



Nghiên cứu các đặc trưng cơ học và tính chất điện tử của đơn lớp Janus GeSiTe₂ bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ

Study of the mechanical characteristics and electronic properties of Janus GeSiTe₂ monolayer using density functional theory

Võ Thị Tuyết Vi^a, Nguyễn Quang Cường^b, Nguyễn Ngọc Hiếu^{b*}
Vo Thi Tuyet Vi^a, Nguyen Quang Cuong^b, Nguyen Ngoc Hieu^{b*}

^aKhoa Cơ bản, Trường Đại học Y - Dược, Đại học Huế, Huế, Việt Nam

^aFaculty of Basic Sciences, University of Medicine and Pharmacy, Hue University, Hue, Viet Nam

^bViện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam

^bInstitute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Viet Nam

(Ngày nhận bài: 20/03/2025, ngày phản biện xong: 04/04/2025, ngày chấp nhận đăng: 30/05/2025)

Tóm tắt

Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu các đặc trưng cơ học và các tính chất điện tử của đơn lớp Janus GeSiTe₂ bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Các tính toán cho thấy rằng đơn lớp Janus GeSiTe₂ có cấu trúc tinh thể bền vững và có thể chế tạo bằng các phương pháp thông thường. Janus GeSiTe₂ có các đặc trưng cơ học dị hướng do có cấu trúc tinh thể dị hướng. Đặc biệt, Janus GeSiTe₂ có hệ số Poisson âm, phù hợp sử dụng trong các ứng dụng lưu trữ năng lượng hay trong công nghệ chống va đập. Ở trạng thái cơ bản, đơn lớp Janus GeSiTe₂ là một kim loại dựa trên các tính toán với phiếm hàm PBE. Tuy nhiên, hiệu chỉnh cấu trúc vùng năng lượng với phiếm hàm HSE06 cho thấy đơn lớp Janus là một bán dẫn có vùng cấm xiên với giá trị vùng cấm 0.42 eV. Kết quả tính toán cũng chỉ ra có sự chênh lệch thế điện giữa hai bề mặt của đơn lớp Janus GeSiTe₂ do cấu trúc bất đối xứng của nó. Kết quả nghiên cứu không chỉ cung cấp những tính chất vật lý cơ bản của đơn lớp Janus GeSeTe₂ mà còn góp phần định hướng ứng dụng vật liệu này trong công nghệ trong tương lai.

Từ khóa: Vật liệu Janus hai chiều; cấu trúc tinh thể dị hướng; tỉ số Poisson âm; lý thuyết phiếm hàm mật độ.

Abstract

In this study, we investigate the mechanical characteristics and electronic properties of the Janus GeSiTe₂ monolayer using density functional theory. Our simulations reveal that the Janus GeSiTe₂ monolayer possesses a stable crystal structure and can be synthesized using conventional experimental techniques. Owing to its anisotropic crystal structure, the material exhibits direction-dependent mechanical behavior, including a notable negative Poisson's ratio, an attribute that makes it promising for applications in energy storage and shock-absorbing technologies. At the ground state, calculations using the PBE functional classify the monolayer as metallic. However, when the electronic band structure is corrected using the HSE06 hybrid functional, the Janus GeSiTe₂ is identified as an indirect bandgap semiconductor with a narrow bandgap of 0.42 eV. Additionally, the obtained results also indicate that there is a difference in electrostatic potential between the two surfaces of Janus GeSiTe₂ monolayer due to its asymmetric structure. These findings not only provide fundamental insights into the physical characteristics of the Janus GeSiTe₂ monolayer but also highlight its potential for integration into next-generation electronic and energy-related applications.

Keywords: Two-dimensional Janus material; anisotropic crystal structure; negative Poisson's ratio; density functional theory.

*Tác giả liên hệ: Nguyễn Ngọc Hiếu

Email: hieunn@duytan.edu.vn

1. Giới thiệu

Vật liệu hai chiều có cấu trúc lớp là đối tượng thu hút được sự chú ý đặc biệt của cộng đồng khoa học trong thời gian gần đây do chúng có những tính chất vật lý nổi trội cũng như triển vọng ứng dụng to lớn trong công nghệ [1]. Vật liệu hai chiều có cấu trúc lớp là họ vật liệu đa dạng về thành phần cấu tạo cũng như cấu trúc tinh thể. Gần đây, vật liệu hai chiều đa thành phần có cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng (thường được gọi là vật liệu Janus hai chiều) nổi lên như là một nhóm vật liệu có khả năng ứng dụng cao trong các lĩnh vực khác nhau của công nghệ do chúng có các đặc trưng vật lý khác lạ mà không tồn tại trong các cấu trúc đối xứng tương ứng của chúng [2].

