

ĐẶC TRƯNG HẤP PHỤ KHÍ ĐỘC NH₃ TRÊN NỀN VẬT LIỆU BÁN DẪN HAI CHIỀU MoSe₂

SV. Phan Anh Tú¹, ThS. Nguyễn Đại Hùng², SV. Lê Thảo Uyên¹,
SV. Bùi Ánh Dương¹, PGS.TS. Trần Quang Huy¹

¹Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2

²Trường Đại học Hòa Bình

Tác giả liên hệ: tranquanghuy@hpu2.edu.vn.

Ngày nhận: 19/9/2025

Ngày nhận bản sửa: 25/9/2025

Ngày duyệt đăng: 24/10/2025

DOI: 10.71192/648632ghjqye

Tóm tắt

Trong bài viết này, chúng tôi nghiên cứu cơ chế hấp phụ của khí NH₃ trên nền vật liệu MoSe₂, bằng cách phân tích cấu trúc hình học, góc liên kết, độ dài liên kết, độ cao theo trục z của các nguyên tử Se và Mo, so sánh cấu trúc hình học của đế và khí trước và sau khi hấp phụ. Dựa trên các kết quả tính toán, chúng tôi cấu trúc vật liệu MoSe₂ đã có sự thay đổi trạng thái, phân tích điện tích Bader, tính toán các tham số hấp phụ như năng lượng hấp phụ, khoảng cách giữa khí và đế, thời gian hồi phục, độ dịch chuyển điện tích, chúng tôi phân tích sự biến đổi và sự truyền điện tích, và từ đó, giải thích được cơ chế hấp phụ của vật liệu 2 chiều MoSe₂ đối với khí NH₃ và thấy được rằng sự hấp phụ khí NH₃ trên nền vật liệu MoSe₂ là hấp phụ vật lý, thời gian hồi phục nhanh chóng, rất có tiềm năng ứng dụng làm vật liệu cảm biến khí NH₃.

Từ khóa: Hấp phụ, khí độc NH₃, vật liệu bán dẫn 2 chiều, vật liệu mới MoSe₂.

NH₃ Gas Adsorption Characteristics on Two-Dimensional Semiconductor MoSe₂

Phan Anh Tu¹, Nguyen Dai Hung, MSc. ², Le Thao Uyen¹, Bui Anh Duong¹,
Assoc. Prof., Dr. Tran Quang Huy¹

¹Hanoi Pedagogical University 2

²Hoa Binh University

Corresponding Author: tranquanghuy@hpu2.edu.vn

Abstract

In this paper, we explore the adsorption mechanism of NH₃ gas on MoSe₂ through a comprehensive analysis of the material's geometric features, including bond angles, bond lengths, and the vertical positions of Se and Mo atoms. We compare the structural arrangements of both the substrate and the gas pre- and post-adsorption to discern any alterations. Based on the computational results, we found that the structure of MoSe₂ undergoes noticeable changes upon NH₃ adsorption. Furthermore, by examining the band structure, density of states, Bader charge analysis, and calculating adsorption parameters such as adsorption energy, gas-substrate distance, recovery time, and charge transfer, we analyzed the variations and charge transfer processes, thereby elucidating the adsorption mechanism of NH₃ on two-dimensional MoSe₂. Our findings indicate that NH₃ adsorption on MoSe₂ is physisorption with a rapid recovery time, highlighting its great potential as a candidate material for NH₃ gas sensing applications.

Keywords: Adsorption, toxic gas NH₃, two-dimensional semiconductor, material MoSe₂.

1. Đặt vấn đề

Các hoạt động công nghiệp của con người ngày càng được mở rộng với quy mô rất lớn. Đi kèm với lợi ích về kinh tế, mang lại các sản phẩm tốt cho con người thì các nhà máy sản xuất công nghiệp cũng đã sản sinh ra rất nhiều chất độc cho con người như là CO₂, CO, NO₂, SO₂... Amoniac (NH₃) cũng là một sản phẩm từ công nghiệp, rất có hại đối với con người

và môi trường. Nó có thể gây ảnh hưởng đến đường hô hấp, viêm phế quản, bỏng mắt, bỏng da khi tiếp xúc... Nồng độ của NH₃ từ 20ppm đã gây khó chịu đối với con người và cũng là giới hạn cho phép lượng nồng độ NH₃ có trong không khí. Khi nồng độ NH₃ vượt quá 2000ppm có thể gây tử vong. Do đó, việc cần một cảm biến khí với độ nhạy cao, thời gian sử dụng dài để phát hiện khí NH₃ là rất cần thiết, đặc biệt

ở những nhà máy, khu công nghiệp mà sản xuất NH_3 .

