

ĐÁNH GIÁ TÍNH CHẤT CƠ HỌC VÀ ĐIỆN TỬ CỦA CÁC VẬT LIỆU XO₂ ĐƠN LỚP BẰNG PHƯƠNG PHÁP NGUYÊN LÝ ĐẦU

ASSESSMENT OF MECHANICAL AND ELECTRONICS PROPERTIES OF XO₂ MONOLAYER MATERIALS USING FIRST-PRINCIPLES METHOD

Trần Thế Quang^{1*}, Nguyễn Hoàng Linh^{2,3*}, Đinh Thế Hưng⁴, Đỗ Văn Trường⁵, Tô Toàn Thắng⁵, Lê Nhật Bằng¹

¹Trường Đại học Thái Bình, Việt Nam

²Trường Đại học Quốc Gia Changwon, Hàn Quốc

³Viện Kỹ thuật và Công nghệ Ceramic Hàn Quốc, Hàn Quốc

⁴Trường Kỹ thuật Phenikaa, Trường Đại học Phenikaa, Việt Nam

⁵Trường Cơ khí, Đại học Bách khoa Hà Nội, Việt Nam

*Tác giả liên hệ / Corresponding author: tranthequang12@gmail.com; 20247630@gs.cwnu.ac.kr

(Nhận bài / Received: 02/01/2025; Sửa bài / Revised: 16/4/2025; Chấp nhận đăng / Accepted: 25/4/2025)

DOI: 10.31130/ud-jst.2025.004

Tóm tắt - Trong bài báo này, một đánh giá tổng quát về tính chất cơ học và điện tử của cấu trúc đơn lớp XO₂ (X là Ge hoặc Sn) được thực hiện bằng tính toán nguyên lý đầu. Kết quả phân tích về động lực học và tĩnh học đã xác nhận khả năng tồn tại của cấu trúc vật liệu. Cả hai vật liệu GeO₂ và SnO₂ đều thể hiện tính linh hoạt cơ học, trong đó GeO₂ có ứng suất tối hạn kéo lên đến 16,15 N/m và SnO₂ đạt 12,90 N/m. Ở trạng thái cân bằng, hai vật liệu đều thể hiện tính chất bán dẫn gián tiếp với khoảng trống năng lượng lớn. Khi chịu biến dạng, khoảng trống trong cấu trúc vùng năng lượng của cả hai cấu trúc giảm tuyến tính lên tới 80%. Các kết quả nghiên cứu không chỉ phân tích chi tiết mối tương quan giữa biến dạng và đặc tính điện tử đồng thời cho biết khả năng ứng dụng cấu trúc đơn lớp XO₂. Những thông tin này cung cấp nền tảng khoa học để tối ưu hóa hiệu năng thiết bị trong tương lai.

Từ khóa - Tính chất cơ học; cấu trúc vùng năng lượng; GeO₂ đơn lớp; SnO₂ đơn lớp; nguyên lý đầu

Abstract - In this paper, a comprehensive assessment of the mechanical and electronic properties of XO₂ monolayer structures (X is Ge or Sn) is conducted through first-principles calculations. The results of the dynamic and static analysis confirm the feasibility of the material structure. Both GeO₂ and SnO₂ demonstrate mechanical flexibility, where GeO₂ has a tensile stress of 16.15 N/m and SnO₂ reaches 12.90 N/m. In the equilibrium state, both materials exhibit indirect semiconductor properties with large energy band gaps. Under biaxial strains, the energy band gaps of both structures decrease linearly up to 80%. The research results not only elucidate the correlation between strain and electronic properties but also highlight the potential applications of XO₂ monolayer structures. These findings provide a scientific basis for optimizing the performance of devices in the future.

Key words - Mechanical properties; energy band structure; GeO₂ monolayer; SnO₂ monolayer; first-principles

1. Đặt vấn đề

Graphene là một phát kiến vĩ đại của thế kỉ XX, từ khi được chế tạo thành công đã làm thay đổi cơ bản cách tiếp cận và hướng nghiên cứu trong lĩnh vực khoa học vật liệu [1]. Được chế tạo từ phương pháp bóc tách vật liệu khỏi một cách đơn giản, graphene nhanh chóng trở thành nguồn cảm hứng, thúc đẩy sự ra đời và phát triển của hàng loạt các vật liệu màng mỏng tương tự. Trong hai thập niên qua, nhờ những tiến bộ trong thực nghiệm chế tạo và nỗ lực nghiên cứu, số lượng vật liệu hai chiều (2D) đã gia tăng nhanh chóng với nhiều cấu trúc mới như Boron-nitơ lục giác (*h*-BN) [2], Photpho đen, các oxide kim loại, dichalcogenides kim loại chuyển tiếp (TMDs), MXenes, và SiC [3-6]. Các vật liệu này được nổi bật bởi sự kết hợp đặc biệt giữa kích thước siêu mỏng, đặc điểm cấu trúc nguyên tử và diện tích bề mặt hoạt động lớn. Những đặc điểm ưu việt của vật liệu thấp chiều đã được khám phá như khả năng

dẫn điện tốt, độ bền cao, hiệu quả hấp thụ ánh sáng và nhiệt điện vượt trội [7, 8]. Nhờ vậy, vật liệu 2D đã mở ra nhiều hướng ứng dụng khá quan trọng các lĩnh vực như cảm biến, lưu trữ năng lượng và điện tử, góp phần định hình các công nghệ tiên tiến tương lai [9-12].

