1}^{\infty} |U(q)|^2 |J_{\alpha\alpha'}(q)|^2 \ell J_\ell^2(\alpha_0 q) \delta_{k_x, k_x' + qx} \delta(E_{\alpha'} - E_\alpha - \ell\hbar\omega), \quad (7)$$

trong đó n_i là nồng độ tạp chất; S_0 là diện tích chuẩn hoá của mẫu; α_0 là tham số mặc áo (dressing parameter); $J_\ell(x)$ hàm Bessel của biến số x ; α_0 là tham số mặc áo;

$U(q) = U_0/k_s$, $U_0 = e^2/2\epsilon_r\epsilon$ với ϵ_r and ϵ lần lượt là hằng số điện môi cao tần và hằng số điện môi, k_s là nghịch đảo độ dài chắn; $J_{\alpha\alpha'}(q)$ là thừa số dạng được cho bởi

$$|J_{\alpha\alpha'}(u)|^2 = \frac{\delta_{s,s'}}{\Theta_{n,s}^{\eta,\tau}\Theta_{n',s'}^{\eta',\tau}} \frac{n_1!}{n_2!} u^{n_2-n_1} e^{-u} \left[\Lambda_{n,s}^{\eta,\tau} \Lambda_{n',s'}^{\eta',\tau} \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} L_{n_1-1}^{n_2-n_1}(u) + L_{n_1}^{n_2-n_1}(u) \right]^2, \quad (8)$$

với $u = a_c^2 q^2/2$, $L_n^m(u)$ là đa thức Laguerre liên kết, $n_1 = \min(n, n')$ và $n_2 = \max(n, n')$.

Hệ số hấp thụ sóng điện từ liên hệ với xác suất chuyển dời theo biểu thức [9]

$$\Gamma = \frac{\sqrt{\epsilon}}{cN_f} \sum_{\alpha,\alpha'} f(E_\alpha)(1 - f(E_{\alpha'})) W_{\alpha\alpha'}^\ell, \quad (9)$$

trong đó $f(E_\alpha)$ là hàm phân bố Fermi-Dirac của điện tử, N_f là số photon tới với năng lượng $\hbar\omega$, c là tốc độ ánh sáng trong chân không. Tương tác điện tử – tạp chất có thể làm cho các điện tử thay đổi quỹ đạo ban đầu của chúng và đóng góp vào hệ số hấp thụ. Ta có thể đánh giá sự đóng góp này bằng cách chuyển đổi tổng theo q, α, α' thành tích phân

$$\sum_q \rightarrow \frac{S_0}{(2\pi a_c)^2} \int_0^\infty du \int_0^{2\pi} d\varphi, \quad (10)$$

$$\sum_{\alpha/\alpha'} \rightarrow \sum_{n,s,\eta,\tau} / \sum_{n',s',\eta',\tau'} \frac{L_x}{2\pi} \int_{-L_y/2a_c^2}^{L_y/2a_c^2} dk_x = \frac{S_0}{2\pi a_c^2} \sum_{n,s,\eta,\tau} / \sum_{n',s',\eta',\tau'}. \quad (11)$$

Sau đây, chúng tôi sẽ xét quá trình hấp thụ một ($\ell = 1$) và hai ($\ell = 2$) photon. Từ biểu thức định nghĩa của hàm Bessel

$$J_\ell(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m + \ell + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\ell}, \quad (12)$$

ta có

$$J_1^2(\alpha_0 q) = \left(\frac{\alpha_0 q}{2}\right)^2, \quad J_2^2(\alpha_0 q) = \frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_0 q}{2}\right)^4. \quad (13)$$