Trong những năm gần đây, ứng dụng vật liệu 2 chiều làm cảm biến khí đã và đang được nghiên cứu rộng rãi bởi các ưu điểm của nó như có thể hoạt động ngay ở cả nhiệt độ phòng, năng lượng tiêu thụ ít và đặc biệt là rất an toàn. Trong sự nỗ lực không ngừng, các nghiên cứu trước về sự hấp phụ khí trên vật liệu 2D MoSe_2 còn ở mức sơ khai. Về thực nghiệm, Late et al đã báo cáo singlelayer MoSe_2 là một cảm biến nhạy với khí NH_3 (Late et al., 2014). Baek và cộng sự đã nghiên cứu thực nghiệm bóng bán dẫn hiệu ứng trường MoSe_2 đa lớp làm cảm biến khí NO_2 (Baek et al., 2017). Tuy nhiên, theo hiểu biết của chúng tôi, trong các công trình này, cơ chế hấp phụ khí của MoSe_2 vẫn chưa được hiểu biết một cách rõ ràng. Đồng thời, các ảnh hưởng của sự hấp phụ lên cấu trúc điện tử và charge transfer chưa được khảo sát chi tiết. Việc lựa chọn vật liệu thích hợp cho cảm biến khí rất quan trọng trong việc tăng độ nhạy, độ chọn lọc và độ ổn định của thiết bị. Vấn đề chỉ có thể được giải quyết nếu cơ chế hấp phụ khí được khám phá một cách rõ ràng. Trên cơ sở đó, trong bài viết này, bằng cách tối ưu hóa cân thận vật liệu 2 chiều MoSe_2 , chúng tôi đã nghiên cứu cơ chế hấp phụ của vật liệu đối với khí NH_3 . Dựa vào cấu trúc hình học của đế, so sánh sự khác biệt trước và sau khi hấp phụ khí NH_3 của MoSe_2 , tính toán chi tiết về lượng điện tích bị mất đi, năng lượng hấp phụ, thời gian phục hồi, từ đó, chúng tôi giải thích về cơ chế truyền điện tích, đặc tính hấp phụ của vật liệu MoSe_2 .

2. Phương pháp tính toán

Các tính toán của chúng tôi được thực hiện trong khuôn khổ lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) bằng phương pháp PAW (projector-augmented wave) (Kresse & Joubert, 1999) sử dụng gói mô phỏng

từ nguyên lý ban đầu VASP (Kresse & Furthmüller, 1996). Chúng tôi sử dụng năm phiếm hàm tương quan vdw khác nhau, cụ thể, revPBE-vdW (Román-Pérez & Soler, 2009), optPBE-vdW, optB86b-vdW, optB88-vdW (Klimeš et al., 2011), and vdW-DF2 (Lee et al., 2010), để xác định cấu trúc hình học và năng lượng hấp phụ của phân tử khí NH_3 trên đơn lớp MoSe_2 . Ngưỡng hội tụ cho các tính toán self-consistent field được đặt là 10^{-5} cho mỗi ô và tất cả các cấu trúc được tối ưu hoàn toàn cho đến khi lực Hellmann-Feynman cực đại tác dụng lên mỗi nguyên tử nhỏ hơn $0,01 \text{ eV \AA}^{-1}$. Các hàm sóng được mở rộng bằng cách thiết lập tập cơ sở sóng phẳng với mức năng lượng cắt là 500 eV. Đầu tiên, lưới K trong không gian đảo có kích thước 25×25 có tâm tại gamma đã được sử dụng để tối ưu hóa cấu trúc hình học của ML MoSe_2 unit cell. Với hệ hấp phụ, một supercell MoSe_2 , 4×4 được thiết lập với một khoảng chân không dày $\sim 25 \text{ \AA}$ để loại bỏ sự tương tác khả dĩ giữa các lớp và lưới kích thước 5×5 đã được sử dụng. Để tìm dạng hình học ổn định nhất của hệ hấp phụ (NH_3 - MoSe_2), việc tối ưu hóa cấu trúc được tính toán một cách cẩn thận và lớp MoSe_2 bị hạn chế dọc theo hướng z.

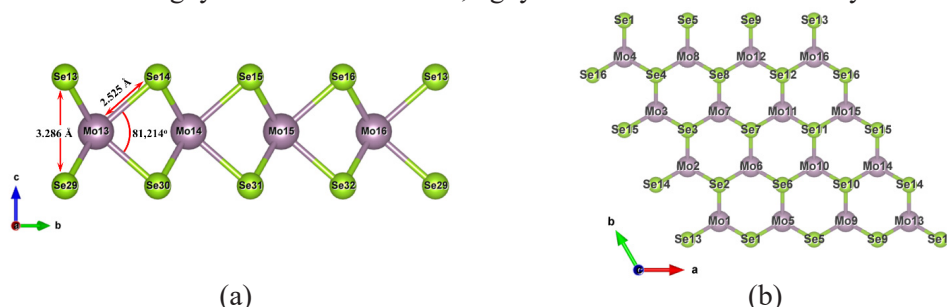
3. Kết quả và thảo luận

3.1. Tính chất và cấu trúc hình học của đế và khí trước hấp phụ

a. Tính chất và cấu trúc hình học của đế MoSe_2

MoSe_2 có cấu trúc dạng phân lớp, phân lớp Mo kẹp ở giữa 2 phân lớp Se. Mo và Se liên kết cộng hóa trị với nhau tạo thành một hình lục giác như Hình 1. Trong đó, theo tính toán của chúng tôi, khoảng cách giữa 2 lớp nguyên tử Se liên kế là $3.286 \text{ \AA}$, độ dài liên kết giữa 2 nguyên tử Se và Mo là $2.525 \text{ \AA}$, góc liên kết giữa các nguyên tử Se-Mo-Se là 81.214° . Vì đế MoSe_2 đã được tối ưu nên các góc và độ dài liên kết có giá trị là như nhau.