Gần đây, một số các vật liệu oxit như Al₂O₃, ZnO, ZrO, SiO₂, PbO₂, GeO₂, SnO₂ đang được nghiên cứu sâu rộng cho các ứng dụng thực tế trong lĩnh vực quang học, điện tử và cảm biến. Ozyurt và cộng sự [13] đã chứng minh rằng Al₂O₃ ở trạng thái siêu mỏng với cấu trúc tinh thể ổn định, thể hiện tính bán dẫn và từ tính, phù hợp ứng dụng cho các linh kiện nano. Nghiên cứu của Chen chỉ ra rằng, hiệu quả lọc nước của ZnO tăng đáng kể khi được kích thích bởi biến dạng hoặc điện trường [14]. Trong lĩnh vực hàng không, vật liệu SiO₂ được ứng dụng làm lớp phủ bề mặt với khả năng chịu được ứng suất cùng các tác động khắc nghiệt [15]. Tuy nhiên, vật liệu SiO₂ rất giòn, dễ bị

¹ Thai Binh University, Vietnam (Tran The Quang, Le Nhat Bang)

² Changwon National University, Republic of Korea (Nguyen Hoang Linh)

³ Korea Institute of Ceramic Engineering and Technology, Republic of Korea (Nguyen Hoang Linh)

⁴ Phenikaa School of Engineering, Phenikaa University, Vietnam (Dinh The Hung)

⁵ School of Mechanical Engineering, Hanoi University of Science and Technology, Vietnam (Do Van Truong, To Toan Thang)

phá huỷ dưới khi chế tạo ở dạng màng mỏng và gây thất thoát về dòng điện trong các thiết bị điện tử. Đặc biệt GeO_2 và SnO_2 thể hiện nhiều đặc tính nổi bật. Seal và cộng sự phát hiện đường cong phân cực-điện trường của GeO_2 rất thích hợp cho ứng dụng bộ nhớ điện tử có thể xoá dữ liệu nhờ điện trường [16]. Ngoài ra, vật liệu GeO_2 còn được chứng minh có khả năng ổn định chu kỳ và tăng dung lượng pin lithium khi được sử dụng làm cực âm [17]. Trong khi đó, các nghiên cứu về SnO_2 cũng tiết lộ đây là một cấu trúc ổn định về động lực học và nhiệt học cao. Khi kết hợp với vật liệu MoS_2 , cặp vật liệu này cải thiện đáng kể hiệu suất hấp thụ quang phổ, đặc biệt trong vùng ánh sáng khả kiến [18]. Bên cạnh đó, các pha khác nhau của SnO_2 còn thể hiện đặc trưng riêng biệt và tính điện tử linh hoạt, có sự thích nghi tốt và phù hợp cho chế tạo linh kiện điện tử, thiết bị bán dẫn [19]. Ngoài ra, một số nghiên cứu về các hợp chất của Ge, Sn ở dạng màng mỏng cũng đã chứng minh khả năng vượt trội về cơ học, điện tử, quang học và nhiệt điện [20, 21]. Với những đặc tính độc đáo và tiềm năng ứng dụng đa dạng, GeO_2 và SnO_2 là hai vật liệu có nhiều tính chất hấp dẫn và có triển vọng cao cho các thiết bị thực tế.

Mặc dù, sở hữu nhiều tiềm năng triển vọng cho các thiết bị thực tế, các nghiên cứu về GeO_2 và SnO_2 hiện mới chỉ được khám phá ở mức độ cơ bản. Đặc biệt, các đặc tính cơ học và điện tử của vật liệu, bao gồm độ bền cơ học, khả năng dẫn điện của vật liệu trong các ứng dụng về điện tử vẫn chưa được làm sáng tỏ. Để tiến tới ứng dụng thực tế, việc hiểu rõ cơ tính vật liệu đóng vai trò quan trọng. Những thông tin quan trọng này cần được khám phá, cung cấp các đánh giá tổng quan về đặc trưng cơ học gồm hằng số đàn hồi, hệ số Poisson, module đàn hồi, ứng suất và biến dạng phá huỷ. Dựa trên những dữ liệu này, sẽ giúp tối ưu hóa quy trình xử lý và đảm bảo an toàn cho vật liệu cùng thiết bị gia công. Ngoài ra, cũng làm sáng tỏ tương quan giữa biến dạng cơ học và trạng thái của các dải năng lượng trong vật liệu, giúp dự đoán và cải thiện hiệu suất của thiết bị. Những phát hiện được khám phá trong nghiên cứu này hỗ trợ quá trình sử dụng các vật liệu XO_2 trong linh kiện điện tử thế hệ mới.

2. Phương pháp tính toán

Sử dụng công cụ tính toán Quantum Espresso - QE [22] và lý thuyết phiếm hàm mật độ, tiến hành một nghiên cứu hệ thống về tính chất cơ học, điện tử của cấu trúc đơn lớp XO_2 . Đặc biệt, tập trung khám phá mối liên hệ giữa biến dạng cơ học và trạng thái của các dải năng lượng. Để mô tả chính xác các tương tác giữa nguyên tử trong hệ, nhóm tác giả đã chọn sử dụng hàm thể năng trao đổi tương quan PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) trong phạm vi bán kính tương tác 80Ry [23], kết hợp xấp xỉ gradient tổng quát (GGA) đã được sử dụng trong quá trình tính toán để hiệu chỉnh các kết quả [24]. Hơn nữa, để đảm bảo sự hội tụ năng lượng của hệ trong quá trình tính toán, một lưới điểm k với mật độ $15 \times 15 \times 1$ đã được lựa chọn [25]. Mô hình cấu trúc đơn lớp XO_2 được thiết đặt trong trạng thái tự do, với môi trường chân không dày 40Å theo phương z nhằm loại bỏ tương tác giữa các lớp nguyên tử [12]. Các điều kiện biên được thiết lập với giới hạn ứng suất là 0,05 GPa, giới hạn lực ở mức 0,005 Ry/a.u. ở nhiệt độ 0K, giúp

loại bỏ các yếu tố không mong muốn và đảm bảo sự hội tụ của kết quả [26].

