

Nghiên cứu các đặc trưng cấu trúc và tính chất điện tử của đơn lớp hai chiều MgAlGaS₄ bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ

Study of the Structural and Electronic Properties of a Two-Dimensional MgAlGaS₄ Monolayer using Density Functional Theory

Nguyễn Phạm Quỳnh Anh^a, Nguyễn Quang Cường^b, Trần Đình Thịnh^b, Nguyễn Ngọc Hiếu^{b*}
Nguyen Pham Quynh Anh^a, Nguyen Quang Cuong^b, Tran Dinh Thinh^b, Nguyen Ngoc Hieu^{b*}

^aKhoa Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Sài Gòn, thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

^aFaculty of Engineering and Technology, Sai Gon University, Ho Chi Minh city, 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: 17/11/2025, ngày phản biện xong: 24/11/2025, ngày chấp nhận đăng: 22/01/2026)

Tóm tắt

Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu một cách hệ thống các đặc trưng cấu trúc và tính chất điện tử của đơn lớp hai chiều MgAlGaS₄ bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Cấu trúc tinh thể của đơn lớp MgAlGaS₄ gồm bảy lớp nguyên tử xếp chồng và thể hiện tính bất đối xứng theo phương trục giao với mặt phẳng hai chiều của vật liệu. Độ bền vững cấu trúc cũng như khả năng tồn tại trong thực tế của đơn lớp này được đánh giá thông qua phân tích năng lượng có kết, phổ phonon và mô phỏng động lực học phân tử. Kết quả cho thấy đơn lớp MgAlGaS₄ là một vật liệu có độ cứng khá cao với mô-đun Young đạt 114.17 N/m. Ở trạng thái cơ bản, vật liệu là vật liệu bán dẫn với vùng cấm thẳng có độ rộng 1.58 eV. Ngoài ra, cấu trúc tinh thể bất đối xứng của đơn lớp MgAlGaS₄ gây ra sự chênh lệch mức chân không giữa hai bề mặt của nó. Kết quả nghiên cứu này không chỉ đề xuất một cấu trúc vật liệu hai chiều mới mà còn khẳng định tiềm năng ứng dụng của nó trong nhiều lĩnh vực của công nghệ điện tử.

Từ khóa: vật liệu hai chiều, tính chất điện tử, lý thuyết phiếm hàm mật độ

Abstract

In this paper, we systematically investigate the structural characteristics and electronic properties of a two-dimensional MgAlGaS₄ monolayer using density functional theory. The crystal structure of the MgAlGaS₄ monolayer consists of seven stacked atomic layers and exhibits vertical asymmetry. The structural stability and the potential experimental feasibility of the proposed material are evaluated through analyses of cohesive energy, phonon dispersion, and *ab-initio* molecular dynamics simulations. The MgAlGaS₄ monolayer is found to be a mechanically robust material, possessing a quite high Young's modulus of 114.17 N/m. In its ground state, the MgAlGaS₄ monolayer is a semiconductor with a direct band gap of 1.58 eV. Moreover, the asymmetric crystal structure of the MgAlGaS₄ monolayer induces a vacuum-level offset between its two surfaces. These findings not only introduce a new two-dimensional material but also highlight its promising potential for various electronic applications.

Keywords: two-dimensional material, electronic properties, density functional theory

*Tác giả liên hệ: Nguyễn Ngọc Hiếu

Email: hieunn@duytan.edu.vn

1. Mở đầu

Vật liệu hai chiều có cấu trúc lớp, tiêu biểu là graphene [1], là một trong những đối tượng được cộng đồng khoa học vật liệu và khoa học nano đặc biệt quan tâm trong thời gian gần đây bởi chúng không chỉ sở hữu những tính chất vật lý độc đáo mà còn có nhiều triển vọng ứng dụng trong các lĩnh vực khác nhau của công nghệ tiên tiến [2]. Đây là họ vật liệu phong phú về thành phần hóa học lẫn cấu trúc tinh thể, bao gồm từ các hệ đơn nguyên tử, nhị nguyên tử cho đến các vật liệu đa thành phần có độ linh hoạt cao trong thiết kế cấu trúc [3].