Những vật liệu Janus hai chiều đầu tiên được thực nghiệm chế tạo thành công có thể kể đến đó là Janus graphene [3]. Janus graphene được tạo ra bằng cách halogen hóa một bề mặt của tấm graphene để tạo nên cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng. Janus graphene có một bề mặt là chứa các nguyên tử carbon của tấm graphene và mặt kia là các nguyên tử halogen. Việc halogen hóa hay hydrogen hóa các bề mặt vật liệu là một trong những phương pháp thông dụng nhằm để tạo ra cấu trúc Janus nói chung cũng như nhằm mục đích thay đổi tính chất vật lý của vật liệu hai chiều nói riêng. Dấu mốc quan trọng trong việc chế tạo vật liệu Janus hai chiều đó là việc chế tạo thành công bằng thực nghiệm Janus MoSSe [4]. Việc chế tạo thành công Janus MoSSe tạo ra sự phong phú trong việc hình thành các vật liệu đa thành phần có cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng. Điều này cũng đã thúc đẩy một cách mạnh mẽ các nghiên cứu lý thuyết về hệ vật liệu bất đối xứng thú vị này. Hàng loạt các nghiên cứu về vật liệu Janus hai chiều đa thành phần đã được thực hiện ngay sau đó, có thể kể đến như Janus của hợp chất kim loại nhóm III monochalcogenide, Janus của hợp chất họ MA_2Z_4 (M = Kim loại chuyển tiếp;

$A = \text{Ge, Si; } Z = \text{N, P, As}$) [5] và đặc biệt là Janus của hợp chất nhóm IV monochalcogenide [6]. Hợp chất nhóm IV monochalcogenide là những vật liệu không độc tố, thân thiện với môi trường và giá thành chế tạo thấp. Nhóm vật liệu này có nhiều tính chất vật lý hấp dẫn và cho thấy được triển vọng ứng dụng của nó trong nhiều lĩnh vực khác nhau của công nghệ.

Một trong những tính chất hấp dẫn của vật liệu 2D là tỉ số Poisson có giá trị âm. Các công trình trước đây đã chứng minh rằng các hệ cấu trúc ba chiều như các vật liệu perovskite [7] hay một số loại gốm [8] cũng sở hữu tỉ số Poisson âm. Tính chất này cũng được quan sát trong vật liệu một chiều như sợi nano kim cương [9]. Tỉ số Poisson âm cũng đã được tìm thấy trong hệ 2D là phospho đen [10] và một số vật liệu khác [11,12]. So với các vật liệu thông thường, các vật liệu với tỉ số Poisson âm có độ bền được cải thiện hơn và khả năng hấp thụ âm thanh vượt trội. Vì vậy, những vật liệu này có tiềm năng ứng dụng trong nhiều lĩnh vực khác nhau của công nghệ [13]. Trong các nghiên cứu gần đây, tỉ số Poisson với giá trị âm cũng đã được tìm thấy trong các đơn lớp Janus 2D. Chẳng hạn, đơn lớp Si_2SSe được dự đoán có tỉ số Poisson lên đến -0.12 [12]. Tuy nhiên, hiện nay vẫn còn ít công trình nghiên cứu về vật liệu bất đối xứng Janus có tỉ số Poisson âm.

Trong bài báo này, chúng tôi tập trung vào việc khảo sát các đặc trưng cấu trúc, các tính chất cơ học và các tính chất điện tử của đơn lớp Janus $GeSiTe_2$ bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ. Kết quả tính toán đạt được sẽ góp phần làm sáng tỏ hơn các tính chất vật lý của Janus $GeSiTe_2$ cũng hệ vật liệu Janus hai chiều nói chung. Năm bắt được các đặc trưng vật lý vật liệu, chúng ta sẽ thấy rõ hơn triển vọng ứng dụng chúng trong công nghệ.

2. Phương pháp tính toán

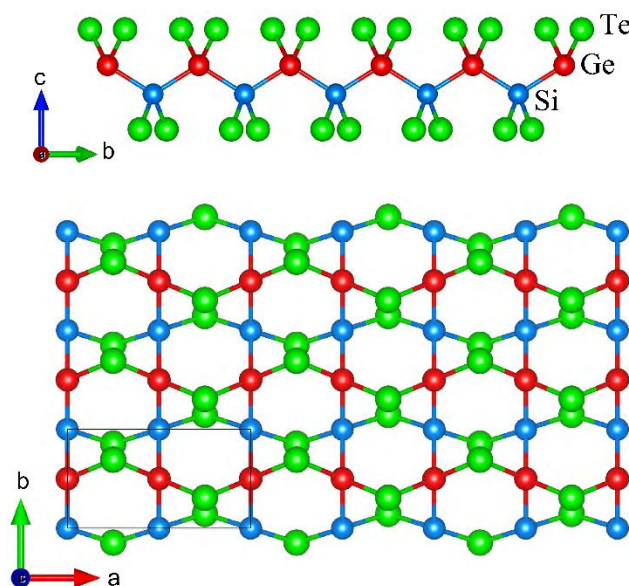
Các tính toán trong bài báo này được thực hiện bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật

độ dựa trên phần mềm Vienna *ab initio* simulation package (VASP) [14,15]. Chúng tôi sử dụng phương pháp gần đúng gradient suy rộng (GGA) với phiếm hàm PBE (Perdew, Burke và Ernzerhof) [16] để xử lý các tương tác trao đổi tương quan trong vật liệu. Phiếm hàm HSE06 cũng đã được sử dụng để hiệu chỉnh cấu trúc vùng năng lượng điện tử của vật liệu [17]. Chúng tôi sử dụng mô phỏng động học phân tử *ab initio* (AIMD) với tập hợp chính tắc ở nhiệt độ 300 K trong thời gian 8 ps với mỗi bước thời gian là 1 fs để đánh giá độ ổn định nhiệt của cấu trúc. Một khoảng chân không với bề dày 20 Å được chèn vào theo phương thẳng đứng (dọc theo trục z) để loại bỏ tương tác giữa các lớp lân cận. Vùng Brillouin thứ nhất được chia thành lưới có kích thước $12 \times 12 \times 1$ *k*-mesh theo phương pháp chia lưới Monkhorst-Pack [18]. Năng lượng ngưỡng trong phương pháp sóng phẳng được thiết lập là 500 eV. Ngưỡng hội tụ của lực và năng lượng lần lượt là 10^{-3} eV/Å và 10^{-6} eV.