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Tối ưu hoá cấu trúc cho các vật liệu XO_2 đơn lớp

Cấu trúc XO_2 đơn lớp gồm một nguyên tử thuộc nhóm IV-A (Ge hoặc Sn) và hai nguyên tử O. Hình 1(a) mô tả cấu trúc tối ưu của cấu trúc đơn lớp XO_2 được cân bằng trong điều kiện tiêu chuẩn ở nhiệt độ 0K. Sau khi cân bằng, vật liệu được sắp xếp thành ba lớp nguyên tử riêng biệt, lần lượt là O-Ge(Sn)-O dọc theo phương z . Trong đó lớp nguyên tử X nằm giữa hai lớp O đối xứng. Quá trình tối ưu hóa sử dụng thuật toán Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) cho kết quả về hằng số mạng lần lượt là $a = 2,90$ Å với GeO_2 và $a = 3,22$ Å với SnO_2 như Bảng 1. Như vậy, hằng số mạng có xu hướng tăng dần khi nguyên tử X thay đổi từ Ge sang Sn. Sự thay đổi tăng dần hằng số mạng từ Ge đến Sn phù hợp với xu hướng tăng bán kính nguyên tử và tương đồng các nghiên cứu trước đây [27, 28]. Để làm rõ sự ổn định của cấu trúc đơn lớp XO_2 , đầu tiên nhóm tác giả thực hiện kiểm tra về sự ổn định tĩnh học theo tiêu chuẩn Born [29]. Kết quả cho thấy, cấu trúc này sở hữu các hằng số đàn hồi C_{11} , C_{12} và C_{66} đều thỏa mãn các điều kiện ổn định của cấu trúc lục giác: $C_{11} > |C_{12}| > 0$ và $C_{66} > 0$, chứng tỏ chúng có tính ổn định cao. Ngoài ra, bộ tham số đàn hồi của vật liệu cũng được dùng để đánh giá tính dị hướng của mạng tinh thể trong miền đàn hồi, theo công thức [8]:

$$E(\alpha) = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}\Delta^4 + C_{22}\Omega^4 - \Delta^2\Omega^2 \left(2C_{12} - \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} \right)} \quad (1)$$

$$\nu(\alpha) = \frac{C_{12}(\Delta^4 + \Omega^4) - \Delta^2\Omega^2 \left(C_{11} + C_{22} - \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} \right)}{C_{11}\Delta^4 + C_{22}\Omega^4 - \Delta^2\Omega^2 \left(2C_{12} - \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} \right)} \quad (2)$$

với $\Delta = \sin(\alpha)$, $\Omega = \cos(\alpha)$ và α là góc được tạo từ véc-tơ kéo và phương Ox .

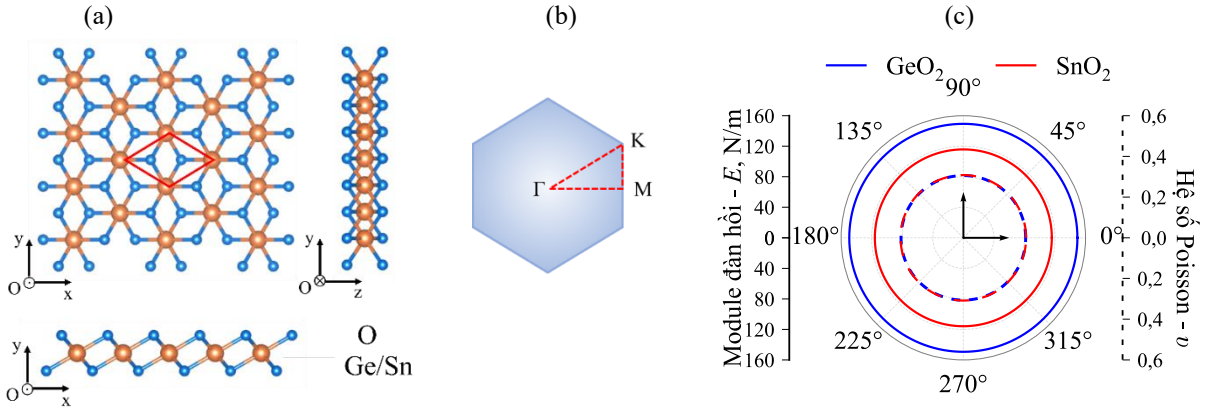
Bảng 1. Các hằng số vật liệu của cấu trúc vật liệu GeO_2 và SnO_2 đơn lớp gồm: hằng số mạng tinh thể - a (Å), các hằng số đàn hồi - C_{ij} (N/m), module đàn hồi - E (N/m), hệ số Poisson - ν và module cắt - G (N/m)

Vật liệu	a	$C_{11(22)}$	C_{12}	C_{66}	E	ν	G
GeO_2	2,90	164,76	50,42	57,06	164,15	0,30	57,06
SnO_2	3,22	127,98	39,43	44,22	127,36	0,30	44,22