Để thu được biểu thức tường minh cho hệ số hấp thụ, ta cần tính các tích phân theo u , được ký hiệu bởi I_1 và I_2 như sau:

$$I_1 = \frac{S_0 2\pi}{(2\pi a_c)^2} \int_0^\infty du \left(\frac{U_0}{k_s}\right)^2 \left(\frac{\alpha_0 q}{2}\right)^2 \frac{\delta_{ss'}}{\theta_{n,s}^{\eta,\tau} \theta_{n',s'}^{\eta',\tau}} \frac{n_1!}{n_2!} u^{n_2-n_1} e^{-u} \\ \times \left[\Lambda_{n,s}^{\eta,\tau} \Lambda_{n',s'}^{\eta',\tau} \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} L_{n_1-1}^{n_2-n_1}(u) + L_{n_1}^{n_2-n_1}(u) \right]^2 \delta(E_{n',s',\eta',\tau} - E_{n,s,\eta,\tau} - \hbar\omega), \quad (14)$$

$$\begin{aligned}
 I_2 &= \frac{S_0 2\pi}{(2\pi a_c)^2} \int_0^\infty du \left(\frac{U_0}{k_s} \right)^2 \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_0 q}{2} \right)^4 \right) \frac{\delta_{ss'}}{\theta_{ns}^{\eta\tau} \theta_{n's'}^{\eta'\tau}} \frac{n_1!}{n_2!} u^{n_2-n_1} e^{-u} \\
 &\times \left[\Lambda_{ns}^{\eta\tau} \Lambda_{n's'}^{\eta'\tau} \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} L_{n_1-1}^{n_2-n_1}(u) + L_{n_1}^{n_2-n_1}(u) \right]^2 \delta(E_{n',s',\eta',\tau} - E_{n,s,\eta,\tau} - 2\hbar\omega). \quad (15)
 \end{aligned}$$

Sử dụng tính chất trực giao của các đa thức Laguerre liên kết, ta tính được các số hạng ứng với quá trình hấp thụ một photon và hai photon như sau:

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \frac{S_0}{4\pi a_c^4} \left(\frac{U_0 \alpha_0}{k_s} \right)^2 \frac{\delta_{ss'}}{\theta_{ns}^{\eta\tau} \theta_{n's'}^{\eta'\tau}} \left[\left(\Lambda_{ns}^{\eta\tau} \Lambda_{n's'}^{\eta'\tau} \right)^2 (n_1 + n_2 - 1) \right. \\
 &\quad \left. - 2\Lambda_{ns}^{\eta\tau} \Lambda_{n's'}^{\eta'\tau} \sqrt{n_1 n_2} + (n_1 + n_2 + 1) \right] \delta(E_{n',s',\eta',\tau} - E_{n,s,\eta,\tau} - \hbar\omega) \quad (16)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_2 &= \frac{S_0 U_0^2 \alpha_0^4}{16\pi a_c^6 k_s^2} \frac{\delta_{ss'}}{\theta_{ns}^{\eta\tau} \theta_{n's'}^{\eta'\tau}} \left\{ \left(\Lambda_{ns}^{\eta\tau} \Lambda_{n's'}^{\eta'\tau} \right)^2 [2 + 6n_1(n_1 - 1) + (n_2 - n_1) \right. \\
 &\quad \times ((n_2 - n_1) + 3(2n_1 - 1))] - 4\Lambda_{ns}^{\eta\tau} \Lambda_{n's'}^{\eta'\tau} \sqrt{n_1 n_2} (n_2 + n_1) + [2 + 6n_1(n_1 + 1)] \\
 &\quad \left. + (n_2 - n_1)((n_2 - n_1) + 3(2n_1 + 1)) \right\} \times \delta(E_{n',s',\eta',\tau} - E_{n,s,\eta,\tau} - 2\hbar\omega). \quad (17)
 \end{aligned}$$

Từ các kết quả tính được ở (16) và (17) ta thu được biểu thức cho hệ số hấp thụ cho quá trình hấp thụ một và hai photon trong MoS₂ đơn lớp dưới ảnh hưởng của tương tác điện tử - tạp chất như sau:

$$\Gamma = \frac{2\sqrt{\varepsilon\pi}n_i}{cN_f\hbar S_0} \sum_{n,n',s,s'} \sum_{\eta,\eta',\tau} f(E_{ns\eta\tau}) [1 - f(E_{n's'\eta'\tau})] [I_1 + I_2]. \quad (18)$$

Để tránh sự phân kỳ khi đối số của các hàm delta bằng không, ta có thể thay các hàm này bằng hàm Lorentz do tán xạ bởi các tạp chất tích điện, được đưa ra bởi biểu thức