Trong số đó, vật liệu hai chiều đa thành phần có cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng, hay còn được biết đến với tên gọi vật liệu Janus hai chiều, đã nổi lên như một hướng nghiên cứu đặc biệt hấp dẫn trong những năm gần đây [4][5][6]. Sự bất đối xứng theo trục vuông góc mặt phẳng lớp làm xuất hiện nhiều đặc trưng vật lý mới lạ, chẳng hạn như mô men lưỡng cực nội tại, phân tách điện tích tự phát, hiệu ứng spin-quỹ đạo tăng cường [4]. Đây là những tính chất vốn khó có thể tìm thấy trong các vật liệu hai chiều có cấu trúc đối xứng tương ứng. Nhờ vậy, vật liệu Janus được đánh giá là rất tiềm năng cho các ứng dụng trong quang điện, phát hiện khí, xúc tác quang, điều chỉnh hoạt tính bề mặt, cũng như trong các linh kiện điện tử thế hệ mới. Đặc biệt, việc tổng hợp thành công vật liệu Janus MoSSe trong thực nghiệm đã mở ra một hướng tiếp cận mới cho nghiên cứu vật liệu hai chiều nói chung và vật liệu Janus nói riêng [5]. Các vật liệu Janus hai chiều đánh dấu một bước tiến quan trọng trong thiết kế vật liệu ở cấp độ nguyên tử, cho phép điều chỉnh có chủ đích các chức năng tiên tiến. Điều này hứa hẹn khởi đầu cho một kỷ nguyên mới trong lĩnh vực vật lý và khoa học vật liệu.

Tính chất vật lý của vật liệu hai chiều không chỉ phụ thuộc vào thành phần cấu tạo cũng như số lớp nguyên tử mà còn phụ thuộc rất lớn vào cấu trúc đối xứng của nó [7]. Gần đây, hợp chất

họ MA_2Z_4 (M = kim loại chuyển tiếp; A = Ge, Si; Z = N, P, As) nổi lên như là một họ vật liệu có nhiều tính chất vật lý hấp dẫn và triển vọng ứng dụng phong phú trong nhiều lĩnh vực [8]. Nhiều cấu trúc Janus dựa trên họ vật liệu MA_2Z_4 cũng đã được đề xuất và nghiên cứu ở nhiều cấp độ khác nhau. Trong bài báo này, chúng tôi đề xuất một cấu trúc vật liệu mới dựa trên họ vật liệu MA_2Z_4 là $MgAlGaS_4$ đồng thời nghiên cứu một cách có hệ thống các đặc trưng cấu trúc cũng như tính chất điện tử của nó dựa trên các tính toán bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ. Chúng tôi tập trung vào việc phân tích cấu trúc tinh thể, độ bền của cấu trúc cũng như khả năng chế tạo nó bằng thực nghiệm. Các tính toán về các tính chất điện tử sẽ giúp chúng ta hiểu sâu hơn về vật liệu này cũng như triển vọng ứng dụng nó vào trong các lĩnh vực khác nhau của công nghệ.