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Cấu trúc tinh thể và độ bền cấu trúc

Janus GeSiTe₂ có thể được tạo ra từ các vật liệu đối xứng tương ứng, chẳng hạn như GeTe hoặc SiTe (xem thêm [19]) bằng cách thay thế một lớp Si trong SiTe bằng một lớp Ge (hoặc thay một lớp Ge trong GeTe bằng một lớp Si). Cấu trúc tinh thể của đơn lớp Janus GeSiTe₂ được mô tả ở Hình 1. Đơn lớp Janus GeSiTe₂ có cấu trúc trực thoi với ô đơn vị gồm 8 nguyên tử, trong đó có 4 nguyên tử Te, 2 nguyên tử Si và 2 nguyên tử Ge. Hằng số mạng của cấu trúc GeSiTe₂ lần lượt là $a = 7.59$ Å và $b = 4.09$ Å. Các giá trị này lớn hơn so với hằng số mạng của đơn lớp Si₂SSe [12]. Độ dài liên kết giữa các nguyên tử, gồm $d_{\text{Ge-Te}}$, $d_{\text{Si-Te}}$ và $d_{\text{Ge-Si}}$ cũng được tính toán và lần lượt bằng 2.61 Å, 2.54 Å và 2.42 Å. Chúng ta thấy rằng $d_{\text{Ge-Te}}$ và $d_{\text{Si-Te}}$ khác nhau, điều này dẫn đến đơn lớp có cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng. Đồng thời, $d_{\text{Ge-Te}}$ lớn hơn $d_{\text{Si-Te}}$ là do bán kính nguyên tử của Ge lớn hơn của Si.



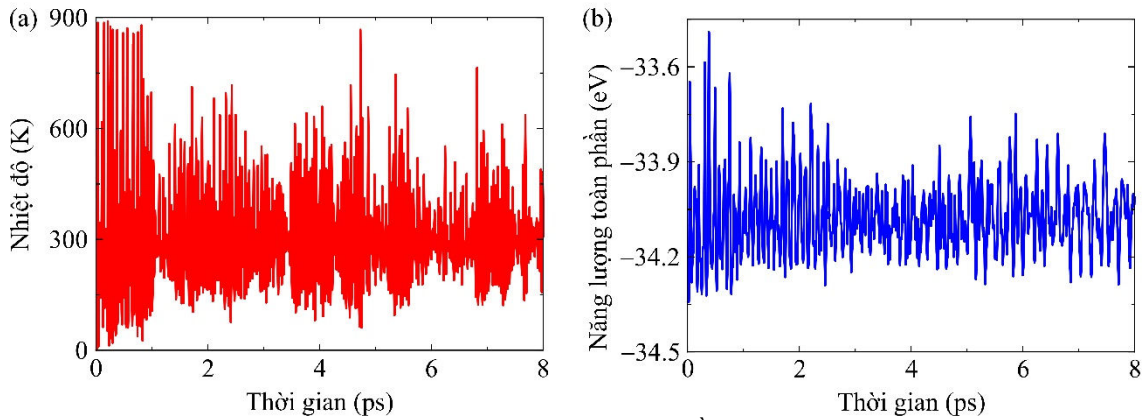
Hình 1. Cấu trúc tinh thể đã được tối ưu hóa của đơn lớp Janus GeSiTe₂ với các góc nhìn khác nhau.
Hình chữ nhật màu đen biểu diễn ô đơn vị.

Sau khi tối ưu hóa cấu trúc của đơn lớp Janus GeSiTe₂, chúng tôi nghiên cứu độ ổn định về cấu trúc để đánh giá khả năng tồn tại trong thực tế nó. Ở đây, chúng tôi sử dụng mô phỏng động học

phân tử nguyên lý đầu (AIMD) ở nhiệt độ phòng trong thời gian 8 ps với mỗi bước thời gian là 1 fs. Kết quả của quá trình mô phỏng được biểu diễn ở Hình 2. Chúng ta thấy rằng trong suốt thời

gian mô phỏng, năng lượng toàn phần của hệ GeSiTe₂ chỉ dao động nhỏ với biên độ cỡ khoảng 0.5 eV. Nhiệt độ của hệ dao động xung quanh giá trị nhiệt độ phòng ($T = 300$ K) và không có sự thăng giáng bất thường. Cuối quá trình mô

phỏng AIMD, cấu trúc GeSiTe₂ không bị phá vỡ cũng như không xảy ra sự chuyển pha cấu trúc. Các liên kết hóa học trong đơn lớp GeSiTe₂ vẫn bền vững. Điều này chứng tỏ rằng đơn lớp Janus GeSiTe₂ có độ ổn định nhiệt tốt.