Hình 1(c) minh họa giá trị phân tán của module đàn hồi - E và hệ số Poisson - ν theo góc α của các cấu trúc đơn lớp XO_2 bằng đồ thị cực. Kết quả thu được chỉ ra rằng, module E và hệ số ν đều là hằng số, với đồ thị phân tán có dạng hình tròn khi kéo ở các góc α khác nhau. Giá trị module E của cấu trúc đơn lớp GeO_2 và SnO_2 lần lượt là 164,15 N/m và 127,36 N/m. Tương tự, hệ số ν của hai cấu trúc này đều có giá trị xấp xỉ $\sim 0,3$. Những kết quả này cho biết các cấu trúc đơn lớp GeO_2 và SnO_2 là những vật liệu có tính đẳng hướng trong vùng đàn hồi. So với một số cấu trúc khác như SnS_2 ($E = 93,23$ N/m), GeS (E

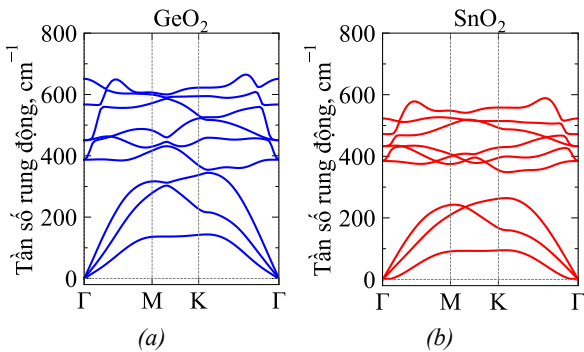
= 31,05 N/m), SnTe (18,30 N/m), hai cấu trúc GeO₂ và SnO₂ đều có giá trị module đàn hồi nhỏ hơn. Tuy nhiên, khi so sánh với các vật liệu thấp chiều khác như graphene ($E = 342 \pm 30$ N/m) [30], *h*-BN ($E = 292$ N/m) [31], MoS₂

($E = 170$ N/m) [32], có thể nhận thấy, module E của GeO₂ và SnO₂ đơn lớp có giá trị tương đối nhỏ, điều này cho thấy cấu trúc có độ bền lý tưởng cao cũng như tính linh hoạt về cơ học.



Hình 1. (a) Mô hình cấu trúc vật liệu XO₂ ($X = \text{Ge/Sn}$) được cân bằng trong điều kiện lý tưởng; (b) Các điểm đối xứng bậc cao trong vùng không gian Brillouin; (c) Đồ thị cực mô tả module đàn hồi (đường nét liền), hệ số Poisson (đường nét đứt) và góc α (hình thành giữa trục Ox và véc-tơ kéo) của các cấu trúc vật liệu XO₂ đơn lớp

Để nâng cao độ tin cậy của mô hình, nhóm tác giả thực hiện kiểm tra rung động phonon cho các cấu trúc đơn lớp XO₂. Sự phân tán phonon trong quá trình rung động của các cấu trúc đơn lớp GeO₂ và SnO₂ trong vùng không gian đảo được thể hiện như Hình 2. Kết quả nghiên cứu cho thấy, mỗi cấu trúc có chín dải rung động, bao gồm ba dải rung động âm thanh ở vùng tần số thấp và sáu dải rung động quang học ở vùng tần số cao. Trong vùng tần số cao, có hai dải rung động suy biến xuất hiện trong khoảng tần số 400÷450 cm⁻¹, trong khi hai dải rung động không suy biến ở vùng tần số cao hơn. Kết quả thu được cũng cho biết, tần số rung động phonon cực đại của cấu trúc đơn lớp GeO₂ và SnO₂ lần lượt đạt khoảng 665 cm⁻¹ và 590 cm⁻¹. Với các cấu trúc đã được khảo sát trước đó như SiS (500 cm⁻¹) [12], SiTe₂ (300 cm⁻¹) [8], SnSO (400 cm⁻¹) [27], kết quả về sự rung động phonon của mạng tinh thể đã cho thấy, cả hai cấu trúc đơn lớp GeO₂ và SnO₂ đều có độ ổn định cao. Hơn nữa, khi phân tích trên toàn bộ miền không gian đảo, không xuất hiện bất kỳ rung động có tần số âm nào, điều này đã xác nhận tính ổn định động lực học của các cấu trúc một lần nữa. Kết quả này không chỉ hỗ trợ cho độ tin cậy của mô hình mà còn mở ra tiềm năng ứng dụng cho các vật liệu.



Hình 2. Sự phân tán phonon khi mạng rung động ở trạng thái tự nhiên của vật liệu (a) GeO₂ và (b) SnO₂ đơn lớp

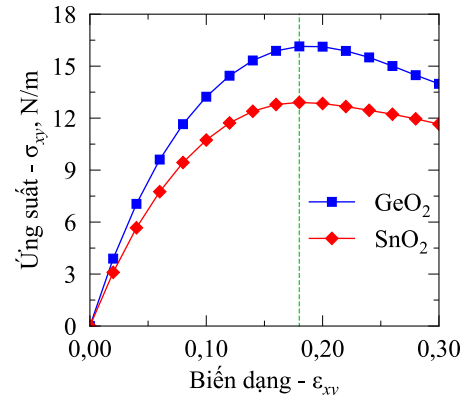
3.2. Tính chất cơ học của các vật liệu XO₂ đơn lớp

Trong nghiên cứu này, độ bền cơ học của các cấu trúc đơn lớp XO₂ được khảo sát thông qua biến dạng kéo, áp

dụng theo công thức [8]:

$$\varepsilon_{xy} = \frac{l - l_0}{l_0} \quad (3)$$

với, l và l_0 lần lượt là các kích thước của ô mạng cơ bản ở trạng thái biến dạng và trạng thái cân bằng. Sau mỗi lần thay đổi trạng thái, hệ thống nguyên tử sẽ tự sắp xếp lại để đạt trạng thái ổn định mới.



