

## Nghiên cứu ảnh hưởng của biến dạng lên tính chất điện tử của vật liệu hai chiều đơn lớp $M\text{Ge}_2\text{N}_4$ ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ

Study on effect of strain on electronic properties of two-dimensional  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) monolayers using density functional theory

Võ Thị Tuyết Vi<sup>a</sup>, Lê Văn Hùng<sup>b</sup>, Nguyễn Thị Thắm Hồng<sup>c</sup>, Nguyễn Quang Cường<sup>d</sup>,  
Nguyễn Ngọc Hiếu<sup>d\*</sup>  
Vo Thi Tuyet Vi<sup>a</sup>, Le Van Hung<sup>b</sup>, Nguyen Thi Tham Hong<sup>c</sup>, Nguyen Quang Cuong<sup>d</sup>,  
Nguyen Ngoc Hieu<sup>d\*</sup>

<sup>a</sup>Khoa Cơ bản, Trường Đại học Y - Dược, Đại học Huế, Huế, Việt Nam

<sup>a</sup>Faculty of Basic Sciences, University of Medicine and Pharmacy, Hue University, Hue, Viet Nam

<sup>b</sup>Trường Trung học Phổ thông chuyên Lê Quý Đôn Quảng Trị, Quảng Trị, Việt Nam

<sup>b</sup>Le Quy Don Gifted High School of Quang Tri, Quang Tri, Viet Nam

<sup>c</sup>Trường Trung học Vinschool Ocean Park, Hà Nội, Việt Nam

<sup>c</sup>Vinschool Ocean Park Secondary and High School, Ha Noi, Viet Nam

<sup>d</sup>Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ Cao, Trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam

<sup>d</sup>Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Vietnam

(Ngày nhận bài: 10/01/2024, ngày phản biện xong: 01/02/2024, ngày chấp nhận đăng: 23/02/2024)

### Tóm tắt

Vật liệu hai chiều có cấu trúc bảy lớp nguyên tử  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  được tổng hợp thành công bằng thực nghiệm đã mở ra một hướng tiếp cận mới trong việc nghiên cứu các vật liệu có cấu trúc lớp. Theo xu hướng đó, trong bài báo này chúng tôi thiết kế và khảo sát các đặc trưng cấu trúc và các tính chất điện tử của vật liệu hai chiều  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Các kết quả thu được chứng minh rằng các đơn lớp  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) có cấu trúc ổn định và có khả năng chế tạo bằng thực nghiệm. Ở trạng thái cân bằng, cả hai đơn lớp  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  và  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  đều là những bán dẫn với vùng cấm xiên. Các tính toán cho thấy rằng biến dạng không chỉ ảnh hưởng đến cấu trúc vùng năng lượng mà còn làm biến đổi một cách đáng kể độ rộng vùng cấm của các đơn lớp  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$ . Các kết quả của chúng tôi góp phần làm sáng tỏ hơn các tính chất vật lý của họ vật liệu hai chiều  $\text{MA}_2\text{Z}_4$ .

**Từ khóa:** Vật liệu hai chiều; tính chất điện tử; lý thuyết phiếm hàm mật độ.

### Abstract

The successfully synthesized two-dimensional seven-atomic layer structure  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  has opened up a new research direction in the field of layered materials. Stimulated by this achievement, in this work, we design and investigate the structural and electronic properties of the two-dimensional material  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) using the density functional theory. The obtained results demonstrated that  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) monolayers are structurally stable and can be experimentally fabricated. At the ground state, both  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  and  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  are semiconductors with indirect band gaps.

\*Tác giả liên hệ: Nguyễn Ngọc Hiếu

Email: hieunn@duytan.edu.vn

It is found that strain not only affects the electronic energy band structure of  $MGe_2N_4$  monolayers but also significantly changes their band gap. Our findings contribute to clarifying the physical properties of the two-dimensional  $MA_2Z_4$  family.

*Keywords:* Two-dimensional materials; electronic properties; density functional theory.

## 1. Giới thiệu

Năm 2004, việc khám phá thành công graphene [1] đã thúc đẩy quá trình tìm kiếm và nghiên cứu một cách đáng kể các vật liệu hai chiều (2D) có cấu trúc lớp. Graphene đã cho thấy có nhiều ứng dụng trong các linh kiện và thiết bị mới. Tuy nhiên, với độ rộng vùng cấm bằng không, graphene đã gặp phải sự hạn chế trong các transistor hiệu ứng trường. Do đó, cộng đồng khoa học đã tiếp tục tổng hợp các vật liệu hai chiều khác có cấu trúc tương tự graphene, chẳng hạn silicene, germanene, các hợp chất kim loại chuyển tiếp nhóm dichalcogenide và các vật liệu monochalcogenide. Các hợp chất mới này đã chứng tỏ tiềm năng ứng dụng to lớn trong các thiết bị điện tử, cảm biến khí, lưu trữ năng lượng, công nghệ quang xúc tác [2-5]...