Hình 2. Sự phụ thuộc của nhiệt độ và năng lượng toàn phần vào thời gian mô phỏng AIMD.

Bên cạnh mô phỏng AIMD, chúng tôi tính toán năng lượng cố kết của GeSiTe₂ để đánh giá độ ổn định năng lượng cũng như độ vững chắc của các liên kết hóa học trong vật liệu. Năng lượng cố kết được xác định dựa vào năng lượng đơn nguyên tử và năng lượng toàn phần của hệ theo biểu thức sau:

$$E_{coh} = \frac{E_{tot} - (N_{Ge}E_{Ge} + N_{Si}E_{Si} + N_{Te}E_{Te})}{8}, \quad (1)$$

trong đó E_{tot} là năng lượng toàn phần của hệ Janus GeSiTe₂; E_{Ge} , E_{Si} và E_{Te} lần lượt là năng lượng của các đơn nguyên tử Ge, Si và Te. Ở đây, 8 là tổng số nguyên tử Ge, Si và Te trong ô đơn vị.

Kết quả tính toán năng lượng cố kết cho thấy đơn lớp Janus GeSiTe₂ có năng lượng cố kết là -4,21 eV/nguyên tử. Giá trị này tương đương với năng lượng cố kết của đơn lớp Janus Si₂Te được báo cáo ở công trình trước đây (-4.85 eV/nguyên tử) [12]. Điều này thể hiện rằng cấu trúc Janus GeSiTe₂ ổn định về mặt năng lượng và các liên kết bên trong cấu trúc là bền vững. Dựa theo biểu thức (1), năng lượng cố kết âm có nghĩa là các liên kết hóa học trong đơn lớp GeSiTe₂ là bền vững về mặt năng lượng. Năng

lượng cố kết càng âm thì các liên kết hóa học trong vật liệu càng bền vững.

3.2. Tính chất cơ học

Trong phần này, chúng tôi xem xét các tính chất cơ học của đơn lớp Janus GeSiTe₂ và khảo sát độ bền cơ học của vật liệu. Trước tiên chúng tôi tính toán bốn hệ số đàn hồi C_{11} , C_{12} , C_{22} và C_{66} vì hệ đang nghiên cứu là hệ hai chiều. Các hệ số đàn hồi được tính bằng cách xác định các giá trị sự phụ thuộc của năng lượng biến dạng vào biến dạng trục rồi khớp các giá trị này theo hàm bậc hai. Kết quả tính toán cho thấy đơn lớp Janus GeSiTe₂ có các hệ số đàn hồi $C_{11} = 43.06$ N/m, $C_{12} = -5.86$ N/m, $C_{22} = 59.79$ N/m và $C_{66} = 6.03$ N/m. Từ các giá trị đạt được này chúng tôi nhận thấy rằng $C_{11}C_{22} - C_{12}^2 > 0$ và $C_{11} > 0$. Hay nói cách khác, đơn lớp Janus GeSiTe₂ đáp ứng tiêu chuẩn Born-Huang về độ bền cơ học [20]. Một điều đáng chú ý ở đây cần nói đến là C_{12} nhận giá trị âm, điều này có thể dẫn đến các tính chất cơ học kỳ lạ mà chúng ta đang mong đợi.

Mô đun Young và tỉ số Poisson là những đại lượng cơ bản đặc trưng cho tính chất cơ học của vật liệu. Dựa vào các hệ số đàn hồi C_{ij} đã tính được ở trên, chúng tôi khảo sát sự phụ thuộc của

mô đun Young $Y_{2D}(\varphi)$ và tỉ số Poisson $P(\varphi)$ vào hướng đang xét φ theo biểu thức sau [21]:

$$Y_{2D}(\Omega) = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}\sin^4\varphi + C_{22}\cos^4\varphi + A\sin^2\varphi\cos^2\varphi}, \quad (2)$$