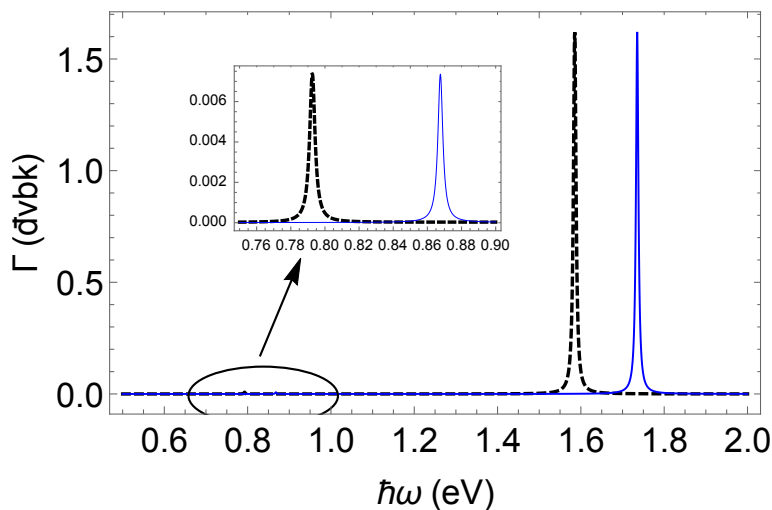
$$\delta(Z_{\alpha\alpha'}) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{\alpha\alpha'}}{(Z_{\alpha\alpha'})^2 + (\gamma_{\alpha\alpha'})^2}, \quad (19)$$

với

$$\gamma_{\alpha\alpha'}^2 = \gamma_{nn'ss'\eta\eta'\tau}^2 = \sum_q n_i |U(q)|^2 |J_{ns\eta\tau n's'\eta'\tau}(q)|^2 = \frac{S_0 n_i U_0^2}{2\pi a_c^2 k_s^2} \frac{\delta_{ss'}}{\theta_{ns}^{\eta\tau} \theta_{n's'}^{\eta'\tau}} \left[\left(\Lambda_{ns}^{\eta\tau} \Lambda_{n's'}^{\eta'\tau} \right)^2 + 1 \right]. \quad (20)$$

3. KẾT QUẢ TÍNH SỐ VÀ THẢO LUẬN

Trong mục này, chúng tôi sẽ thực hiện tính số kết quả giải tích vừa thu được ở trên để làm rõ một số đặc trưng vật lý của hệ số hấp thụ sóng điện từ trong MoS₂ đơn lớp. Các tham số sử dụng để tính toán số được cho như sau: $n_i = 5 \times 10^9 \text{ m}^{-2}$, $a = 3,193$



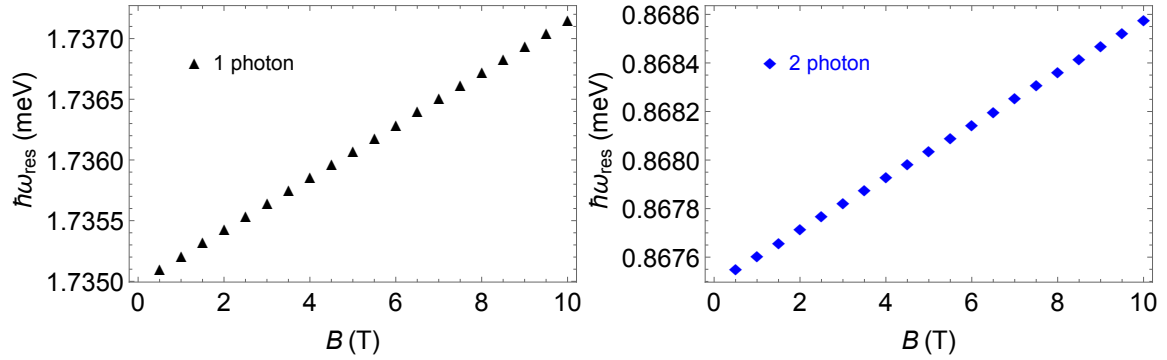
Hình 1: Sự phụ thuộc của hệ số hấp thụ vào năng lượng photon tại từ trường $B=1\text{T}$, nhiệt độ $T = 4\text{ K}$ ứng với $s=1$ (đường đứt nét) và $s = -1$ (đường liền nét). Hình nhỏ bên trong là hệ số hấp thụ ứng với năng lượng photon trong khoảng từ 0,74 eV đến 0,9 eV nhằm giúp ta nhìn thấy rõ các đỉnh cộng hưởng đối với quá trình hấp thụ hai photon, do các đỉnh này thấp hơn hàng trăm lần so với các đỉnh cộng hưởng ứng với quá trình hấp thụ một photon.