Năm 2017, một vật liệu hai chiều mới được chế tạo thành công đã tạo ra một xu hướng nghiên cứu mới trong lĩnh vực khoa học vật liệu. Đó là cấu trúc hai chiều bất đối xứng Janus  $MoSSe$  [6, 7]. Chính sự khác biệt trong kích thước nguyên tử giữa hai loại nguyên tử ở các bề mặt khác nhau đã dẫn đến sự phá vỡ đối xứng trong cấu trúc Janus. Sự phá vỡ cấu trúc đối xứng đã dẫn đến các tính chất vật lý khác biệt với so với các vật liệu đối xứng, với các ứng dụng trong các thiết bị nano mới trong các lĩnh vực áp điện, quang xúc tác phân tách nước [8, 9]... Nhiều nghiên cứu về các vật liệu Janus đã được tiến hành và ngày càng gia tăng trong thời gian gần đây.

Năm 2020, bằng phương pháp lắng đọng hơi hóa học, vật liệu hai chiều có cấu trúc bảy lớp nguyên tử  $MoSi_2N_4$  được tổng hợp thành công bằng thực nghiệm đã mở ra một hướng tiếp cận mới trong việc nghiên cứu các vật liệu hai chiều [10]. Theo xu hướng đó, năm 2021, họ vật liệu hai chiều  $MA_2Z_4$  gồm cấu trúc bảy lớp nguyên tử đã được tiên đoán [11]. Nhóm tác giả đã báo

cáo phương pháp để xây dựng các đơn lớp  $MA_2Z_4$  với cấu trúc xếp lớp bằng cách xen kẽ một đơn lớp  $MZ_2$  loại  $MoS_2$  vào một đơn lớp  $A_2Z_2$  loại  $InSe$ . Bằng các tính toán dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ, họ vật liệu  $MA_2Z_4$  thể hiện các tính chất điện tử phong phú và độ linh động điện tử tuyệt vời so với các vật liệu khác [11]. Do đó, trong bài báo này, chúng tôi sẽ nghiên cứu một cách chi tiết và hệ thống các đặc trưng cấu trúc và tính chất điện tử của vật liệu hai chiều  $MGe_2N_4$  ( $M = Mo, W$ ) bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Đồng thời, ảnh hưởng của biến dạng cơ học lên các tính chất điện tử của vật liệu cũng sẽ được khảo sát trong bài báo này.

## 2. Phương pháp tính toán

Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu các tham số cấu trúc và đặc tính điện tử của đơn lớp  $MGe_2N_4$  ( $M = Mo, W$ ) bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) thông qua gói phần mềm mô phỏng VASP [12, 13]. Để tính các tương tác trao đổi tương quan trong vật liệu, chúng tôi sử dụng phương pháp gần đúng gradient suy rộng (GGA) với phiếm hàm PBE (Perdew, Burke và Ernzerhof) [14]. Chúng tôi cũng sử dụng phiếm hàm lai HSE06 để ước lượng giá trị năng lượng vùng cấm một cách chính xác hơn [15]. Để khảo sát tương tác van der Waals trong vật liệu xếp lớp 2D, chúng tôi sử dụng phương pháp phiếm hàm mật độ cải tiến DFT-D2 [16]. Chúng tôi sử dụng hiệu chỉnh lưỡng cực để khảo sát thể tích điện ở các mặt khác nhau của vật liệu bất đối xứng Janus [17]. Vùng Brillouin được chia thành lưới  $(15 \times 15 \times 1)$   $k$ -mesh theo phương pháp Monkhorst-Pack. Chúng tôi sử dụng phần mềm mô phỏng PHONONY [18] để tính toán phổ phonon của các vật liệu. Ngưỡng năng lượng cho cơ sở sóng phẳng được thiết lập là 500 eV. Tất cả các cấu trúc đơn lớp được tối ưu hóa hoàn

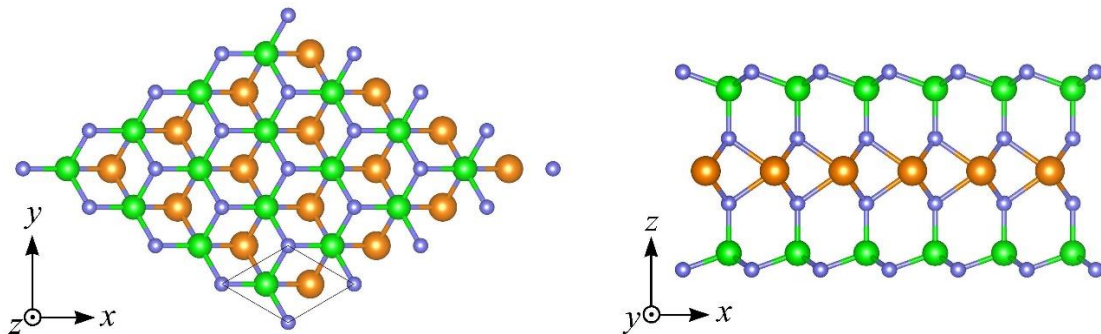
toàn với ngưỡng hội tụ lực tác dụng lên mỗi nguyên tử là  $10^{-3}$  eV/Å. Một khoảng chân không 20 Å dọc theo trục  $z$  được thêm vào để loại bỏ sự tương tác giữa các lớp lân cận.