Hình 1. Hình chiếu cạnh (a) và hình chiếu bằng (b) của đế MoSe_2 trước khi hấp phụ. Nguyên tử Mo có màu tím, nguyên tử Se có màu xanh lá cây



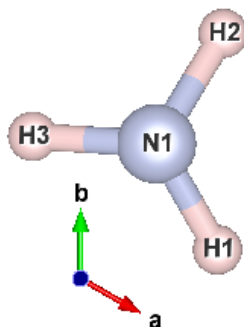
Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

b. Tính chất và cấu trúc hình học của khí NH_3

NH_3 bao gồm một nguyên tử N làm trung tâm và 3 nguyên tử H liên kết cộng hóa trị. Do có một cặp electron không liên

kết ở nguyên tử Nito, do đó, cấu trúc hình học phân tử NH_3 có dạng tứ diện không đều. Từ tính toán của chúng tôi, độ dài liên kết của H_1 , H_2 , và H_3 với N lần lượt là 0.940 Å, 1.029 Å và 0.964 Å.

Hình 2. Hình chiếu bằng của khí NH_3 trước khi hấp phụ. Nguyên tử N có màu xanh còn 3 nguyên tử H có màu hồng

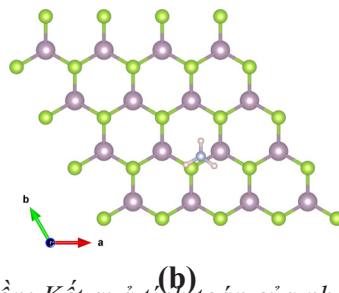
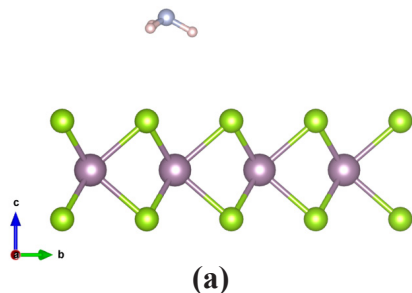


Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

3.2. Tính chất và cấu trúc hình học của đế và khí sau hấp phụ

a. Cấu trúc tối ưu

Hình 3. Cấu trúc hình học của đơn lớp $MoSe_2$ sau khi hấp phụ khí NH_3 :
(a) hình chiếu cạnh; (b) hình chiếu bằng



Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

b. Độ dài liên kết và góc liên kết

Đối với khí NH_3 :

Bảng 1. Bảng đo khoảng cách liên kết và góc liên kết của phân tử NH_3 trước và sau khi hấp phụ

STT		Khoảng cách liên kết (Å)				Góc liên kết (độ)		
		Trước hấp phụ	Sau hấp phụ	Độ chênh lệch		Trước hấp phụ	Sau hấp phụ	Độ chênh lệch
1	N1-H1	0.94020	1.02061	0.08041	H1-N1-H2	108.8298	106.7520	-2,0778
2	N1-H2	1.02936	1.02068	-0.00868	H1-N1-H3	114.6080	106.6996	-7,9084
3	N1-H3	0.96367	1.02040	0.05673	H2-N1-H3	106.9861	106.7512	-0,2349

Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

Từ Bảng 1 ta có thể thấy, phân tử khí NH_3 đã bị co lại về góc sau khi hấp phụ. Góc liên kết giữa H_1 -N1- H_2 là co lại nhiều nhất (co lại 6,64%) còn góc liên kết giữa H_2 -N1- H_3 là co lại ít nhất (co lại 0,22%). Từ hình vẽ cấu hình sau khi hấp phụ, ta cũng có thể thấy được nguyên nhân của nó

là do nguyên tử H_3 và nguyên tử H_1 nằm gần nguyên tử Se6 còn nguyên tử H_2 nằm xa nguyên tử Se6 của đế. Sau khi hấp phụ thì khí NH_3 trở thành dạng hình chóp tam giác đều.

Đối với đế $MoSe_2$:

Từ bảng tính toán độ dài liên kết,

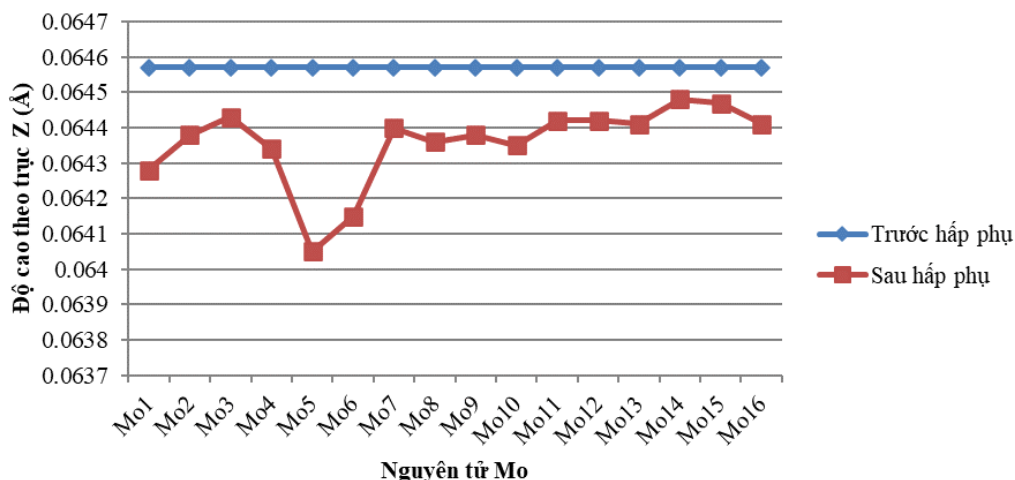
chúng ta có thể thấy được rằng, độ dài liên kết giữa Mo và Se ở đế và góc liên kết giữa chúng đều tăng lên. Đặc biệt là ở những vị trí mà đế hấp phụ khí NH_3 , nơi độ dài liên kết giữa Se và Mo biến đổi ít nhất là nơi xung quanh nguyên tử Se_6 . Khi độ dài liên kết của các nguyên tử Se với nguyên tử Mo (tăng từ 1,59% đến khoảng 1,68%) nhưng đối với độ dài liên kết $\text{Mo}_6\text{-Se}_6$, $\text{Mo}_{10}\text{-Se}_6$, $\text{Mo}_5\text{-Se}_6$ (tăng chỉ khoảng 1,39% đến

khoảng 1,46%.

c. *Độ cao theo trục Z của các nguyên tử*

Sau hấp phụ, độ cao theo trục Z của tất cả các nguyên tử Mo theo xu hướng chung đều giảm xuống. Nguyên tử Mo_3 có độ cao giảm nhiều nhất, nguyên tử Mo_{14} có độ cao giảm ít nhất. Tuy nhiên, độ thay đổi trước và sau hấp phụ là không đáng kể, nằm trong dải từ 0.6405 đến 0.6457, tức là độ biến động lớn nhất là 0.81%.

Hình 4. Độ cao theo trục Z của các nguyên tử Mo trước khi hấp phụ và sau khi hấp phụ khí NH_3

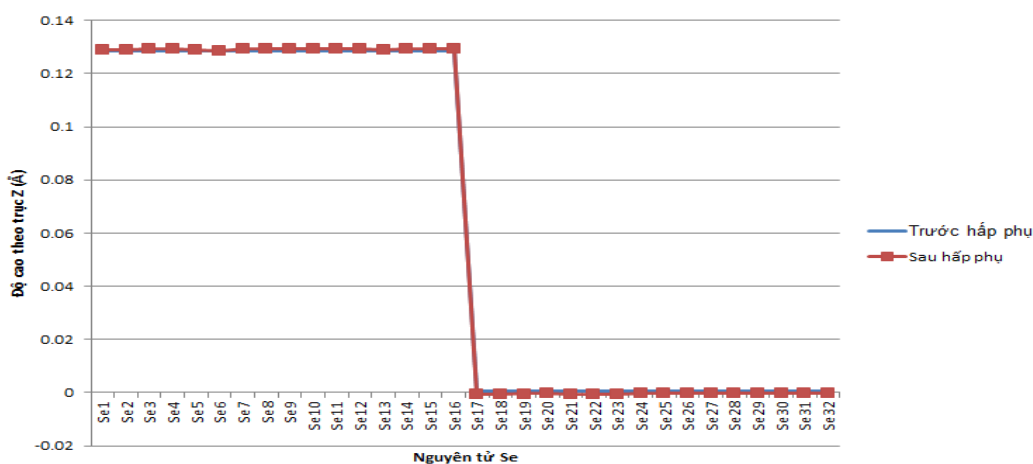


Sau hấp phụ, các nguyên tử Se ở lớp trên gần với khí, từ Se_1 đến Se_{16} , có độ cao tăng lên không đáng kể. Các nguyên tử Se ở lớp dưới xa khí nhất, từ Se_{17} đến Se_{32} ,

Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

có độ cao giảm không đáng kể. Độ thay đổi trước và sau hấp phụ là không đáng kể, nằm trong dải từ 0.12874 đến 0.12927, tức là độ biến động lớn nhất là 0.41%.

Hình 5. Độ cao theo trục Z của các nguyên tử Se trước khi hấp phụ và sau khi hấp phụ khí NH_3



Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

Vậy sau khi tính toán độ cao Z của lớp nguyên tử Se-Mo-Se, ta thấy rằng, độ

cao Z của lớp Se gần khí nhất tăng lên, độ cao Z của lớp Mo và Se xa khí nhất

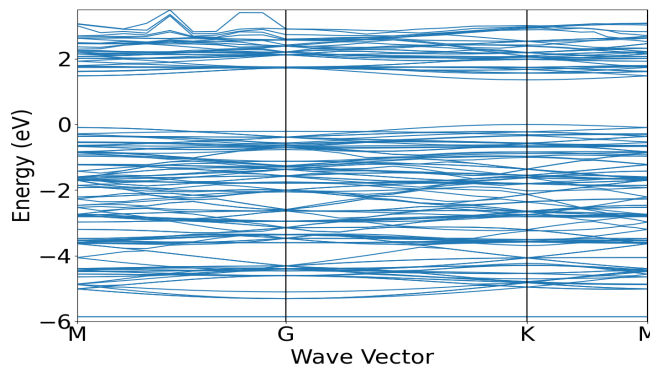
giảm xuống. Điều này có thể là do để đã cho một phân điện tử đến khí là 0.107e (xem phân tính toán độ dịch chuyển điện tích).