A, $t = 1,1\text{ eV}$, độ rộng vùng cấm $\Delta = 1,66\text{ eV}$, năng lượng tương tác spin-quỹ đạo $\lambda = 75\text{ meV}$, mật độ khối lượng hai chiều $\rho = 3,1 \times 10^{-7}\text{ g.cm}^{-2}$ và chỉ xét các dịch chuyển của điện tử từ trạng thái $|0, s, 1, 1\rangle$ sang trạng thái $|1, s, 1, 1\rangle$.

Hình 1 mô tả sự phụ thuộc của hệ số hấp thụ vào năng lượng photon tại từ trường $B = 1\text{ T}$, nhiệt độ $T = 4\text{ K}$ ứng với $s = 1$ (đường đứt nét) và $s = -1$ (đường liền nét). Từ phổ hấp thụ này có thể thấy mỗi đường cong có hai đỉnh cực đại ứng với các giá trị khác nhau của năng lượng photon. Bằng phân tích số, chúng tôi rút ra được ý nghĩa của các cực đại này như sau: Với trường hợp $s = 1$, đỉnh thứ nhất định vị tại giá trị năng lượng photon $\hbar\omega = 0,7926\text{ eV}$. Giá trị này thoả mãn điều kiện $E_{1,1,1,1} - E_{0,1,1,1} = 2\hbar\omega$. Đây chính là điều kiện cộng hưởng cyclotron mô tả dịch chuyển của điện tử giữa hai mức Landau $n = 0$ và $n' = 1$ bằng cách hấp thụ hai photon. Do vậy, đỉnh cực đại này có thể gọi là đỉnh cộng hưởng cyclotron hay cyclotron-tạp chất do có đóng góp của tương tác điện tử - tạp chất vào xác suất dịch chuyển điện tử. Đỉnh thứ hai định vị tại giá trị năng lượng photon $\hbar\omega = 1,5852\text{ eV}$, giá trị này thoả mãn điều kiện $E_{1,1,1,1} - E_{0,1,1,1} = \hbar\omega$. Đỉnh này mô tả dịch chuyển của điện tử giữa hai mức năng lượng nói trên bằng cách hấp thụ một photon. Các điều kiện dò tìm cộng hưởng cyclotron có công thức chung $\Delta E = \ell\hbar\omega$ với ΔE là hiệu năng lượng của điện tử giữa hai trạng thái đầu và cuối. $\ell = 1, 2$ tương ứng với quá trình hấp thụ một và hai photon. Ta có thể giải thích hoàn toàn tương tự cho

các đỉnh cộng hưởng trong trường hợp $s = -1$. Ngoài ra, so sánh độ cao của các đỉnh cộng hưởng ứng với quá trình hấp thụ hai photon (hình nhỏ bên trong Hình 1) và các đỉnh cộng hưởng ứng với quá trình hấp thụ một photon ta thấy các đỉnh cộng hưởng ứng với quá trình hấp thụ một photon cao gấp hàng trăm lần so với các đỉnh cộng hưởng ứng với quá trình hấp thụ hai photon. Điều đó cho thấy đóng góp của các quá trình hai photon là nhỏ so với các quá trình một photon nhưng vẫn có thể quan sát được.