### 3. Kết quả và thảo luận

#### 3.1. Cấu trúc tinh thể và độ ổn định của cấu trúc

Đơn lớp hai chiều  $MGe_2N_4$  ( $M = Mo, W$ ) có cấu trúc tinh thể được minh họa như ở Hình 1. Từ hình vẽ chúng ta có thể thấy rằng đơn lớp  $MGe_2N_4$  được tạo thành bởi bảy lớp nguyên tử theo thứ tự sắp xếp N-Ge-N-M-N-Ge-N. Hằng

số mạng của các đơn lớp  $MoGe_2N_4$  và  $WGe_2N_4$  lần lượt là 2,99 và 3,00 Å. Bề dày của hai đơn lớp này cũng có xu hướng tăng dần từ  $MoGe_2N_4$  đến  $WGe_2N_4$ , cụ thể bề dày của  $MGe_2N_4$  là 7,39 và 7,41 Å. Việc tăng hằng số mạng và bề dày của các vật liệu khi M thay đổi từ Mo sang W có thể được giải thích do bán kính nguyên tử của W lớn hơn của Mo. Các tham số cấu trúc khác như khoảng cách nguyên tử giữa M và N hay giữa Ge và N được bình bày ở Bảng 1. Kết quả thu được của chúng tôi về các tham số cấu trúc của đơn lớp hai chiều  $MGe_2N_4$  ( $M = Mo, W$ ) phù hợp với các tính toán lý thuyết trước đây [11].



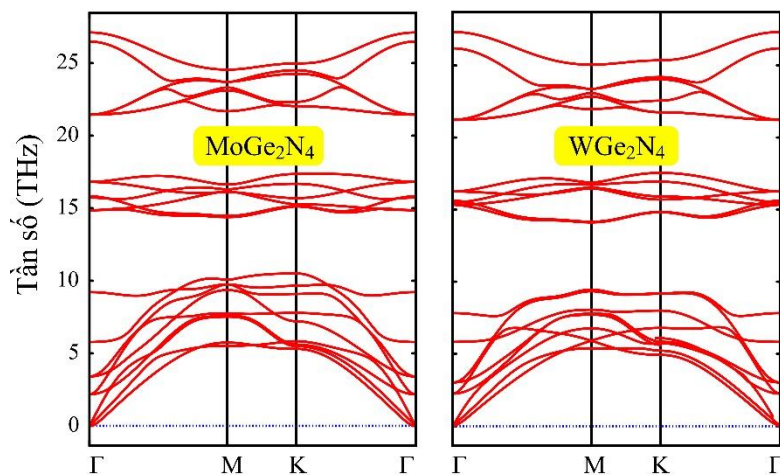
Hình 1. Cấu trúc tinh thể của đơn lớp  $MGe_2N_4$  ( $M = Mo, W$ ) theo các góc nhìn khác nhau.

Chúng tôi sử dụng gói mô phỏng PHONOPY [18] để khảo sát độ ổn định của hai đơn lớp  $MGe_2N_4$  ( $M = Mo, W$ ) thông qua việc tính toán phổ phonon của chúng. Kết quả thu được của phổ phonon được biểu diễn ở Hình 2. Chúng ta thấy rằng có 21 nhánh dao động trong toàn miền Brillouin do có 7 nguyên tử trong một ô đơn vị, bao gồm 3 nhánh dao động âm và 18 nhánh dao động quang. Cả 21 nhánh dao động này đều có

tần số dương trong toàn miền Brillouin, điều này chứng tỏ hai đơn lớp  $MGe_2N_4$  ( $M = Mo, W$ ) có cấu trúc ổn định về mặt động học và có khả năng tổng hợp bằng thực nghiệm. Bên cạnh đó, chúng ta cũng thấy rằng có sự chồng lấn giữa các phonon quang và phonon âm kéo theo sự tán xạ giữa các nhánh dao động. Điều này có thể ảnh hưởng đến độ dẫn nhiệt của các vật liệu được khảo sát.

Bảng 1. Hằng số mạng  $a$ , chiều dài liên kết  $d_{M-N}$ ,  $d_{Ge-N1}$ ,  $d_{Ge-N2}$ , bề dày  $h$  và độ rộng vùng cấm  $E_g$  được tính theo phiếm hàm PBE và HSE06 của đơn lớp  $MGe_2N_4$  ( $M = Mo, W$ ).

