

## Quãng đường tự do trung bình của điện tử năng lượng thấp trong vật liệu



TS Nguyễn Trương Thanh Hiếu (Trường Đại học Tôn Đức Thắng) đã được trao Giải thưởng trẻ Giải thưởng Tạ Quang Bửu năm 2020 với công trình “Low-energy electron inelastic mean free path in materials” (Quãng đường tự do trung bình của điện tử năng lượng thấp trong vật liệu), đăng trên Tạp chí Applied Physics Letters (Vol 108, p.172901, 2016). Công trình này đã đề xuất một phương pháp tổng quát để xác định quãng đường tự do trung bình của điện tử năng lượng thấp, có thể áp

dụng cho nhiều loại vật liệu khác nhau, từ vật liệu khối có cấu trúc chu kỳ cho đến vật liệu vô định hình, và cả vật liệu hai chiều đang rất được quan tâm hiện nay.

**Q**uãng đường tự do trung bình của điện tử trong quá trình tán xạ không đàn hồi (electron inelastic mean free path) là một đại lượng quan trọng trong lý thuyết tán xạ điện tử [Nature, 517, p.342 (2015)], đóng vai trò thông tin đầu vào trong các phương pháp phân tích bề mặt vật liệu bằng kỹ thuật phổ điện tử và chụp ảnh vật liệu ở cấp độ vi điện tử [Nature Nanotechnology, 6, p.651 (2011)]. Trong hàng thập kỷ qua, các kỹ thuật thực nghiệm và mô hình lý thuyết đã được các nhà khoa học xây dựng để xác định đại lượng này. Tuy nhiên, kết quả thu được đối với điện tử năng lượng thấp (dưới 100 eV) có độ bất định lớn và không đáng tin cậy. Ở vùng năng lượng này, thông tin về quãng đường tự do trung bình của điện tử rất cần thiết cho kỹ thuật nhiễu xạ điện tử năng lượng thấp, cũng như cho các nghiên cứu

liên quan đến vận chuyển điện tử năng lượng thấp trong nước lỏng [Nature Chemistry, 2, p.274 (2010)] và tế bào sinh học [Nature Materials, 14, p.904 (2015)].

Ở Việt Nam, lý thuyết tán xạ điện tử đã được nghiên cứu từ lâu và thường liên quan đến tốc độ tán xạ (scattering rate), điển hình là công trình “Electron scattering from polarization charges bound on a rough interface of polar heterostructures” của các tác giả Đoàn Nhật Quang, Nguyễn Huyền Tụng và Nguyễn Thành Tiên đăng trên Tạp chí Journal of Applied Physics. Thực ra, tốc độ tán xạ và quãng đường tự do trung bình của điện tử là hai đại lượng liên hệ mật thiết với nhau. Cũng có nghiên cứu liên quan đến quãng đường tự do trung bình của điện tử đăng trên tạp chí của Việt Nam nhưng tác giả lại là người nước ngoài, ví dụ như công trình “Anomalies in one-

dimensional electron transport: quantum point contacts and wires” của các tác giả Mukunda P. Das và Frederick Green đăng trên Tạp chí Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology của Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

Trong công trình “Low-energy electron inelastic mean free path in materials” [Applied Physics Letters, 108, p.172901 (2016)], TS Nguyễn Trương Thanh Hiếu đã đề xuất một phương pháp tổng quát để xác định quãng đường tự do trung bình của điện tử năng lượng thấp. Theo đó, đại lượng này được xác định trong hệ hình thức điện môi, sử dụng hàm mất năng lượng thu được từ tính toán nguyên lý đầu. Phương pháp này có thể áp dụng cho nhiều loại vật liệu khác nhau, từ vật liệu khối có cấu trúc chu kỳ cho đến vật liệu vô định hình (như nước lỏng), và



**Low-energy electron inelastic mean free path in materials**

Hieu T. Nguyen-Truong

cá vật liệu hai chiều đang rất được quan tâm hiện nay. Tính tổng quát của phương pháp được đề xuất có ý nghĩa rất quan trọng, vì như đã giới thiệu ở trên, các lĩnh vực khác nhau đòi hỏi thông tin về quãng đường tự do trung bình của điện tử năng lượng thấp trong các vật liệu khác nhau. Cũng cần nhấn mạnh rằng, nghiên cứu trên chỉ là một khía cạnh trong lý thuyết tán xạ điện tử. Có thể thấy, đây là lần đầu tiên vấn đề xác định quãng đường tự do trung bình của điện tử năng lượng thấp được nghiên cứu ở trong nước và do người Việt Nam thực hiện.