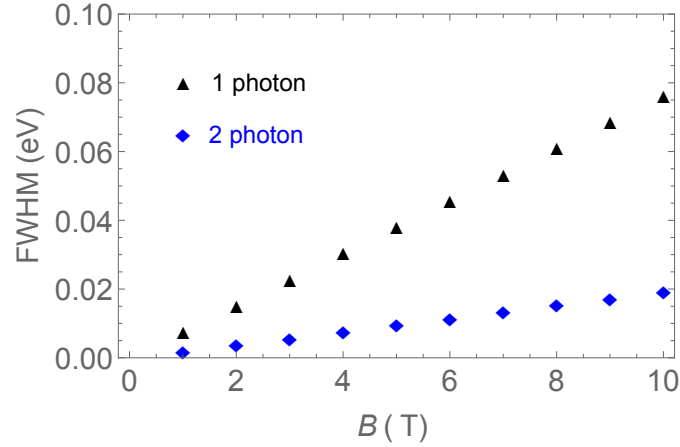
Để thấy rõ ảnh hưởng của từ trường lên vị trí của các đỉnh cộng hưởng, trên hình 2, chúng tôi khảo sát sự phụ thuộc của vị trí đỉnh cộng hưởng vào từ trường B ứng với quá trình một photon (hình bên trái) và quá trình hai photon (hình bên phải) tại nhiệt độ $T = 4$ K.



Hình 2: Sự phụ thuộc của vị trí đỉnh cộng hưởng (năng lượng cộng hưởng) vào từ trường B đối với quá trình hấp thụ một photon (hình bên trái) và quá trình hấp thụ hai photon (hình bên phải) tại nhiệt độ $T = 4$ K.

Hình 2 mô tả sự phụ thuộc của năng lượng photon tại các đỉnh cộng hưởng (gọi tắt là *năng lượng cộng hưởng*) vào từ trường đối với dịch chuyển điện tử từ trạng thái $|0, 1, 1, 1\rangle$ sang trạng thái $|1, 1, 1, 1\rangle$ khi từ trường B có giá trị tăng dần từ 1 T đến 10 T. Ta thấy rằng năng lượng cộng hưởng tăng khi từ trường tăng theo quy luật $\hbar\omega_{res} \propto B$. Quy luật này hoàn toàn phù hợp với điều kiện cộng hưởng cyclotron do các mức Landau trong MoS₂ tỉ lệ với B , đồng thời giống với quy luật trong giếng lượng tử và siêu mạng bán dẫn chuẩn hai chiều, và khác biệt với quy luật trong graphene [6] và silicene [7].

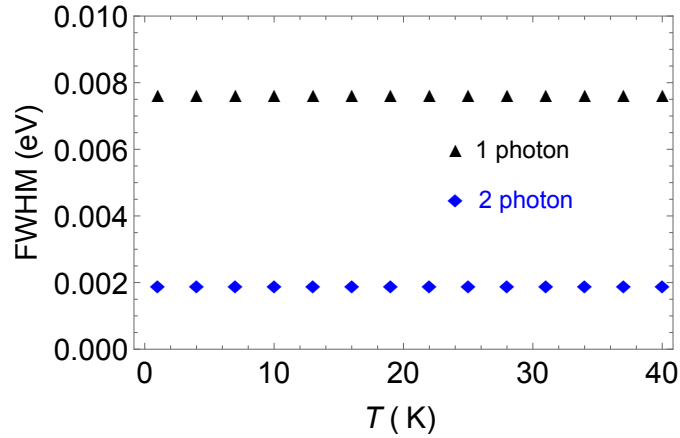
Khi nghiên cứu các đỉnh hấp thụ cộng hưởng, ngoài vị trí các đỉnh thì độ rộng vạch phổ cộng hưởng (FWHM) là một thông số quan trọng giúp ta đánh giá xác suất dịch chuyển trạng thái của điện tử do tương tác với photon và các hạt khác trong mạng tinh thể (tạp chất, phonon,...). Do vậy, chúng tôi tiến hành tính toán FWHM sử dụng chương trình tính số trên máy tính và khảo sát ảnh hưởng của từ trường và nhiệt độ lên FWHM. Các đỉnh cộng hưởng ứng với quá trình hấp thụ một photon (thoả mãn điều kiện $E_{1,1,1,1} - E_{0,1,1,1} = \hbar\omega$) và hấp thụ hai photon (thoả mãn điều