Ngoài ra, độ âm điện của nguyên tử là đại lượng đặc trưng cho khả năng hút các điện tử. Từ lý thuyết của hóa học, ta biết rằng độ âm điện của các nguyên tử Mo, Se, N, H lần lượt là 1.8, 2.55, 3.04 và 2.2. Ta có thể thấy rằng độ âm điện của N là khá lớn, trong khi đó độ âm điện của Mo là khá nhỏ. Chúng ta cũng có thể dự đoán rằng, ở để phần mất điện tích nhiều nhất là xung quanh nguyên tử Mo và nhận nhiều điện tích nhất là ở nguyên tử N của khí.

3.3. Cấu trúc vùng năng lượng và đồ thị mật độ trạng thái

Hình 6 biểu diễn cấu trúc vùng năng lượng khi để MoSe₂ hấp phụ khí NH₃. Cấu trúc vùng năng lượng (band structure) mô tả cách mà các mức năng lượng của electron được phân bố trong một hệ vật liệu. Cụ thể, nó biểu diễn mối quan hệ giữa năng lượng và vector sóng (wave vector) của electron. Trục tung của đồ thị cấu trúc vùng năng lượng thể hiện mức năng lượng của electron, nó được chia thành các dải năng lượng. Trục hoành của đồ thị biểu diễn vector sóng của electron. Trước khi hấp phụ khí, độ rộng vùng cấm là 1.406 eV, kiểu trực tiếp, tương ứng với chuyển dịch K-K.

Hình 6. Cấu trúc vùng năng lượng khi để MoSe₂ hấp phụ khí NH₃

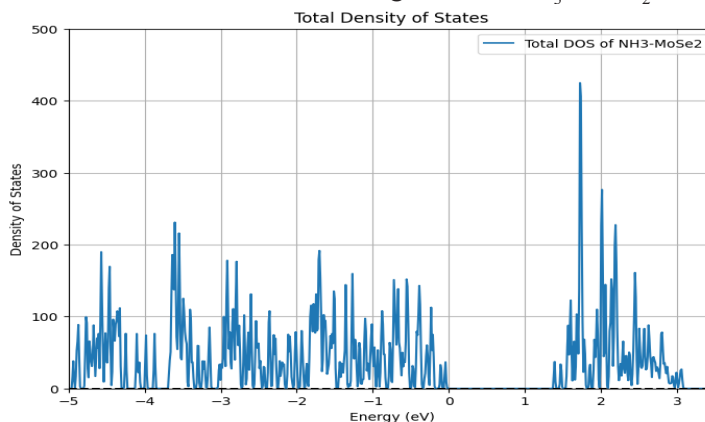


Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

Hình 7 biểu diễn đồ thị mật độ trạng thái của hệ hấp phụ NH₃-MoSe₂. Đồ thị mật độ trạng thái (density of states - DOS) cung cấp thông tin về phân phối của các trạng thái electron trong một hệ vật liệu. Trục hoành của DOS đại diện cho mức năng lượng. Nó thường được chia thành các đơn vị năng lượng và cho biết số lượng

trạng thái electron trong mỗi đơn vị năng lượng đó. Trục tung của DOS thể hiện số lượng trạng thái electron tại từng mức năng lượng. Điều này có thể giúp đánh giá mật độ của các trạng thái trong dải năng lượng cụ thể. Trên đồ thị DOS, khoảng cách giữa HOMO và LUMO cũng cho ta biết độ rộng vùng cấm của hệ vật liệu.

Hình 7. Đồ thị mật độ trạng thái của NH₃-MoSe₂



Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

3.4. Các tham số tính toán của quá trình hấp phụ

a. Năng lượng hấp phụ

Trong lĩnh vực cảm biến khí, năng lượng hấp phụ thể hiện khả năng của một vật liệu cảm biến (thường là một loại chất hấp phụ) trong việc hấp thụ khí mục tiêu từ môi trường xung quanh. Các cảm biến khí thường sử dụng vật liệu hấp phụ để tương tác với khí và tạo ra một sự thay đổi đo được, như điện trở, dòng điện, hay một đặc tính khác, dựa trên mức độ hấp phụ của chất này.

Năng lượng hấp phụ được định nghĩa như sau:

$$E_{ad} = E_{gas+sub} - (E_{gas} + E_{sub}) \quad (1)$$

với $E_{gas+sub}$, E_{gas} và E_{sub} tương ứng là tổng năng lượng của hệ hấp phụ, phân tử khí cô lập và đế cô lập.