2. Phương pháp tính toán

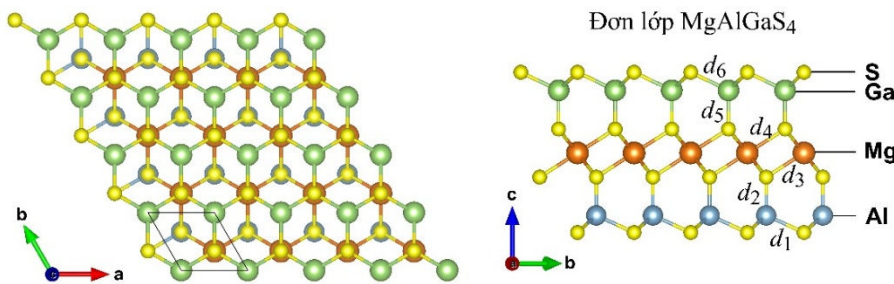
Trong bài báo này, các tính toán được tiến hành dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) bằng cách sử dụng gói phần mềm Vienna *ab initio* Simulation Package (VASP) [9][10], một công cụ phổ biến và đáng tin cậy trong mô phỏng vật liệu ở cấp độ nguyên tử. Để mô tả các tương tác trao đổi-tương quan giữa các điện tử, chúng tôi sử dụng phương pháp gần đúng gradient tổng quát (GGA) kết hợp với phiếm hàm PBE của Perdew–Burke–Ernzerhof [11]. Đây là phiếm hàm được sử dụng rộng rãi cho nhiều hệ vật liệu nhờ tính cân bằng giữa độ chính xác và chi phí tính toán. Vùng Brillouin thứ nhất được chia lưới theo phương pháp Monkhorst–Pack với kích thước lưới $8 \times 8 \times 1$, đủ lớn để đảm bảo độ hội tụ cho năng lượng toàn phần và các tính chất điện tử. Năng lượng ngưỡng được thiết lập tại 500 eV trong phương pháp sóng phẳng. Các phép tối ưu cấu trúc tinh thể được thực hiện cho đến khi lực tác dụng lên mỗi nguyên tử nhỏ hơn 10^{-3} eV/Å và độ sai lệch năng lượng toàn phần giữa các bước lặp nhỏ hơn 10^{-6} eV, đảm bảo cấu trúc thu được đạt trạng thái ổn định năng lượng. Phổ

phonon của vật liệu được tính toán bằng phương pháp dịch chuyển nhỏ với phần mềm phonopy [12]. Độ ổn định nhiệt của cấu trúc được đánh giá dựa trên các kết quả mô phỏng động học phân tử (AIMD). Chúng tôi chèn thêm một khoảng chân không dày 25 Å theo phương thẳng đứng (dọc theo trục z) để loại bỏ các tương tác giả tạo giữa các lớp lân cận trong vật liệu.

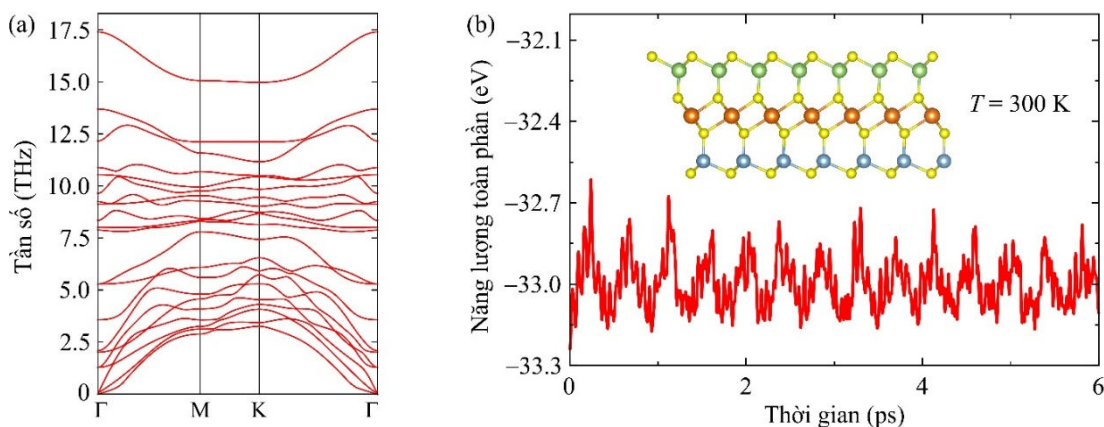
3. Kết quả và thảo luận

Cấu trúc tinh thể của đơn lớp hai chiều MgAlGaS₄ theo các góc nhìn khác nhau được biểu diễn ở Hình 1. Cấu trúc tinh thể của đơn lớp MgAlGaS₄ gồm bảy lớp nguyên tử xếp chồng lên nhau theo thứ tự S–Al–S–Mg–S–Ga–S và có cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng. Ô đơn vị của đơn lớp MgAlGaS₂ chứa 7 nguyên tử, trong đó có một nguyên tử Mg, một nguyên tử Al, một nguyên tử Ga và 4 nguyên tử S. Về mặt nguyên tắc, chúng ta có thể tạo ra đơn lớp MgAlGaS₄ từ cấu trúc MgAl₂S₄ hoặc MgGa₂S₄ bằng cách thay thế một lớp nguyên tố nhóm III này (Al hoặc Ga) bằng một lớp nguyên tố nhóm