Hình 3: Sự phụ thuộc của độ rộng vạch phổ FWHM vào từ trường B tại nhiệt độ $T = 4$ K và $s = 1$ đối với quá trình hấp thụ một photon (hình tam giác) và quá trình hấp thụ hai photon (hình thoi).

kiện $E_{1,1,1,1} - E_{0,1,1,1} = 2\hbar\omega$) đều được xem xét. Hình 3 mô tả sự phụ thuộc của độ rộng vạch phổ FWHM vào từ trường B tại nhiệt độ $T = 1$ K, $s = 1$ với quá trình hấp thụ một photon (hình tam giác) và quá trình hấp thụ hai photon (hình thoi). Từ hình vẽ ta thấy độ rộng vạch phổ hấp thụ tăng theo từ trường B . Điều này có thể giải thích là do khi cường độ từ trường tăng thì bán kính quỹ đạo cyclotron của điện tử giảm, làm tăng khả năng giam giữ điện tử, dẫn đến xác suất tán xạ điện tử – tạp chất cũng tăng. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với các kết quả đã quan sát trong graphene [6] và silicene [7] bởi cùng một phương pháp.

Tương tự, hình 4 mô tả sự phụ thuộc của độ rộng vạch phổ FWHM vào nhiệt độ T tại từ trường $B = 1$ T, $s = 1$ ứng với quá trình một photon (hình tam giác) và quá trình hai photon (hình thoi). Ta thấy rằng khi tăng nhiệt độ trong khoảng từ 0,1 K đến 40 K, FWHM hầu như không thay đổi (có thay đổi nhưng rất nhỏ). Điều này cho thấy tác động nhiệt không có đóng góp đáng kể đối với tán xạ điện tử – tạp chất trong MoS₂ đơn lớp. Đây là một đặc điểm quan trọng và cần được nghiên cứu bằng các quan sát thực nghiệm để đánh giá và so sánh chi tiết ảnh hưởng của nhiệt độ lên cơ chế cũng như cường độ tương tác hạt tải-tạp chất trong vật liệu này. Sự phụ thuộc rất yếu của FWHM vào nhiệt độ cũng đã được quan sát thấy trong graphene đơn lớp [10] cho thấy sự giống nhau về ảnh hưởng của nhiệt độ lên các tính chất hấp thụ quang-từ của graphene và MoS₂ đơn lớp dưới ảnh hưởng của tán xạ điện tử – tạp chất. Ngoài ra, Hình 3 và Hình 4 cũng cho thấy FWHM đối với quá trình hấp thụ hai photon luôn luôn nhỏ hơn FWHM đối với quá trình hấp thụ một photon. Chẳng hạn, FWHM tại $B = 1$ T có giá trị xấp xỉ 0,00786 eV đối với quá trình hấp thụ một photon và xấp xỉ 0,00197 eV đối với quá trình hấp thụ hai photon. Đặc điểm này một lần nữa cho thấy đóng góp của quá trình hấp thụ hai photon vào xác



Hình 4: Sự phụ thuộc của độ rộng vạch phổ FWHM vào nhiệt độ T tại từ trường $B=1$ T, $s = 1$ đối với quá trình hấp thụ một photon (hình tam giác) và quá trình hấp thụ hai photon (hình thoi).

suất dịch chuyển trạng thái điện tử là nhỏ hơn so với quá trình hấp thụ một photon. Tuy nhiên, đóng góp của các quá trình hai photon là đáng kể và không thể bỏ qua khi nghiên cứu các hiện tượng liên quan đến hấp thụ quang trong các vật liệu thấp chiều.