Năng lượng của khí NH_3 và đế $MoSe_2$ khi cô lập lần lượt là 17.74937372 eV và 210.45607523 eV. Năng lượng của hệ hấp phụ NH_3 và $MoSe_2$ là 228.39674072 eV. Vậy năng lượng hấp phụ tính được là 191.3 meV.

b. Khoảng cách giữa khí và đế

Từ kết quả tính toán, ta thu được khoảng cách thấp giữa khí NH_3 và đế $MoSe_2$ là 3.06 Å. Khoảng cách này là lớn để các nguyên tử xảy ra liên kết hóa học. Do vậy, giữa đế và khí chỉ xảy ra tương tác vật lý.

c. Thời gian hồi phục

Thời gian hồi phục (recovery time) là thời gian mà một cảm biến cần để quay về trạng thái ban đầu sau khi đã bị tác động hoặc tiếp xúc với một loại khí mục tiêu. Đây là một yếu tố quan trọng đo lường khả năng của cảm biến trong việc phục hồi và chuẩn bị cho các đo lường tiếp theo. Thời gian phục hồi được xem là một thông số

hiệu suất quan trọng để đánh giá tính hiệu quả của cảm biến. Để xem xét tính ưu việt, cũng như tiềm năng ứng dụng cảm biến nhạy khí của vật liệu, chúng tôi tính toán về mặt lý thuyết thời gian phục hồi sử dụng công thức liên quan đến lý thuyết trạng thái chuyển tiếp (transition state theory):

$$\tau = \nu^{-1} \exp\left(\frac{-E_{ad}}{k_B T}\right) \quad (3)$$

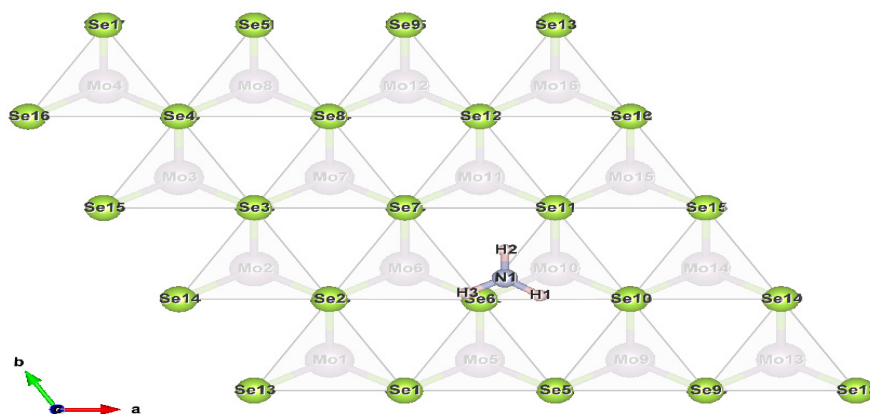
với $\nu=10^{12}s^{-1}$, $k_B=8.318 \times 10^{-3}kJ/mol K$ và $T=300K$ lần lượt là tần số thử nghiệm (attempt frequency), hằng số Boltzman, và nhiệt độ. Chúng tôi tính toán được thời gian phục hồi của đế $MoSe_2$ là $\tau = 10^{-12}s$. Ta thấy vật liệu $MoSe_2$ có thời gian phục hồi khá ngắn khi hấp phụ khí NH_3 .

d. Độ dịch chuyển điện tích

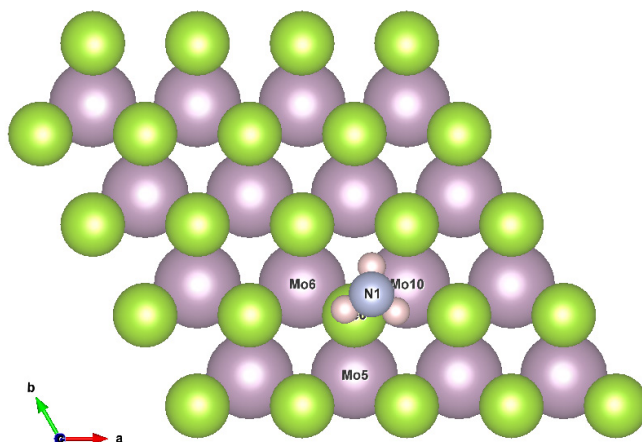
Phân tích điện tích Bader (Bader charge analysis) là một phương pháp được sử dụng để đo lường sự phân bố của điện tích trong các hệ phức tạp, đặc biệt là trong các tinh thể, phân tử, hay cấu trúc nguyên tử. Phương pháp này thường được sử dụng để xác định phân bố các điện tử trong các vùng không gian nhất định của một hệ, và từ đó, xác định điện tích cục bộ trên các nguyên tử, phân tử, hay tinh thể. Phân tích điện tích Bader có thể cung cấp thông tin quan trọng về tương tác và liên kết electron trong các hệ phức tạp.

Bằng cách sử dụng phương pháp phân tích điện tích Bader (Henkelman et al., 2006), sự dịch chuyển điện tích giữa khí và đế được đánh giá và phân tích cụ thể. Chênh lệch mật độ điện tích của hệ AB là trong đó là điện tích của hệ hấp phụ, và lần lượt là điện tích hệ vật liệu và hệ khí cô lập, được xác định thông qua mật độ điện tích trong tính toán trường tự hợp.