Trao đổi với chúng tôi, TS Nguyễn Trương Thanh Hiếu cho biết, trong quá trình học tập tại Nga, anh đã nghiên cứu tán xạ điện tử trong vật rắn bằng mô phỏng Monte Carlo. Phương pháp này đòi hỏi cơ sở dữ liệu về mặt cắt tán xạ đàn hồi và quãng đường tự do trung bình của điện tử trong quá trình tán xạ không đàn hồi. Các tính toán tán xạ

hiện trong hệ hình thức điện môi. Vấn đề là kết quả thu được không chính xác đối với điện tử năng lượng thấp. Tìm hiểu sâu hơn về lý thuyết tán xạ không đàn hồi, TS Hiếu nhận thấy việc tính toán không chính xác là do các phép xấp xỉ cho hàm mất năng lượng không còn hiệu lực ở vùng năng lượng thấp. Để tránh hạn chế này, anh đã sử dụng phương pháp tính toán nguyên lý đầu cho hàm mất năng lượng. Điểm mạnh của phương pháp là có thể áp dụng cho nhiều loại vật liệu khác nhau. Vật liệu đầu tiên mà tác giả thử nghiệm là đồng ở thể rắn, vì kim loại này rất phổ biến và đã được nghiên cứu rộng rãi cả lý thuyết lẫn thực nghiệm, có nhiều dữ liệu để kiểm tra đối chứng. Kết quả tính toán và so sánh cho thấy phương pháp TS Hiếu đề xuất là đáng tin cậy. Sau thử nghiệm, tác giả đã áp dụng phương pháp này cho 10 loại chất rắn khác nhau và cũng thu được kết quả phù hợp với thực nghiệm [*Journal of Physics: Condensed Matter*, **29**, p.215501 (2017)], từ đó chứng minh được

tính tổng quát của phương pháp được đề xuất.

**TS Nguyễn Trương Thanh Hiếu**, sinh năm 1985 tại Nha Trang, Khánh Hòa, hiện là Trưởng phòng thí nghiệm Vật lý ứng dụng (Viện Tiên tiến khoa học vật liệu, Trường Đại học Tôn Đức Thắng).

Một số thành tích đã đạt được: giải Ba - Hội nghị các nhà nghiên cứu trẻ khu vực Volgograd năm 2008; giải Nhất - Cuộc thi sinh viên nghiên cứu khoa học Đại học Tổng hợp Kỹ thuật Quốc gia Volgograd năm 2009; giải Nhất (Poster, Vật lý) - Hội nghị quốc tế các nhà khoa học trẻ Lomonosov 2013...

Để phát triển nghiên cứu, TS Nguyễn Trương Thanh Hiếu cũng đã áp dụng phương pháp này cho vật liệu hai chiều và thu được một số kết quả khả quan. Một trong những ưu tiên hiện nay của tác giả là phát triển mô hình lý thuyết sang vùng năng lượng thấp. Đây là một vấn đề nan giải, đặc biệt là về toán - lý, nhưng cũng rất hấp dẫn. Việc xây dựng một mô hình lý thuyết đơn giản nhưng tổng quát và chính xác luôn là một mục tiêu được tác giả hướng đến. Vừa qua, anh đã công bố kết quả bước đầu trong một nghiên cứu cho nước lỏng [*Journal of Physics: Condensed Matter*, **30**, p.155101 (2018)]. Tuy nhiên, mô hình lý thuyết vẫn còn thô sơ, anh đang nỗ lực nghiên cứu để cải tiến ✍

**XD**