	$a$ (Å)	$d_{M-N}$ (Å)	$d_{Ge-N1}$ (Å)	$d_{Ge-N2}$ (Å)	$h$ (Å)	$E_g^{PBE}$ (eV)	$E_g^{HSE06}$ (eV)
$MoGe_2N_4$	2,99	2,11	1,86	1,84	7,39	1,12	1,43
$WGe_2N_4$	3,00	2,12	1,86	1,84	7,41	1,32	1,72

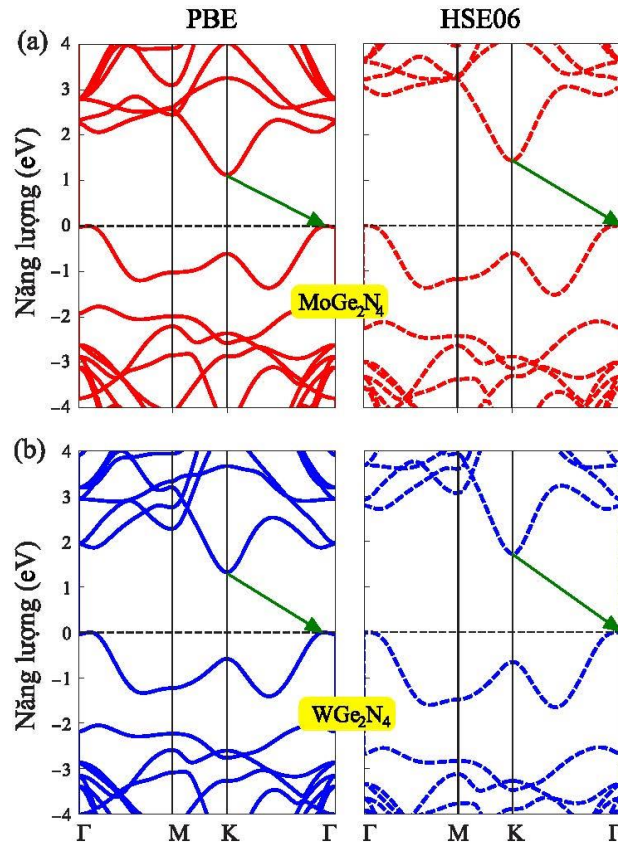


Hình 2. Phổ phonon của đơn lớp  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ).

### 3.2. Tính chất điện tử

Các tính chất điện tử của hai đơn lớp  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) được chúng tôi khảo sát bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Ở đây, chúng tôi sử dụng cả phiếm hàm PBE và phiếm hàm lai HSE06 để nghiên cứu cấu trúc vùng năng lượng điện tử của hai vật liệu  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  và  $\text{WGe}_2\text{N}_4$ . Các kết quả tính toán này được chúng tôi trình bày ở Hình 3. Đầu tiên chúng ta xem xét cấu trúc vùng năng lượng điện tử của các đơn lớp được tính theo phiếm hàm PBE. Hình 3(a) chỉ ra rằng cực tiểu vùng dẫn (CBM) của các hợp chất  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) nằm tại điểm K, còn cực đại vùng hóa trị (VBM) nằm trên đường thẳng KG, sát với điểm G. Do đó, các đơn lớp  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) là các bán dẫn có vùng cấm xiên theo phương pháp PBE. Hình 3(b) trình bày cấu trúc vùng năng lượng điện tử được tính theo phiếm hàm lai HSE06 của

hai đơn lớp. Chúng ta thấy rằng dáng điệu của cấu trúc vùng năng lượng được xác định bởi hai phương pháp gần như nhau, tuy nhiên, VBM theo phương pháp HSE06 nằm tại điểm G còn CBM vẫn nằm tại điểm K. Do đó, bản chất bán dẫn với vùng cấm xiên vẫn được thể hiện trong phương pháp HSE06. Ngoài ra, các báo cáo đã chỉ ra rằng phương pháp sử dụng phiếm hàm lai HSE06 cho kết quả độ rộng vùng cấm lớn hơn và chính xác hơn so với phiếm hàm PBE. Cụ thể, độ rộng vùng cấm của đơn lớp  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  là 1,12 eV (theo PBE) hoặc 1,43 eV (theo HSE06); độ rộng vùng cấm của đơn lớp  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  là 1,32 eV (theo PBE) hoặc 1,72 eV (theo HSE06). Kết quả này là phù hợp với các tính toán trước đây của Wang và cộng sự [11]. Bên cạnh đó, các tính toán của chúng tôi cho thấy rằng  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  có độ rộng vùng cấm lớn hơn  $\text{MoGe}_2\text{P}_4$  (0,56 eV; PBE) và  $\text{MoGe}_2\text{As}_4$  (0,47 eV; PBE) [11].



Hình 3. Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ).