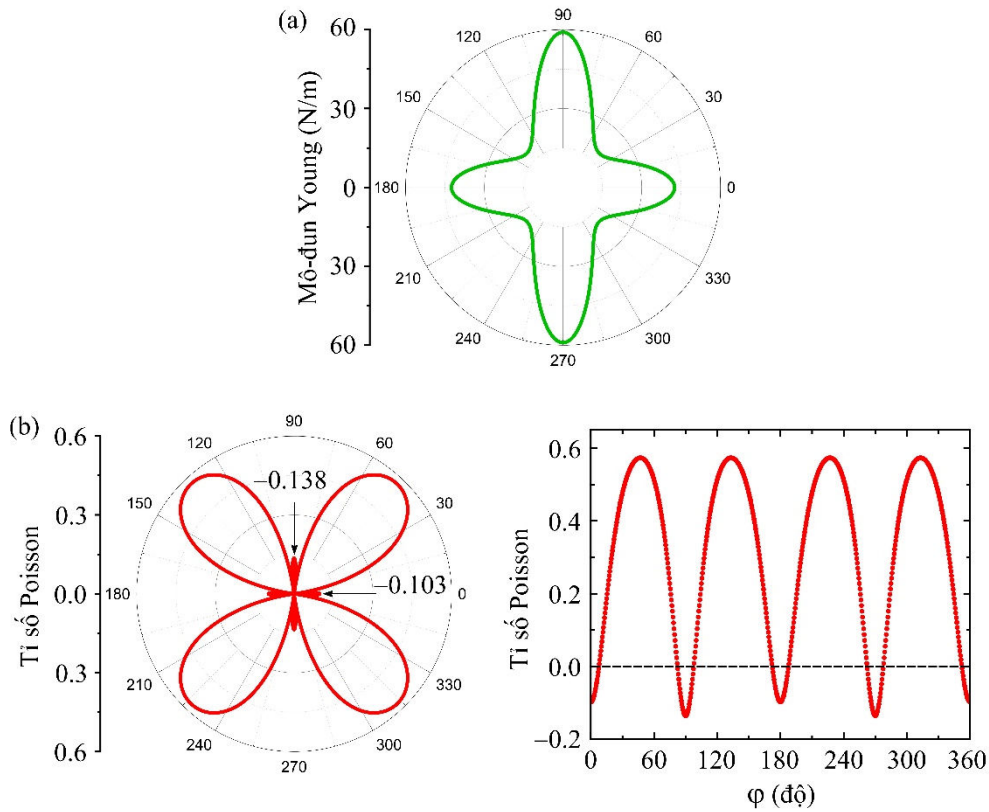
$$P(\Omega) = \frac{C_{11}\sin^4\varphi + C_{22}\cos^4\varphi - B\sin^2\varphi\cos^2\varphi}{C_{11}\sin^4\varphi + C_{22}\cos^4\varphi + A\sin^2\varphi\cos^2\varphi}, \quad (3)$$

với φ là góc được tạo bởi hướng đang xét và trục x , còn $A = (C_{11}C_{22} - C_{12}^2)/C_{66} - 2C_{12}$ và $B = C_{11} + C_{22} - (C_{11}C_{22} - C_{12}^2)/C_{66}$.

Sự phụ thuộc của mô đun Young $Y_{2D}(\varphi)$ vào hướng đang xét φ được minh họa bởi Hình 3(a). Vì đơn lớp Janus GeSiTe₂ có cấu trúc tinh thể bất đẳng hướng nên chúng ta dễ dàng thấy rằng độ lớn của $Y_{2D}(\varphi)$ thay đổi theo giá trị của φ . Giá trị của mô đun Young của Janus GeSiTe₂ đạt cực đại theo hướng vuông góc với trục x , cụ thể là $Y_{2D}(90^\circ) = Y_{2D}(270^\circ) = 58.99$ N/m. Trong khi đó, Y_{2D} của GeSiTe₂ có giá trị nhỏ nhất ở góc 45° và 135° với $Y_{2D}(45^\circ) = Y_{2D}(135^\circ) = 18.95$ N/m. So sánh với graphene, chúng ta thấy rằng giá trị Y_{2D} của graphene (341.60 N/m) [22] lớn hơn của đơn lớp GeSiTe₂, có nghĩa là cấu trúc GeSiTe₂ linh hoạt hơn và có thể chịu được biến dạng một cách dễ dàng.

Hình 3(b) mô tả sự phụ thuộc của tỉ số Poisson $P(\varphi)$ của đơn lớp GeSiTe₂ vào hướng đang xét. Từ hình vẽ chúng ta thấy rõ rằng giá trị của tỉ số Poisson $P(\varphi)$ phụ thuộc lớn vào góc φ . Đặc tính dị hướng này cũng tương tự như của mô

đơn Young do sự bất đẳng hướng trong cấu trúc tinh thể của hệ đang khảo sát. Hầu hết các vật liệu đều sở hữu tỉ số Poisson dương, tuy nhiên, một đặc điểm quan trọng mà chúng tôi quan sát được ở đây là đơn lớp Janus GeSiTe₂ có tỉ số Poisson âm. Đặc tính cơ học dị thường này thể hiện ở cả hai hướng trong mặt phẳng của vật liệu, dọc theo trục x ($\varphi = 0^\circ$) và trục y ($\varphi = 90^\circ$) như biểu diễn trong Hình 3(b). Kết quả tính toán được của tỉ số Poisson đối với đơn lớp Janus GeSiTe₂ lần lượt bằng -0.103 và -0.138 theo trục x và trục y . Các giá trị này cao hơn nhiều so với phosphorene (-0.027) [10] và borophane (-0.053) [11]. Giá trị Poisson âm trong đơn lớp Janus GeSiTe₂ có thể so sánh với một số vật liệu có hiệu ứng Poisson âm lớn như đơn lớp SnSe (-0.17) [23] và Be₅C₂ (-0.16) [24]. Với hệ số Poisson âm có giá trị lớn, đơn lớp Janus GeSiTe₂ có triển vọng ứng dụng rất lớn trong lĩnh vực lưu trữ năng lượng cũng như trong các ứng dụng chống va đập cơ học và đứt gãy.