4. KẾT LUẬN

Trong công trình này, chúng tôi đã nghiên cứu quá trình hấp thụ quang-từ trong MoS₂ đơn lớp đặt trong từ trường tĩnh vuông góc dưới ảnh hưởng của tương tác điện tử – tạp chất. Kết quả khảo sát sự phụ thuộc của hệ số hấp thụ quang-từ vào năng lượng photon cho thấy sự xuất hiện của các đỉnh cộng hưởng cyclotron trong phổ hấp thụ. Năng lượng photon cộng hưởng tỷ lệ thuận với cường độ từ trường. Đồng thời, độ rộng vạch phổ cộng hưởng cyclotron-tạp chất tăng một cách tuyến tính khi cường độ từ trường tăng và hầu như không thay đổi theo nhiệt độ. Điều đó cho thấy xác suất dịch chuyển trạng thái của điện tử do hấp thụ cộng hưởng phụ thuộc mạnh vào cường độ từ trường và ít bị ảnh hưởng bởi nhiệt độ. Quá trình hấp thụ hai photon cho đóng góp vào phổ hấp thụ yếu hơn so với quá trình hấp thụ một photon nhưng đáng kể và có vai trò quan trọng trong nghiên cứu các quá trình hấp thụ nhiều photon và lĩnh vực quang phi tuyến. Các kết quả trên là cơ sở cho các nghiên cứu ứng dụng của vật liệu mới và chế tạo các thiết bị quang-điện tử nano.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] M.J. Allen, V.C. Tung, R.B. Kaner (2010), "Honeycomb carbon: a review of graphene", *Chemical Reviews* 110, pp. 132–145.

- [2] X. Li, H. Zhu (2015), "Two-dimensional MoS₂: properties, preparation, and applications", *Journal of Materiomics* 1, pp. 33–44.
- [3] R. Ganatra and Q. Zhang (2014), "Few-layer MoS₂: a promising layered semiconductor", *ACS Nano* 8, pp. 4074–4099.
- [4] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, A. Kis (2011), "Single-layer MoS₂ transistors", *Nature Nanotechnology* 6, pp. 147–150.
- [5] X. Zhang, N. Biekert, S. Choi, C.H. Naylor, C. De-Eknamkul, W. Huang, X. Zhang, X. Zheng, D. Wang, A.T.C. Johnson, E. Cubukcu (2018), "Dynamic photochemical and optoelectronic control of photonic Fano resonances via monolayer MoS₂ trions", *Nano Letters* 18, pp. 957–963.
- [6] Pham T. Huong, Le T. Hoa, Van Thinh Pham, Hoang D. Long, Nguyen N. Hieu, Huynh V. Phuc, Chuong V. Nguyen, Bui D. Hoi (2020), "Effects of charged impurity scattering and substrate on the magneto-optical absorption properties in gapped monolayer graphene", *Physica E* 121, pp. 114149–114154.
- [7] N. V. Q. Binh, Nguyen N. Hieu, Chuong V. Nguyen, Huynh V. Phuc, Bui D. Hoi, Le T.T. Phuong, Tran C. Phong (2019), "Nonlinear optical absorption and cyclotron-impurity resonance in monolayer silicene", *Physica E* 105, pp. 168–173.
- [8] C. M. Wang and X. L. Lei (2015), "Linear magnetotransport in monolayer MoS₂", *Physical Review B* 92, pp. 125303-1–125303-10.
- [9] Edward R. Generazio and Harold N. Spector (1979), "Free carrier absorption in quantizing magnetic fields", *Physical Review B* 20, pp. 5162–5167.
- [10] Bui Dinh Hoi, Le Thi Thu Phuong, Tran Cong Phong (2018), "Magneto-optical absorption and cyclotron-phonon resonance in graphene monolayer", *Journal of Applied Physics* 123, pp. 094303-1–094303-6.

Title: ABSORPTION COEFFICIENT OF AN ELECTROMAGNETIC WAVE IN MONOLAYER MoS₂ UNDER THE EFFECT OF ELECTRON - IMPURITY SCATTERING

Abstract: In this work, we investigate the absorption of an electromagnetic wave in a MoS₂ monolayer subjected to a perpendicular static magnetic field. The absorption coefficient is calculated by the perturbation theory taking account of the electron-impurity scattering. The absorption spectrum shows the appearance of cyclotron-impurity resonant peaks for one and two photon absorption. The position of the resonant peaks (the resonant photon energy) is linearly proportional to the magnetic field strength, while it is not affected by the temperature. In addition, the full width at half maximum of the resonant peaks increases linearly with the magnetic field but almost does not change with temperature. The contribution of two-photon absorption processes is much smaller than that of one-photon absorption ones but is significant and needs to be considered when studying nonlinear optics.

Keywords: absorption coefficient, cyclotron resonance, electron – impurity scattering.