Hình 3. Đồ thị quan hệ giữa ứng suất và biến dạng cơ học của các cấu trúc vật liệu XO₂ đơn lớp

Hình 3 thể hiện đồ thị quan hệ giữa biến dạng cơ học và ứng suất kéo của cấu trúc vật liệu XO₂. Kết quả thu được tiết lộ ứng xử cơ học ở hai cấu trúc vật liệu GeO₂ và SnO₂ có sự tương đồng. Mỗi quan hệ được coi như đàn hồi tuyến tính ở mức biến dạng thấp ($\varepsilon_{xy} < 0,06$). Tuy nhiên, khi biến dạng bắt đầu tăng mạnh, ứng suất của hai vật liệu cũng có xu hướng tăng nhanh hơn và đạt đến giá trị cực đại trước khi bị phá hủy. Cụ thể, cấu trúc đơn lớp GeO₂ có ứng suất tới hạn cao hơn (16,15 N/m) so với SnO₂ (12,90 N/m) khoảng 3,25 N/m tại biến dạng phá hủy $\varepsilon_{xy} = 0,18$.

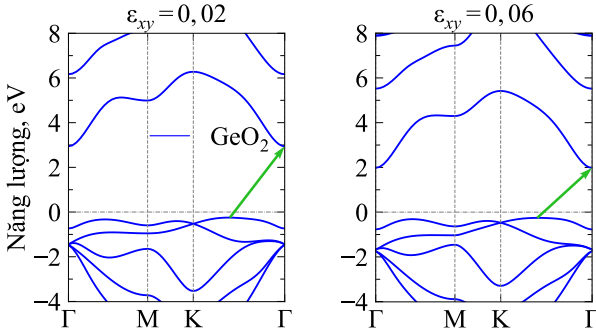
Sự khác biệt này được minh chứng qua độ âm điện của Ge ($\chi = 2,01$) có giá trị lớn hơn so với Sn ($\chi = 1,96$), dẫn đến liên kết giữa Ge-O có xu hướng bền vững hơn so với Sn-O. Tính chất cơ học linh hoạt của các cấu trúc đơn lớp XO₂ được khẳng định bằng mối quan hệ biến

dạng - ứng suất cũng như kết quả của một số nghiên cứu về vật liệu 2D như 1T-SiTe₂ ($\varepsilon = 0,38$), PdS₂ ($\varepsilon = 0,22$), NiS₂ ($\varepsilon = 0,18$), GeS ($\varepsilon = 0,20$), Al₂O₃ ($\varepsilon = 0,16$) [3, 7, 8, 33, 34].

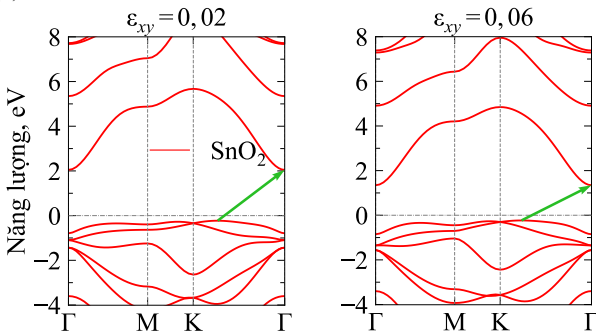
3.3. Tính chất điện tử của các cấu trúc vật liệu XO₂ đơn lớp

Theo lý thuyết cấu trúc dải năng lượng, một vật rắn thông thường có ba vùng năng lượng: vùng dẫn, vùng hoá trị và vùng trống năng lượng. Giá trị của vùng trống năng lượng này sẽ quyết định trực tiếp đến khả năng dẫn của vật liệu. Để phân tích chi tiết hơn về đặc điểm điện tử của các cấu trúc đơn lớp GeO₂ và SnO₂, nhóm tác giả đã thực hiện phân tích cấu trúc dải năng lượng của chúng. Hình 4 thể hiện sơ đồ về dải năng lượng ở trạng thái tự nhiên của các cấu trúc vật liệu XO₂. Qua phân tích phổ năng lượng cho thấy cả cấu trúc đơn lớp GeO₂ và SnO₂ đều thể hiện tính chất bán dẫn gián tiếp với khoảng trống vùng năng lượng lần lượt là 3,70 eV và 2,64 eV [27, 28], như liệt kê ở Bảng 2. Điểm thấp nhất của vùng dẫn (CBM) và điểm cao nhất của vùng hoá trị (VBM) của hai cấu trúc đơn lớp XO₂ đều nằm lần lượt tại điểm Γ và trong vùng K – Γ trong vùng Brillouin. Như vậy, cấu trúc đơn lớp GeO₂ và SnO₂, đều sở hữu đặc tính bán dẫn gián tiếp. Đáng chú ý, với khoảng trống vùng năng lượng lớn hơn 3.0 eV, GeO₂ là một ứng viên tiềm năng cho các ứng dụng yêu cầu cường độ dòng điện cao. Ngoài ra, kết quả về mật độ trạng thái điện tử cũng được trình bày như trong Hình 4. Cụ thể, mật độ trạng thái trong vùng hóa trị của cả hai vật liệu khá cao so với SnTe [6], GeSe [33] cho thấy sự phong phú về các trạng thái lượng tử mà điện tử có thể chiếm giữ. Ngược lại, mật độ trạng thái trong vùng dẫn thấp hơn, phản ánh sự hạn chế trạng thái khả dụng trong vùng năng lượng này.