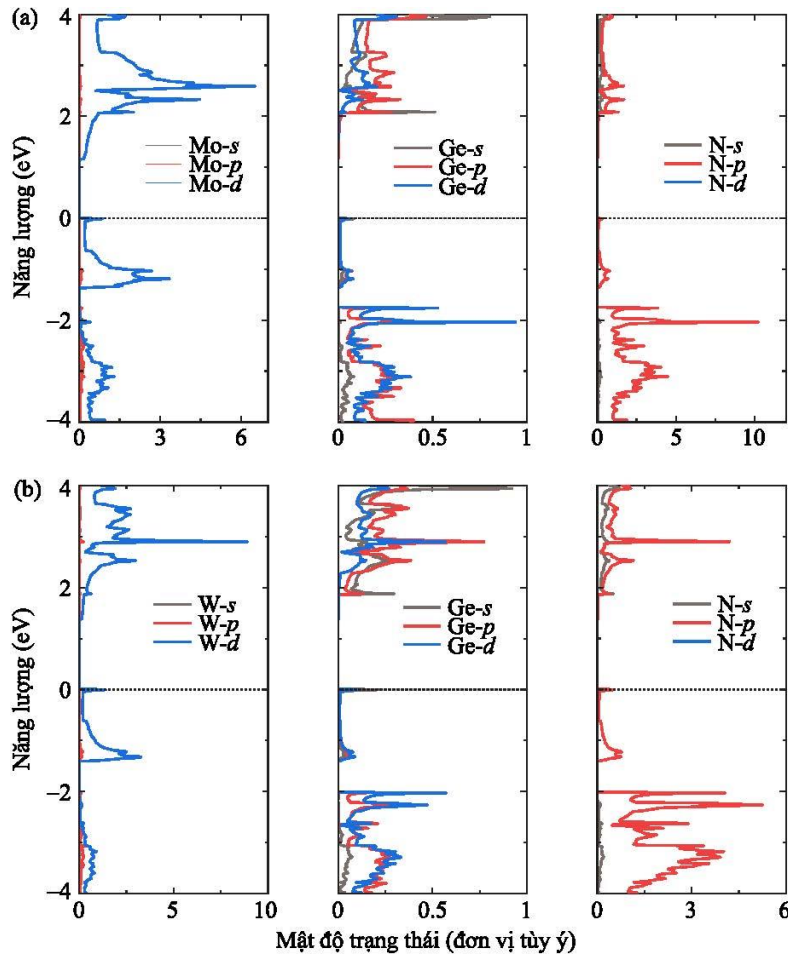
Tiếp theo, chúng tôi xem xét sự đóng góp của các orbital nguyên tử vào việc hình thành cấu trúc vùng năng lượng điện tử. Để làm được điều này, chúng tôi nghiên cứu mật độ trạng thái riêng phần (PDOS) của các hợp chất 2D  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  và  $\text{WGe}_2\text{N}_4$ . Các tính toán thu được của PDOS được mô tả chi tiết ở Hình 4. Đối với đơn lớp  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$ , orbital  $d$  của kim loại Mo đóng vai trò chủ yếu vào việc hình thành vùng dẫn. Trong khi đó, vùng hóa trị của  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  được tạo thành chủ yếu từ orbital  $p$  của N. Orbital  $d$  của kim loại Mo cũng tham gia vào việc hình thành vùng hóa trị, tuy nhiên vai trò của orbital này không lớn so với orbital N- $p$ . Đối với đơn lớp  $\text{WGe}_2\text{N}_4$ , orbital  $d$  của kim loại W đóng vai trò chính vào việc hình thành vùng dẫn, tiếp theo có thể kể đến sự đóng góp của orbital N- $p$ . Vùng hóa trị của vật liệu  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  được tạo thành chủ yếu nhờ vai trò của orbital N- $p$  và một phần đóng góp của orbital W- $d$ .

### 3.3. Ảnh hưởng của biến dạng lên tính chất điện tử

Như chúng ta đã biết, các tác động bên ngoài có thể làm thay đổi tính chất điện tử của vật liệu 2D. Các công trình trước đây đã chỉ ra rằng điện trường ngoài ảnh hưởng đến khối lượng hiệu dụng của lỗ trống trong đơn lớp InSe, dẫn đến làm thay đổi độ linh động của nó [19]. Ngoài ra, điện trường còn làm thay đổi cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu 2D, gây ra sự chuyển pha từ bán dẫn có vùng cấm thẳng sang bán dẫn có vùng cấm xiên, hoặc từ bán dẫn sang kim loại [5, 20]. Bên cạnh điện trường, biến dạng cũng được xem là một trong những cách phổ biến để điều chỉnh tính chất điện tử của các hợp chất đơn lớp. Cấu trúc vùng năng lượng điện tử, độ rộng vùng cấm phụ thuộc lớn vào cường độ của biến dạng. Biến dạng cũng có thể gây ra sự chuyển pha, làm thay đổi các đặc trưng điện tử trong đơn lớp 2D [21, 22]. Khi bị biến dạng, cấu trúc tinh thể của vật liệu bị thay đổi, đặc biệt là chiều dài liên kết

hóa học giữa các nguyên tử trong vật liệu. Điều này làm cho năng lượng nhảy nút giữa các nguyên tử cũng thay đổi theo. Đây là một trong

những nguyên nhân chính làm cho các đặc trưng điện tử của vật liệu thay đổi khi bị biến dạng.