Hình 8. Cấu trúc của đế và khí sau khi hấp phụ (thể hiện rõ các nguyên tử Se có màu xanh nằm phía trên, các nguyên tử Mo nằm phía dưới, nguyên tử Se6 gần khí NH_3 nhất)



Hình 9. Cấu trúc của đế và khí sau khi hấp phụ (thể hiện rõ phân tử NH_3 nằm hoàn toàn phía trên hai nguyên tử Mo-10 và Se6)

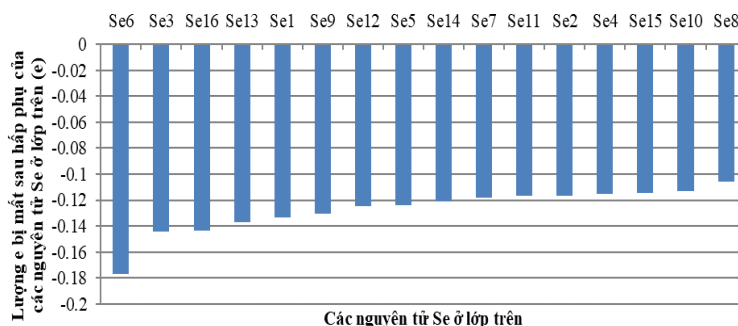


Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

Nhìn vào vị trí tương quan giữa khí và các nguyên tử ở đế trong cấu hình hấp phụ như Hình 8 và đặc biệt là Hình 9, ta

thấy rằng, các nguyên tử bị ảnh hưởng mạnh bởi quá trình hấp phụ lần lượt là Se6, Mo10, Mo6, Mo5.

Hình 10. Lượng e bị mất của nguyên tử Se ở lớp trên sau khi hấp phụ khí NH_3

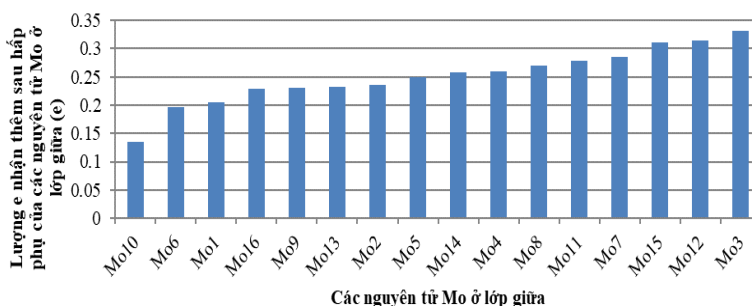


Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

Trước hết, chúng tôi xét các nguyên tử Se ở lớp trên cùng (gần với khí hấp phụ), tức là, các nguyên tử từ Se1 đến Se16. Sau khi hấp phụ, điện tích của tất cả các nguyên tử Se ở lớp trên cùng này đều theo xu hướng chung là bị giảm (tức là chúng cho điện

tích). Nguyên tử Se6 bị giảm điện tích nhiều nhất (0.17685e), nguyên nhân có thể được cho là do vị trí của nguyên tử Se6 gần khí nhất (quan sát hình chiếu bằng trong hình vẽ). Ta chú ý rằng, sau quá trình hấp phụ để cho khí một lượng điện tích là 0.107e.

Hình 11. Lượng e nhận thêm của nguyên tử Mo ở lớp giữa sau khi hấp phụ khí NH_3

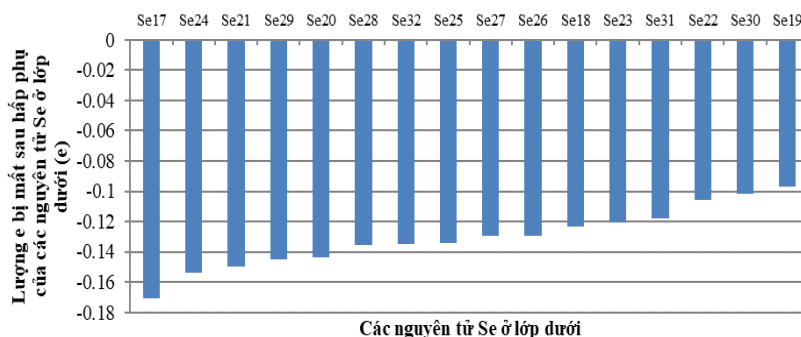


Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

Tiếp theo, chúng tôi xét các nguyên tử Mo ở lớp giữa, tức là, các nguyên tử từ Mo1 đến Mo16. Sau khi hấp phụ, điện tích của tất cả các nguyên tử Mo ở lớp giữa này đều theo xu hướng chung là tăng lên (tức là chúng nhận điện tích). Từ Hình 11 ta thấy nguyên tử Mo10 có lượng điện tích tăng lên là ít nhất (0.13551e), nguyên nhân có thể được cho là do vị trí của nguyên tử Mo10 gần khí nhất, và đồng thời, nguyên tử này cũng có liên kết cộng hóa trị trực

tiếp với nguyên tử Se6 bị mất điện tích nhiều nhất như đã phân tích ở trên (quan sát hình chiếu bằng trong hình vẽ). Ta có thể nhận định rằng, lượng điện tích Mo10 nhận được đã bị chuyển dịch một phần đáng kể sang nguyên tử Se6, và điện tích từ nguyên tử Se6 bị chuyển dịch phần lớn sang khí. Chính vì vậy, lượng điện tích của nguyên tử Mo nhận thêm sau quá trình hấp phụ là nhỏ nhất so với tất cả các nguyên tử Mo còn lại.