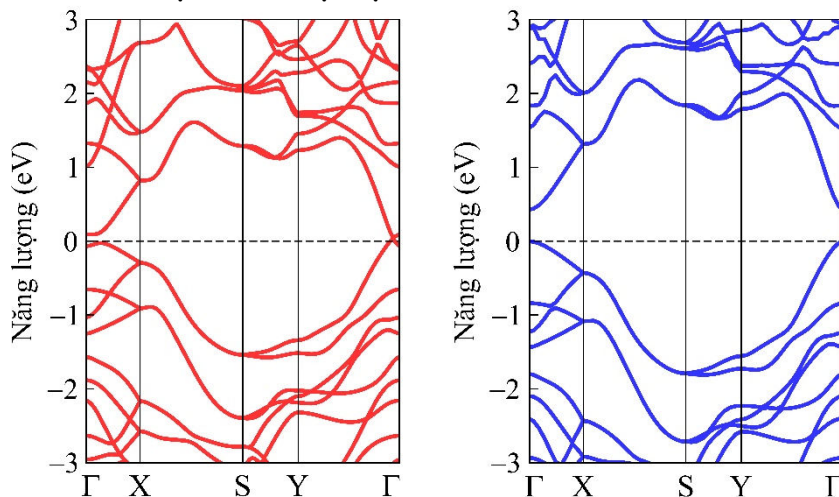


Hình 3. Mô-đun Young (a) và tỉ số Poisson vẽ theo các hệ tọa độ khác nhau (b) của đơn lớp Janus GeSiTe₂.

3.3. Tính chất điện tử

Trong phần này, chúng tôi sẽ trình bày và thảo luận một cách chi tiết các tính chất điện tử của đơn lớp Janus GeSiTe₂ trong phần này. Đầu tiên chúng tôi khảo sát cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu vì nó có thể cung cấp nhiều thông tin về đặc tính điện tử. Trong các tính toán dựa trên DFT, phương pháp PBE là một trong những phương pháp ít tốn kém và được sử dụng rộng rãi để nghiên cứu tính chất điện tử của vật liệu.

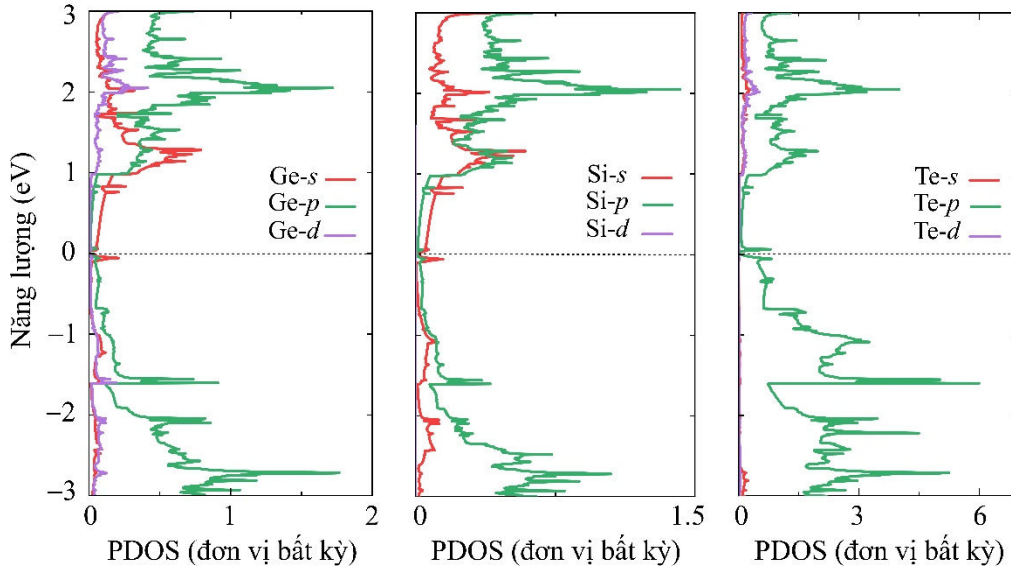
Do đó, trong bài báo này chúng tôi sử dụng phương pháp PBE để khảo sát cấu trúc vùng năng lượng điện tử. Hình 4 phản ánh cấu trúc vùng năng lượng của đơn lớp GeSiTe₂ được vẽ dọc theo các điểm đối xứng cao $\Gamma - X - S - Y - \Gamma$ trong miền Brillouin. Từ hình vẽ chúng ta quan sát được tại điểm Γ có xảy ra sự xen phủ lẫn nhau giữa vùng dẫn và vùng hóa trị. Kết quả này chỉ ra rằng đơn lớp Janus GeSiTe₂ thể hiện tính kim loại.



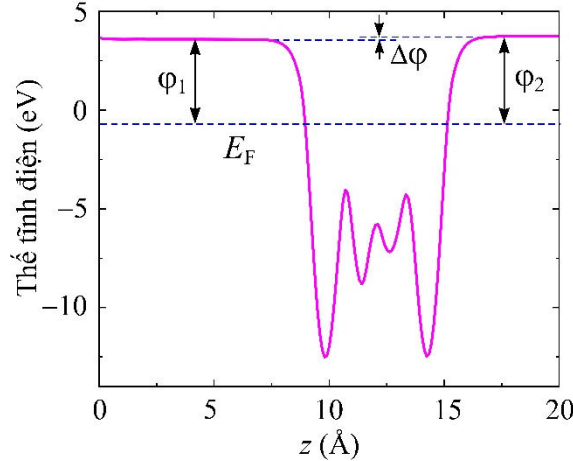
Hình 4. Cấu trúc vùng năng lượng của đơn lớp GeSiTe₂ theo phương pháp PBE.