(a) GeO₂



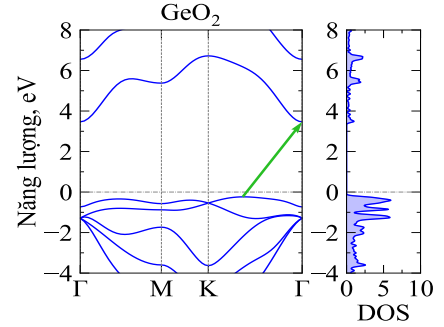
(b) SnO₂



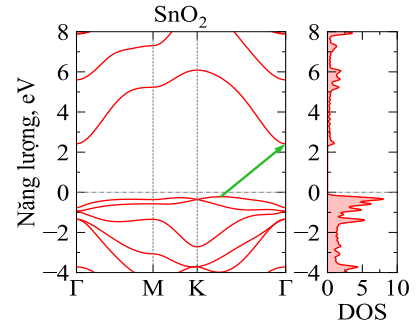
Hình 5. Trạng thái các dải năng lượng của cấu trúc vật liệu (a) GeO₂ và (b) SnO₂ đơn lớp ở một số trạng thái biến dạng kéo ($\varepsilon_{xy} = 0,02; 0,06; 0,10; \text{ và } 0,14$)

Bảng 2. Khoảng trống vùng năng lượng – E_g (eV), vị trí điểm cực trị CBM/VBM (eV), mức năng lượng Fermi – F (eV) của các cấu trúc vật liệu XO₂ đơn lớp ở trạng thái cân bằng

Vật liệu	E_g	CBM	VBM	F
GeO ₂	3,70	3,466 (Γ)	-0,237 (K – Γ)	-8,609
SnO ₂	2,64	2,416 (Γ)	-0,219 (K – Γ)	-8,097



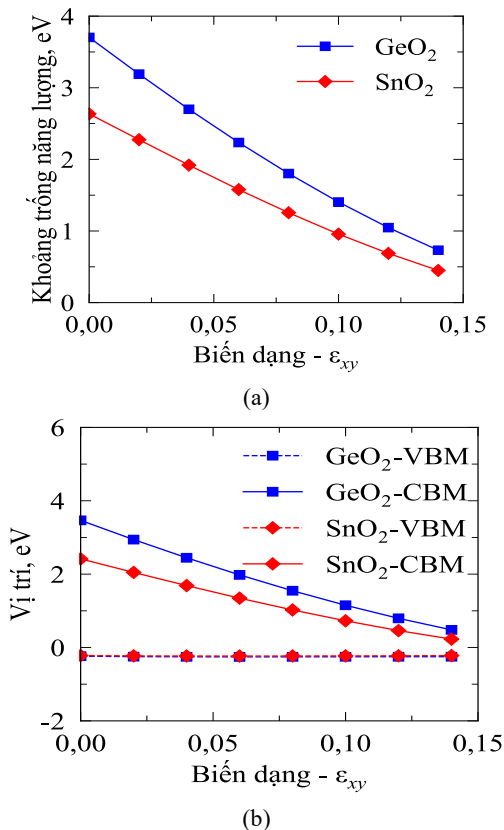
(a)



(b)

Hình 4. Trạng thái các dải năng lượng và mật độ trạng thái (DOS) khi cân bằng của cấu trúc vật liệu (a) GeO₂ và (b) SnO₂ đơn lớp

Để có thêm hiểu biết về đặc tính điện tử của hai cấu trúc vật liệu, nhóm tác giả đã tiến hành khảo sát cấu trúc vùng năng lượng tại một vài mức biến dạng kéo như được trình bày ở Hình 5. Kết quả cho thấy biến dạng kéo đã có những tác động tương đồng lên cả hai cấu trúc đơn lớp XO_2 đều có những đặc điểm điện tử cơ bản tương đồng. Trong khi các dải năng lượng ở vùng dẫn thay đổi liên tục về mức năng lượng, các dải năng lượng trong vùng hóa trị lại duy trì vị trí tương đối ổn định. Đáng chú ý, vị trí phân bố CBM và VBM không có thay đổi và giữ nguyên tại điểm Γ và vùng K- Γ ở mọi mức biến dạng. Như vậy, biến dạng kéo không chỉ làm thay đổi đến vị trí của các dải năng lượng mà còn làm biến đổi khoảng trống vùng năng lượng, trong khi vẫn duy trì tính chất bán dẫn gián tiếp của vật liệu.



Hình 6. (a) Sự biến động của khoảng trống năng lượng dưới tác dụng của biến dạng kéo, (b) Sự biến động về vị trí của các điểm cực trị trong cấu trúc vùng năng lượng của các vật liệu XO_2 đơn lớp

Hình 6(a) minh họa khoảng trống trong cấu trúc dải năng lượng của các cấu trúc đơn lớp XO_2 ở các trạng thái khác nhau. Kết quả tiết lộ rằng, cả hai cấu trúc đơn lớp XO_2 có ứng xử tương đồng với khoảng trống năng lượng thay đổi tuyến tính theo biến dạng kéo. Tại biến dạng $\epsilon_{xy} = 0,14$; khoảng trống vùng năng lượng giảm mạnh đối với cấu trúc đơn lớp GeO_2 và SnO_2 là 0,73 eV và 0,45 eV, tương ứng với mức suy giảm là 80% và 82% so với trạng thái cân bằng. Có thể nhận thấy, khoảng trống vùng năng lượng của SnO_2 có xu hướng giảm mạnh hơn so với GeO_2 . Phân tích trạng thái các dải năng lượng trên Hình 6(b) cho thấy biến dạng cơ học đã có tác động trực tiếp đến cấu trúc điện tử trong vật liệu, đặc biệt đã có tác động dịch chuyển đáng kể điểm CBM đối với cả hai cấu trúc đơn lớp GeO_2 và SnO_2 . Điều này cho thấy biến dạng

cơ học là một công cụ hiệu quả để điều chỉnh và tăng cường đặc tính điện tử của vật liệu.