Hình 12. Lượng e bị mất của nguyên tử Se ở lớp dưới sau khi hấp phụ khí NH₃



Nguồn: Kết quả tính toán của nhóm tác giả

Sau đó, chúng tôi xét các nguyên tử Se ở lớp dưới cùng, tức là, các nguyên tử từ Se₁₇ đến Se₃₂. Sau khi hấp phụ, điện tích của tất cả các nguyên tử Se ở lớp cuối cùng này đều theo xu hướng chung là giảm đi (tức là chúng cho điện tích). Từ Hình 12, ta thấy nguyên tử Se₁₇ có lượng điện tích bị mất là nhiều nhất (0.17092e), nguyên nhân có thể được cho là do chuỗi liên kết Se₁₇-Mo₅-Se₆ (nguyên tử Se₁₇ có liên kết cộng hóa trị trực tiếp với nguyên tử Mo₅, nguyên tử Mo₅ có liên kết cộng hóa trị trực tiếp với nguyên tử Se₆).

Sự dịch chuyển điện tích từ Se sang khí với lượng điện tích là 0.107e. Như đã phân tích ở trên, sự phân bố lại điện tích khi hấp phụ làm cho phân tử NH₃ tăng momen lưỡng cực điện, trong khi đó, sự mất điện tích ở Se khiến cho nó giảm điện trở. Điều này là hoàn toàn hữu ích khi chúng ta có thể sử dụng để làm cảm biến phát hiện khí NH₃. Chúng ta đo độ nhạy của nó khi gặp khí NH₃ thông qua đo điện trở hoặc độ dẫn điện của MoSe₂.

4. Kết luận

Bằng cách tối ưu hóa các hệ thống hấp phụ, sử dụng các phương pháp tọa độ không gian, tính toán số liệu về cấu trúc

hình học trước và sau khi hấp phụ khí NH₃, cấu trúc vùng năng lượng, mật độ trạng thái, các tham số của quá trình hấp phụ của vật liệu nền MoSe₂, chúng tôi đã nghiên cứu cơ chế hấp phụ khí NH₃ trên nền vật liệu 2 chiều MoSe₂, đề sử dụng nó làm cảm biến khí, phát hiện sự có mặt của khí độc NH₃ trong không khí ở các nhà máy, xí nghiệp. Qua nghiên cứu, ta có thể thấy rằng khi hấp phụ khí, vật liệu 2 chiều này đã mất đi một lượng điện tích là 0.107e, từ đó làm giảm điện trở của MoSe₂. Thông qua đó, ta có thể xác định sự có mặt của khí độc NH₃ thông qua việc đo độ điện trở của nó. Ngoài ra, thời gian phục hồi của MoSe₂ rất ngắn (cỡ 10⁻¹²s) cho thấy sự ưu việt và tiềm năng lớn của MoSe₂, ứng dụng nó để làm cảm biến khí NH₃.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2 qua Đề tài có mã số SV.2025.HPU2.07.

Nhóm tác giả trân trọng cảm ơn sinh viên Trần Tuấn Anh và Nguyễn Minh Tiến (Khoa Vật lý, Trường ĐHSPh Hà Nội 2) vì đã dành thời gian đọc bản thảo và đưa ra những góp ý quý báu cho nghiên cứu này.

Tài liệu tham khảo

Late, D. J., Doneux, T., & Bougouma, M. (2014). Single-layer MoSe₂ based NH₃ gas sensor. *Applied Physics Letters*, 105(23), 233103.

Baek, J., Yin, D., Liu, N., Omkaram, I., Jung, C., Im, H., ... & Kim, S. (2017). A highly sensitive chemical gas detecting transistor based on highly crystalline CVD-grown MoSe₂ films. *Nano Research*, 10(6), 1861-1871.

Kresse, G., & Joubert, D. (1999). From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 59(3), 1758-1775.

Kresse, G., & Furthmüller, G. (1996). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 54(16), 11169-11186.

Román-Pérez, G., & Soler, J. M. (2009). Efficient implementation of a van der Waals density functional: A plane-wave and separable density functional approach. *Physical Review Letters*, 103(9), 096102.

Klimeš, J., Bowler, D. R., & Michaelides, A. (2011). Van der Waals density functionals applied to solids. *Physical Review B*, 83(19), 195131.

Lee, Y. K., Murray, E. D., Kong, K., Lundqvist, B. I., & Langreth, D. C. (2010). Higher-accuracy van der Waals density functional. *Physical Review B*, 82(8), 081101.

Henkelman, G., Arnaldsson, A., & Jónsson, H. (2006). A fast and robust algorithm for Bader decomposition of charge density. *Computational Materials Science*, 36(3), 354-360.