Để đánh giá đóng góp của các orbital của các nguyên tử lên sự hình thành cấu trúc năng lượng, chúng tôi tính toán mật độ trạng thái riêng phần (PDOS) của Janus GeSiTe₂ như biểu diễn ở Hình 5. Hình 5 cho chúng ta thấy rằng, orbital p của nguyên tử Te có vai trò đóng góp chủ yếu vào cả

vùng hóa trị và vùng dẫn. Ngoài ra, vùng hóa trị và vùng dẫn cũng được hình thành bởi một phần nhỏ từ orbital p của Ge và Si. Riêng vùng dẫn có thêm sự đóng góp nhỏ của orbital s từ nguyên tử Ge và Si.



Hình 5. Mật độ trạng thái riêng phần của đơn lớp GeSiTe₂.



Hình 6. Thế tĩnh điện của đơn lớp Janus GeSiTe₂. $\Delta\phi$ là độ chênh lệch mức chân không giữa hai bề mặt. E_F là mức năng lượng Fermi của vật liệu.

Một trong những tính chất điện tử quan trọng nữa có thể kể đến là công thoát điện tử. Đại lượng này cho chúng ta biết năng lượng tối thiểu cần cung cấp cho điện tử để nó thoát ra khỏi bề mặt của vật liệu. Công thoát điện tử được xác định dựa trên mức chân không E_{vac} và mức Fermi E_F theo biểu thức $\phi = E_{vac} - E_F$. Công thoát điện tử có thể xác định dựa trên việc phân tích thế tĩnh điện của vật liệu. Hình 5 mô tả thế

tĩnh điện của đơn lớp Janus GeSiTe₂. Kết quả của chúng tôi chỉ ra rằng có sự chênh lệch mức chân không ở hai mặt của hệ Janus, đồng thời hình dạng của thế tĩnh điện thể hiện sự bất đối xứng theo phương thẳng đứng. Điều này được giải thích là do sự phá vỡ cấu trúc đối xứng trong đơn lớp Janus. Kết quả tính toán cho thấy độ chênh lệch mức chân không ở hai mặt của hợp chất GeSiTe₂ là 0.14 eV. Mức Fermi của Janus

GeSiTe₂ được xác định là -0.75 eV. Do đó, công thoát điện tử ở bề mặt Te-Ge của đơn lớp Janus GeSiTe₂ là 4.48 eV, lớn hơn công thoát điện tử ở bề mặt Te-Si (4.34 eV). Phân tích này chỉ ra rằng điện tử muốn thoát ra khỏi mặt Te-Ge cần nhiều năng lượng hơn so với mặt Te-Si.

Như đã được phân tích ở trên, đơn lớp Janus GeSiTe₂ được tạo thành bởi các thành phần khác nhau. Độ âm điện của các thành phần này khác nhau gây ra một lưỡng cực điện vuông góc với bề mặt vật liệu. Sự chênh lệch về độ âm điện càng lớn thì lưỡng cực điện này càng lớn sẽ có tác dụng phân tách các cặp điện tử - lỗ trống. Bên cạnh đó, hiện tượng này cũng dẫn đến công thoát điện tử và thế tĩnh điện ở hai bề mặt của hệ Janus sẽ khác nhau. Điều này không xảy ra đối với các vật liệu có cấu trúc đối xứng.

4. Kết luận

Dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ, chúng tôi đã khảo sát độ ổn định cùng các đặc trưng cấu trúc, tính chất cơ học và điện tử của đơn lớp Janus GeSiTe₂. Dựa trên tính toán bằng mô phỏng động học phân tử và năng lượng cố kết, đơn lớp này thể hiện độ ổn định cao của cấu trúc. Kết quả tính toán từ các hệ số đàn hồi chỉ ra rằng đơn lớp GeSiTe₂ có độ bền cơ học tốt. Đặc biệt, chúng tôi tìm thấy một đặc tính cơ học dị thường trong cấu trúc này đó là tỉ số Poisson có giá trị âm khá cao. Phương pháp PBE chỉ ra rằng GeSiTe₂ thể hiện tính kim loại với sự xen phủ giữa vùng dẫn và vùng hóa trị. Ngoài ra, kết quả cho thấy rằng điện tử muốn thoát ra khỏi mặt Te-Ge cần nhiều năng lượng hơn so với mặt Te-Si. Cuối cùng, phân tích PDOS chứng tỏ rằng orbital *p* của nguyên tử Te có vai trò đóng góp chủ yếu vào cả vùng hóa trị và vùng dẫn.

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Y - Dược, Đại học Huế trong đề tài mã số 41/24.