4. Kết luận

Nghiên cứu này đã làm rõ tính chất cơ học và điện tử của các cấu trúc vật liệu XO_2 thông qua phương pháp nguyên lý đầu. Kết quả thu được đã chứng minh hai cấu trúc vật liệu đều đạt mức biến dạng kéo phá hủy $\epsilon_{xy} = 0,18$. Cấu trúc GeO_2 đơn lớp có ứng suất kéo lý tưởng $\sigma_{xy} = 16,15$ N/m, cao hơn so với cấu trúc SnO_2 . Trong trạng thái không biến dạng, cả hai vật liệu đều là bán dẫn với một khoảng trống vùng năng lượng lớn. Hơn nữa, mối liên hệ giữa biến dạng kéo và tính chất điện tử của vật liệu cũng được báo cáo toàn diện. Khi chịu tác động của biến dạng kéo, khoảng trống vùng năng lượng của cả hai vật liệu đều giảm hơn 80%, cho thấy sự cải thiện rõ rệt trong tính chất điện tử. Các kết quả thu được sẽ đóng góp quan trọng vào việc định hướng ứng dụng các vật liệu này trong việc chế tạo các thiết bị tiên tiến trong tương lai.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] K. S. Novoselov *et al.*, "Electric field effect in atomically thin carbon films", *Science*, Vol. 306, no. 1, pp. 666-669, 2004. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- [2] M. L. Hu, Z. Yu, J. L. Yin, C. X. Zhang, and L. Z. Sun, "A DFT-LDA study of electronic and optical properties of hexagonal boron nitride under uniaxial strain", *Computational Materials Science*, Vol. 54, no. 1, pp. 165-169, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.10.041>
- [3] N. H. Linh, N. M. Son, T. T. Quang, N. V. Hoi, V. V. Thanh, and D. V. Truong, "First-principles investigation on the electromechanical properties of monolayer 1H Pb-Dichalcogenides", *Materials Research Society of Korea*, Vol. 33, no. 5, pp. 189-194, 2023. <https://doi.org/10.3740/MRSK.2023.33.5.189>
- [4] Z. Zhen, G. Jie, L. Dan, and T. David, "Designing Isoelectronic Counterparts to Layered Group V Semiconductors", *ACS Nano*, Vol. 9, no. 8, pp. 8284-8290, 2015. <https://doi.org/10.1021/acsnano.5b02742>
- [5] Y. Ugur, De. Ilker, D. Çakır, G. Oguz, and S. Cem, "A systematical ab-initio review of promising 2D MXene monolayers towards Li-ion battery applications", *JPhys Energy*, Vol. 2, no. 3, pp. 1-15, 2020. <https://doi.org/10.1088/2515-7655/ab9fe3>
- [6] N. H. Linh, N. X. Dong, T. T. Quang, D. T. Hung, and D. V. Truong, "Revealing Photo-electrochemical, Piezoelectric, and Ferroelectric Properties of γ -SnTe Monolayer via Density Functional Theory", *Computational Materials Science*, Vol. 253, no., pp. 2025. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2025.113879>
- [7] N. H. Linh, T. T. Quang, N. M. Son, T. T. Thang, V. V. Thanh, and D. V. Truong, "Theoretical computational of electronic and transport properties and optical conductivity of monolayer NiS_2 under mechanical strain", *Journal of science and technology technical universities*, Vol. 33, no. 1, pp. 34-41, 2023. <https://doi.org/10.51316/jst.164.etsd.2023.33.1.5>
- [8] N. H. Linh, T. T. Quang, N. M. Son, V. Van Thanh, and D. V. Truong, "Prediction of mechanical, electronic and optical properties of monolayer 1T Si-dichalcogenides via first-principles theory", *Materials Today Communications*, Vol. 36, no., pp. 1-16, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106553>
- [9] V. A. Cao *et al.*, "Enhanced Piezoelectric Output Performance of the SnS_2/SnS Heterostructure Thin-Film Piezoelectric Nanogenerator Realized by Atomic Layer Deposition", *ACS Nano*, Vol. 15, no. 6, pp. 10428-10436, 2021. <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c02757>
- [10] Z. Luwei, W. Ning, and L. Yuliang, "Design, synthesis, and application of some two-dimensional materials", *Chemical Science*, Vol. 14, no. 20, pp. 5266-5290, 2023. <https://doi.org/10.1039/d3sc00487b>