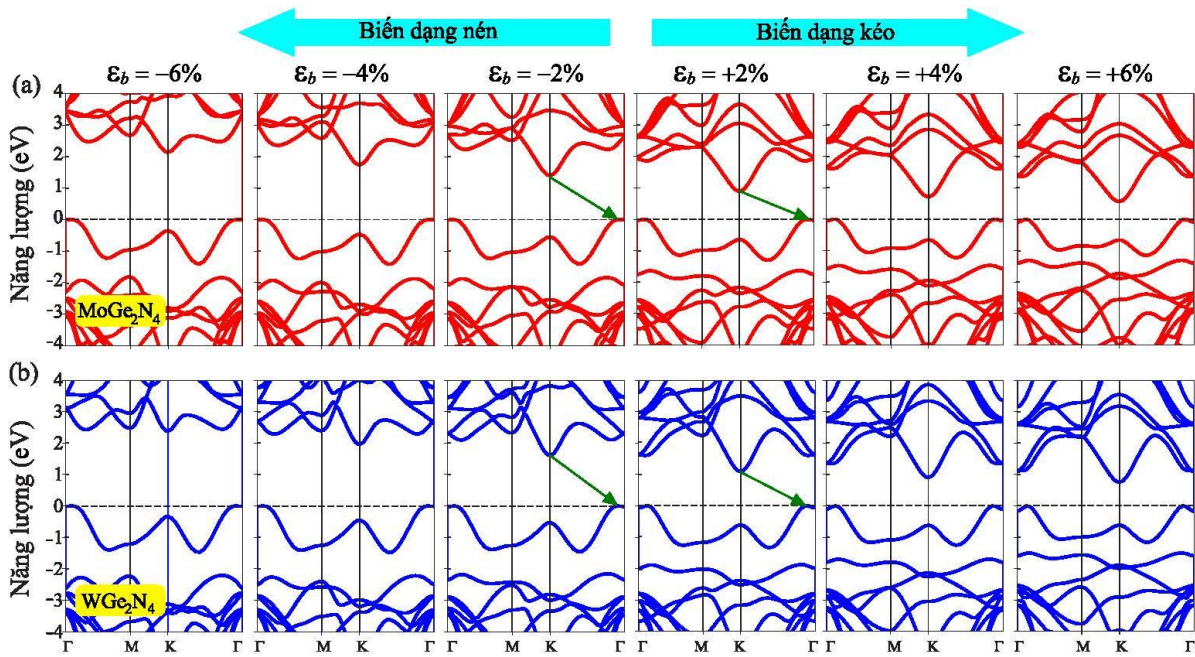


Hình 4. Mật độ trạng thái riêng phần (PDOS) của đơn lớp MGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> (M = Mo, W).

Trong phần này, chúng tôi nghiên cứu ảnh hưởng của biến dạng lên các tính chất điện tử của đơn lớp MGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> (M = Mo, W). Biến dạng phẳng  $\epsilon_b$  là biến dạng nén hoặc kéo đồng thời theo hai hướng  $x$  và  $y$ . Độ biến dạng  $\epsilon_b$  được định nghĩa như sau:

$$\epsilon_b = \frac{a - a_0}{a_0} \cdot 100\%, \quad (1)$$

trong đó,  $a_0$  và  $a$  lần lượt là hằng số mạng ở trạng thái cơ bản và ở trạng thái biến dạng.  $\epsilon_b$  sẽ có giá trị dương nếu biến dạng là kéo và ngược lại. Ở đây, các đơn lớp MGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> (M = Mo, W) được chúng tôi khảo sát trong khoảng biến dạng từ -6% đến 6%.

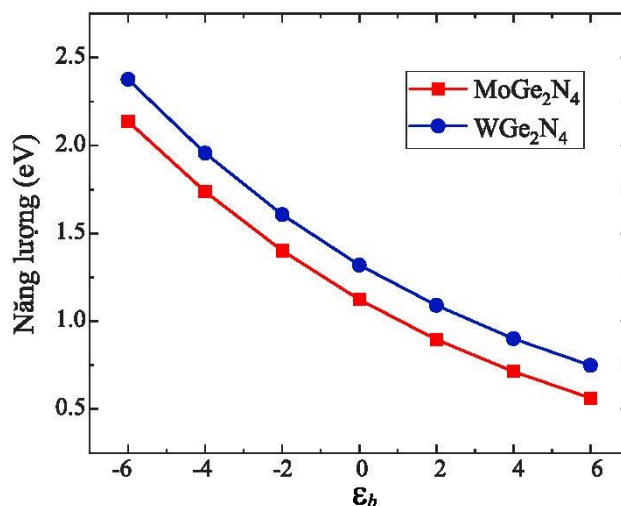


Hình 5. Ảnh hưởng của biến dạng lên cấu trúc vùng năng lượng của đơn lớp  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ).