Tài liệu tham khảo

- [1] Geim, A. K., Novoselov, K. S. (2007). "The rise of graphene". *Nature Materials*, 6(3), 183-191. DOI: 10.1038/nmat1849.
- [2] Ng, S. W., Noor, N., Zheng, Z. (2018). "Graphene-based two-dimensional Janus materials". *NPG Asia materials*, 10(4), 217-237. DOI: 10.1038/s41427-018-0023-8.
- [3] Zhang, L., Yu, J., Yang, M., Xie, Q., Peng, H., Liu, Z. (2013). "Janus graphene from asymmetric two-dimensional chemistry". *Nature Communications*, 4(1), 1443. DOI: 10.1038/ncomms2464.
- [4] 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". *Nature nanotechnology*, 12(8), 744-749. DOI: 10.1038/nnano.2017.100.
- [5] Guo, X., Guo, S. (2021). "Janus MSiGeN₄ (M = Zr and Hf) monolayers derived from centrosymmetric β -MA₂Z₄: A first-principles study". *Journal of Semiconductors*, 42(12), 122002. DOI: 10.1088/1674-4926/42/12/122002.
- [6] Yao, M., Chen, J., Cai, X., Tang, Y., Ni, Y., Guo, C., Wang, H., Sun, B., Chen, Y. (2024). "Two-Dimensional Janus Nanostructures M₂AB (M = Si, Ge, Sn, A/B = N, P, As) for Piezoelectric Power Generation". *ACS Applied Nano Materials*, 7(7), 7773-7782. DOI: 10.1021/acsanm.4c00394.
- [7] Huang, C. W., Ren, W., Nguyen, V. C., Chen, Z., Wang, J., Sritharan, T., Chen, L. (2012). "Abnormal Poisson's ratio and linear compressibility in perovskite materials". *Advanced Materials*, 24(30), 4170-4174. DOI: 10.1002/adma.201104676.
- [8] Xu, X., Zhang, Q., Hao, M., Hu, Y., Lin, Z., Peng, L., Wang, T., Ren, X., Wang, C., Zhao, Z., Wan, C., Fei, H., Wang, L., Zhu, J., Sun, H., Chen, W., Du, T., Deng, B., Cheng, G. J., Shakir, I., Dames, C., Fisher, T.S., Zhang, X., Li, H., Huang, Y., Duan, X. (2019). "Double-negative-index ceramic aerogels for thermal superinsulation". *Science*, 363(6428), 723-727. DOI: 10.1126/science.aav730.
- [9] Silveira, J. F., Muniz, A. R. (2017). "First-principles calculation of the mechanical properties of diamond nanothreads". *Carbon*, 113, 260-265.
- [10] Jiang, J. W., Park, H. S. (2014). "Negative poisson's ratio in single-layer black phosphorus". *Nature Communications*, 5(1), 4727. DOI: 10.1038/ncomms5727 (2014).
- [11] Kou, L., Ma, Y., Tang, C., Sun, Z., Du, A., Chen, C. (2016). "Auxetic and ferroelastic borophane: a novel 2D material with negative Poisson's ratio and switchable dirac transport channels". *Nano Letters*, 16(12), 7910-7914. DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b04180.

- [12] Hiep, N. T., Nguyen, C. Q., Hieu, N. N. (2023). "Negative Poisson's ratio and anisotropic carrier mobility in ternary Janus Si_2XY (X/Y= S, Se, Te): First-principles prediction". *Applied Physics Letters*, 123(9), 092102. DOI: 10.1063/5.0166219.
- [13] Huang, C., Chen, L. (2016). "Negative Poisson's ratio in modern functional materials". *Advanced Materials*, 28(37), 8079-8096. DOI: 10.1002/adma.201601363.
- [14] Kresse, G., Furthmüller, J. (1996). "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set". *Physical Review B*, 54(16), 11169. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169.
- [15] Kresse, G., Furthmüller, J. (1996). "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set". *Computational Materials Science*, 6(1), 15-50. DOI: 10.1016/0927-0256(96)00008-0.
- [16] Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M. (1996). "Generalized gradient approximation made simple". *Physical Review Letters*, 77(18), 3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
- [17] Monkhorst, H. J., Pack, J. D. (1976). "Special points for Brillouin-zone integrations". *Physical Review B*, 13(12), 5188. DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188.
- [18] Heyd, J., Scuseria, G. E., Ernzerhof, M. (2003). "Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential". *Journal of Chemical Physics*, 118(18), 8207-8215. DOI: 10.1063/1.1564060.
- [19] Yang, J. H., Zhang, Y., Yin, W. J., Gong, X. G., Yakobson, B. I., Wei, S. H. (2016). "Two-dimensional SiS layers with promising electronic and optoelectronic properties: theoretical prediction". *Nano Letters*, 16(2), 1110-1117. DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b04341.
- [20] Born, M., Huang, K. (1996). *Dynamical theory of crystal lattices*. London: Oxford University Press.
- [21] Hung, N. T., Nugraha, A. R., Saito, R. (2018). "Two-dimensional MoS_2 electromechanical actuators". *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51(7), 075306. DOI: 10.1088/1361-6463/aaa68f.
- [22] Peng, Q., Liang, C., Ji, W., De, S. (2013). "A theoretical analysis of the effect of the hydrogenation of graphene to graphane on its mechanical properties". *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(6), 2003-2011. DOI: 10.1039/C2CP43360E.
- [23] Zhang, L. C., Qin, G., Fang, W. Z., Cui, H. J., Zheng, Q. R., Yan, Q. B., & Su, G. (2016). "Tinselenidene: a two-dimensional auxetic material with ultralow lattice thermal conductivity and ultrahigh hole mobility". *Scientific Reports*, 6(1), 19830. DOI: 10.1038/srep19830.
- [24] Wang, Y., Li, F., Li, Y., Chen, Z. (2016). "Semi-metallic Be_5C_2 monolayer global minimum with quasi-planar pentacoordinate carbons and negative Poisson's ratio". *Nature Communications*, 7(1), 11488. DOI: 10.1038/ncomms11488.