- [11] K. Karim *et al.*, "Recent developments in emerging two-dimensional materials and their applications", *Journal of Materials Chemistry C*, Vol. 8, no. 2, pp. 387-440, 2020. <https://doi.org/10.1039/c9tc04187g>
- [12] T. T. Quang, N. H. Linh, D. T. Hung, P. Q. Viet, N. T. Kien, and D. V. Truong, "Calculation mechanical, electronic and piezoelectric properties of monolayer SiS_2 material using density functional theory", *Transport and Communications Science Journal*, Vol. 75, no. 9, pp. 2264-2277, 2024. <https://doi.org/10.47869/tcsj.75.9.3>
- [13] A. K. Ozyurt, D. Molavali, and H. Sahin, "Stable single layer structures of aluminum oxide: Vibrational and electronic characterization of magnetic phases", *Computational Materials Science*, Vol. 214, no., pp. 1-8, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111745>
- [14] H. Chen, C. Tan, K. Zhang, W. Zhao, X. Tian, and Y. Huang, "Enhanced photocatalytic performance of ZnO monolayer for water splitting via biaxial strain and external electric field", *Applied Surface Science*, Vol. 481, no., pp. 1064-1071, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.03.105>
- [15] Y. Gao, S. Meng, Q. Yang, Z. Wang, B. Gao, and F. Yang, "Mechanical-chemical coupling in gas-surface interaction: A study of strain effects on the catalytic properties of SiO_2 ", *Physics of Fluids*, Vol. 37, no. 2, pp. 064-078, 2025. <https://doi.org/10.1063/5.0245036>
- [16] M. Seal, N. Bose, and S. Mukherjee, "Application of GeO_2 nanoparticle as electrically erasable memory and its photocatalytic behaviour", *Materials Research Express*, Vol. 5, no. 6, pp. 1061-1070, 2018. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/aac66b>
- [17] N. T. H. Nhung *et al.*, "A novel synthesis of GeO_2/Ge composite as an anode material for lithium-ion batteries", *Chemical Physics Letters*, Vol. 801, no., pp. 054-062, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2022.139747>
- [18] L. Sun, Y. Liu, P. Wu, and W. Zhou, "Band structure and optical properties of $\text{MoS}_2/\text{SnO}_2$ hetero-bilayer from hybrid functional calculations", *Materials Chemistry and Physics*, Vol. 239, no., pp. 4061, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.122071>
- [19] W. Z. Xiao, G. Xiao, and L. L. Wang, "A first-principles study of the SnO_2 monolayer with hexagonal structure", *J Chem Phys*, Vol. 145, no. 17, pp. 174702, 2016. <https://doi.org/10.1063/1.4966581>
- [20] T. T. Quang, N. H. Linh, N. M. Son, T. T. Hoa, V. V. Thanh, and D. V. Truong, "Mechanical, electronic, and thermoelectric properties of low-dimensional SnS_x materials," in *Proceedings of the 11th National Conference on Mechanics*, Natural Science and Technology Publishing House, Hanoi, Viet Nam, 2022, pp. 406-413.
- [21] G. Tse, "The structural, electronic, optical, elastic, and vibrational properties of GeS_2 using HSE03: a first-principle investigation", *Journal of Computational Electronics*, Vol. 23, no. 5, pp. 968-976, 2024. <https://doi.org/10.1007/s10825-024-02196-z>
- [22] P. Giannozzi *et al.*, "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials", *J Phys Condens Matter*, Vol. 21, no. 39, pp. 1-19, 2009. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- [23] N. H. Linh, T. T. Quang, N. M. Son, N. V. Hoi, V. V. Thanh, and D. V. Truong, "First-principles study of electronic and optical properties and photocatalytic performance of MS monolayer under strain", *Journal of science and technology technical universities*, Vol. 33, no. 2, pp. 44-51, 2023. <https://doi.org/10.51316/jst.165.etsd.2023.33.2.7>
- [24] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple", *Physical Review Letters*, Vol. 77, no. 18, pp. 3865-3868, 1996. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- [25] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, "Special points for Brillouin-zone integrations", *Physical Review B*, Vol. 13, no. 12, pp. 5188-5192, 1976. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- [26] D.T. Hung, N. H. Linh, T. T. Quang, and D. V. Truong, "Investigation of Electromechanical Properties of CF Monolayer," in *Solid State Phenomena*, vol. 368 Switzerland: Trans Tech Publications, 2024, pp. 3-8.
- [27] T. V. Vu, H. V. Phuc, C. V. Nguyen, A. I. Kartamyshev, and N. N. Hieu, "A theoretical study on elastic, electronic, transport, optical and thermoelectric properties of Janus SnSO monolayer", *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 54, no. 47, pp. 2021. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac1d73>
- [28] T. N. Do, N. N. Hieu, N. A. Poklonski, N. T. Thanh Binh, C. Q. Nguyen, and N. D. Hien, "Computational insights into structural, electronic, and optical properties of Janus GeSO monolayer", *RSC Adv*, Vol. 11, no. 45, pp. 28381-28387, 2021. <https://doi.org/10.1039/d1ra05424d>
- [29] F. Mouhat and F. X. Coudert, "Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems", *Physical Review B - Condensed American Physical Society*, Vol. 90, no. 22, pp. 224104-4, 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.224104>
- [30] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene", *Science*, Vol. 321, no. 5887, pp. 385-8, 2008. <https://doi.org/10.1126/science.1157996>
- [31] L. Song *et al.*, "Large scale growth and characterization of atomic hexagonal boron nitride layers", *Nano Lett*, Vol. 10, no. 8, pp. 3209-15, 2010. <https://doi.org/10.1021/nl1022139>
- [32] K. Liu *et al.*, "Elastic properties of chemical-vapor-deposited monolayer MoS_2 , WS_2 , and their bilayer heterostructures", *Nano Lett*, Vol. 14, no. 9, pp. 5097-103, 2014. <https://doi.org/10.1021/nl501793a>
- [33] N. H. Linh, P. Q. Viet, T. T. Quang, D. T. Hung, and D. Van Truong, "First-principles analysis of mechanical, optoelectronics and piezoelectric properties in buckled honeycomb GeSe monolayer", *Surface Science*, Vol. 755, no., pp. 3217, 2025. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2025.122703>
- [34] M. Ruoho *et al.*, "Thin-Film Engineering of Mechanical Fragmentation Properties of Atomic-Layer-Deposited Metal Oxides", *Nanomaterials (Basel)*, Vol. 10, no. 3, pp. 4675, 2020. <https://doi.org/10.3390/nano10030558>