Hình 5 trình bày cấu trúc vùng năng lượng điện tử của hai đơn lớp  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  và  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  khi chịu tác động của biến dạng. Kết quả tính toán của chúng tôi cho thấy rằng biến dạng có ảnh hưởng đến cấu trúc vùng năng lượng điện tử, đặc biệt là độ rộng vùng cấm. Hình 5(a) cho thấy biến dạng nén làm cho vùng dẫn tiến ra xa mức Fermi, dẫn đến việc tăng giá trị năng lượng vùng cấm của hợp chất  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$ . Tuy nhiên, vị trí của VBM và CBM không bị thay đổi trong khoảng biến dạng từ  $-6\%$  đến  $0$ . Ngược lại, biến dạng kéo có xu hướng làm dịch chuyển vùng dẫn lại gần mức Fermi nên độ rộng vùng cấm của đơn lớp  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  bị thu hẹp. Vùng hóa trị ở lân cận vị trí của VBM bị uốn cong rõ rệt khi cường độ biến dạng kéo càng lớn. Mặc dù vậy, vị trí của VBM và CBM dưới tác động của biến dạng kéo vẫn giữ nguyên tại các điểm như ở trạng thái cơ bản, do đó đặc trưng bán dẫn vùng cấm xiên vẫn không bị thay đổi. Hình 5(b) trình bày sự biến đổi cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  khi có mặt biến dạng. Các kết quả nêu trên đối với đơn lớp  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  cũng đúng đối với

đơn lớp  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  khi nó chịu tác động của biến dạng phẳng  $\epsilon_b$ .

Sự phụ thuộc của độ rộng vùng cấm vào cường độ biến dạng của các đơn lớp  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) được mô tả ở Hình 6. Kết quả tính toán của chúng tôi cho thấy rằng xu hướng thay đổi giá trị năng lượng vùng cấm theo cường độ biến dạng của hai hợp chất  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  và  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  là tương tự nhau. Hình 6 chỉ ra rằng biến dạng nén làm tăng độ rộng vùng cấm còn biến dạng kéo làm giảm độ rộng vùng cấm. Trong toàn miền biến dạng, sự chênh lệch giữa giá trị vùng cấm lớn nhất và giá trị vùng cấm nhỏ nhất trong  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$  và  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  lần lượt là  $1,58 \text{ eV}$  và  $1,63 \text{ eV}$ . Như vậy dưới tác động của biến dạng phẳng, năng lượng vùng cấm của đơn lớp  $\text{WGe}_2\text{N}_4$  bị thay đổi nhiều hơn so với đơn lớp  $\text{MoGe}_2\text{N}_4$ . Việc điều chỉnh dễ dàng độ rộng vùng cấm bằng biến dạng làm cho các hợp chất 2D  $M\text{Ge}_2\text{N}_4$  ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) có tiềm năng ứng dụng trong các thiết bị cơ-điện tử nano.



Hình 6. Sự phụ thuộc độ rộng vùng cấm vào biến dạng của đơn lớp MGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> (M = Mo, W).

#### 4. Kết luận

Bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ, chúng tôi đã nghiên cứu cấu trúc, độ ổn định và các tính chất điện tử của các đơn lớp hai chiều MGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> (M = Mo, W). Kết quả tính toán đã chỉ ra rằng hai đơn lớp MGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> (M = Mo, W) có cấu trúc ổn định về mặt động học và có khả năng tổng hợp bằng thực nghiệm. Hai phiếm hàm PBE và HSE06 đều cho thấy hai đơn lớp này là các bán dẫn có vùng cấm xiên. Độ rộng vùng cấm của MoGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> là 1,12 eV (theo PBE) hoặc 1,43 eV (theo HSE06), và của WGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> là 1,32 eV (theo PBE) hoặc 1,72 eV (theo HSE06). Chúng tôi cũng đã tính toán sự đóng góp của các obitan nguyên tử lên việc hình thành cấu trúc vùng năng lượng. Ngoài ra, ảnh hưởng của biến dạng lên các tính chất điện tử của các đơn lớp MGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> cũng được khảo sát. Các tính toán đã chứng minh rằng biến dạng phẳng làm biến đổi cấu trúc vùng năng lượng điện tử. Độ rộng vùng cấm của MGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> cũng bị thay đổi đáng kể khi có mặt biến dạng. Các kết quả thu được chỉ ra triển vọng ứng dụng của các vật liệu hai chiều MGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> (M = Mo, W) trong các thiết bị điện tử.

**Lời cảm ơn:** Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Y - Dược, Đại học Huế trong đề tài mã số 03/23.

#### Tài liệu tham khảo

- [1] Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., Grigorieva, I.V., Firsov, A.A. (2004). "Electric field effect in atomically thin carbon films". *Science*, 306, 66.
- [2] Lugovskoi, A.V., Katsnelson, M.I., Rudenko, A.N. (2019). "Strong electron-phonon coupling and its influence on the transport and optical properties of hole-doped single-layer InSe". *Phys. Rev. Lett.*, 123, 176401.
- [3] Poklonski, N.A., Vyrko, S.A., Siahlo, A.I., Poklonskaya, O.N., Ratkevich, S.V., Hieu, N.N., Kocherzhenko, A.A. (2019). "Synergy of physical properties of low-dimensional carbon-based systems for nanoscale device design". *Mater. Res. Express*, 6(4), 042002.
- [4] Yuan, J., Chen, Y., Xie, Y., Zhang, X., Rao, D., Guo, Y., Yan, X., Feng, Y.P., Cai, Y. (2020). "Squeezed metallic droplet with tunable Kubo gap and charge injection in transition metal dichalcogenides". *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 117, 12, 6362.
- [5] Vi, V.T., Hieu, N.N., Hoi, B.D., Binh, N.T., Vu, T.V. (2020). "Modulation of electronic and optical properties of GaTe monolayer by biaxial strain and electric field". *Superlattices and Microstructures*, 140, 106435.
- [6] Lu, A-Y, Zhu, H., Xiao, J., Chuu, C-P, Han, Y., Chiu, M-H, Cheng, C.C., Yang, C.W., Wei, K-H, Yang, Y., Wang, Y., Sokaras, D., Nordlund, D., Yang, P., Muller, D.A., Chou, M-Y, Zhang, X., Li, L-J. (2017). "Janus monolayers of transition metal dichalcogenides". *Nat. Nanotechnol.*, 12, 744.
- [7] Zhang, J., Jia, S., Kholmanov, I., Dong, L., Er, D., Chen, W., Guo, H., Jin, Z., Shenoy, V.B., Shi, L., Lou, J. (2017). "Janus monolayer transition-metal dichalcogenides". *ACS Nano*, 11(8), 8192.



- [8] Vu, T.V., Vi, V.T.T., Nguyen, C.V., Phuc, H.V., Hieu, N.N. (2020). “Computational prediction of electronic and optical properties of Janus Ga<sub>2</sub>SeTe monolayer”. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 53(45), 455302.
- [9] Vu, T.V., Vi, V.T.T., Phuc, H.V., Kartamyshev, A.I., Hieu, N.N. (2021). “Oxygenation of Janus group III monochalcogenides: First-principles insights into GaInXO (X = S, Se, Te) monolayers”. *Phys. Rev. B.*, 104, 115410.
- [10] Hong, Y-L, Liu, Z., Wang, L., Zhou, T., Ma, W., Xu, C., Feng, S., Chen, L., Chen, M.L., Sun, D.M., Chen, X-Q, Cheng, H-M, Ren, W. (2020). “Chemical vapor deposition of layered two-dimensional MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> materials”. *Science*, 369, 670–674.
- [11] Wang, L., Shi, Y., Liu, M., Zhang, A., Hong, Y-L., Li, R., Gao, Q., Chen, M., Ren, W., Cheng, H-M., Li, Y., Chen, X-Q. (2021). “Intercalated architecture of MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub> family layered van der Waals materials with emerging topological, magnetic and superconducting properties”. *Nat. Commun.*, 12, 2361.
- [12] Kresse, G., and Furthmüller, F. (1996). “Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set”. *Phys. Rev. B.*, 54, 11169.
- [13] Kresse, G., and Furthmüller, F. (1996). “Efficiency of *ab-initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set”. *Comput. Mater. Sci.*, 6, 15.
- [14] Perdew, J.P., Burke, K., Ernzerhof, M. (1996). “Generalized gradient approximation made simple”. *Phys Rev Lett.*, 77(18), 3865.
- [15] Heyd, J., Scuseria, G.E. (2004). “Efficient hybrid density functional calculations in solids: Assessment of the Heyd–Scuseria–Ernzerhof screened Coulomb hybrid functional”. *J. Chem. Phys.*, 121, 1187–1192.
- [16] Grimme, S. (2006). “Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction”. *J. Comput. Chem.*, 27(15), 1787-99.
- [17] Bengtsson, L. (1999). “Dipole correction for surface supercell calculations”. *Phys. Rev. B.*, 59, 12301.
- [18] Nosé, S. (1984). “A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods”. *J. Chem. Phys.*, 81, 511.
- [19] Wang, X.P., Li, X.B., Chen, N.K., Zhao, J.H., Chen, Q.D., Sun, H.B. (2018). “Electric field analyses on monolayer semiconductors: the example of InSe”. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20(10), 6945-6950.
- [20] Vu, T.V., Vi, V.T., Phuc, H.V., Nguyen, C.V., Poklonski, N.A., Duque, C.A, ... & Hieu, N.N. (2021). “Electronic, optical, and thermoelectric properties of Janus In-based monochalcogenides”. *J. Phys.: Conden. Matter*, 33(22), 225503.
- [21] Vi, V.T.T., Linh, T.P.T., Nguyen, C.Q., Hieu, N.N. (2022). “Tunable electronic properties of novel 2D Janus MSiGeN<sub>4</sub> (M = Ti, Zr, Hf) monolayers by strain and external electric field”. *Adv. Theory Simul.*, 5, 2200499.
- [22] Vi, V.T., Hoi, B.D., Nguyen, C.Q., Hieu, N.N. (2023). “Anisotropic crystal structure and high electron mobility of novel ternary Janus P<sub>6</sub>XY Monolayers (X/Y= S, Se, Te): First-Principles Examinations”. *Adv. Theory Simul.*, 6, 2300471.