III khác. Kết quả tính toán của chúng tôi cho thấy rằng, ở trạng thái cơ bản, đơn lớp MgAlGaS₄ có hằng số mạng $a = b = 3.69$ Å. Kết quả này cho thấy rằng, giá trị hằng số mạng của đơn lớp MgAlGaS₄ nhỏ hơn hằng số mạng của cả MgAl₂S₄ ($a = 3.71$ Å) và MgGa₂S₄ ($a = 3.75$ Å) [8]. Kết quả tính toán cũng cho thấy rằng, có sự khác biệt đáng kể về chiều dài liên kết giữa các kim loại nhóm III (Al hoặc Ga) với các nguyên tử S ở lớp bên ngoài và bên trong. Chẳng hạn như, chiều dài liên kết giữa Al với nguyên tử S ở lớp dưới cùng (bên ngoài) là $d_1 = 2.34$ Å, lớn hơn nhiều so với chiều dài liên kết giữa Al với nguyên tử S ở bên trong ($d_2 = 2.34$ Å). Tương tự như vậy, chiều dài liên kết giữa Ga với nguyên tử S ở lớp trên cùng (bên ngoài) là $d_6 = 2.36$ Å, cũng lớn hơn so với chiều dài liên kết giữa Ga với lớp nguyên tử bên trong ($d_5 = 2.19$ Å). Trong khi đó, chênh lệch giữa d_3 và d_4 (đối với Mg) là không đáng kể. Kết quả tính toán cho thấy $d_3 = 2.53$ Å và $d_4 = 2.52$ Å. Bề dày của đơn lớp MgAlGaS₄, tức khoảng cách giữa hai lớp S ngoài cùng, là 9.03 Å.



Hình 1. Cấu trúc tinh thể của vật liệu hai chiều đơn lớp MgAlGaS₄ quan sát từ các góc nhìn khác nhau. Ô đơn vị được biểu diễn bằng hình thoi.



Hình 2. Phổ phonon (a) và mô phỏng AIMD cho sự phụ thuộc thời gian của năng lượng toàn phần ở nhiệt độ phòng (b) của đơn lớp MgAlGaS₄. Hình nhỏ trong (b) là cấu trúc tinh thể của vật liệu ở cuối quá trình mô phỏng.

Sau khi hoàn tất quá trình tối ưu hóa tinh thể, chúng tôi tiếp tục khảo sát độ ổn định cấu trúc của vật liệu nhằm đánh giá khả năng tồn tại của vật liệu trong điều kiện thực nghiệm. Trước tiên, chúng tôi tính toán năng lượng cố kết của vật liệu để đánh giá khả năng hình thành và mức độ bền vững nội tại của đơn lớp MgAlGaS₄. Năng lượng cố kết cho phép xác định mức độ gắn kết giữa các nguyên tử trong mạng tinh thể, đồng thời phản ánh sự ổn định về mặt nhiệt động của hệ vật liệu. Do đó, trước khi đi sâu vào các đặc trưng vật lý của vật liệu, chúng tôi tiến hành tính toán năng lượng cố kết để kiểm chứng sự ổn định cơ bản của nó.

Năng lượng cố kết của đơn lớp MgAlGaS₄ có thể được tính thông qua biểu thức:

$$E_{coh} = \frac{E_{tot} - (N_{Mg}E_{Mg} + N_{Al}E_{Al} + N_S E_S)}{N_{Mg} + N_{Al} + N_{Ga} + N_S}, \quad (1)$$

trong đó E_{tot} là năng lượng toàn phần của vật liệu; E_{Mg} , E_{Al} , E_{Ga} và E_S lần lượt là năng lượng của các đơn nguyên tử Mg, Al, Ga và S. N_{Mg} , N_{Al} , N_{Ga} và N_S tương ứng là số nguyên tử Mg, Al, Ga và S trong ô đơn vị.

Kết quả tính toán cho thấy năng lượng cố kết của đơn lớp MgAlGaS₄ là $E_{coh} = -4.75$ eV/nguyên tử. Theo biểu thức (1), giá trị năng lượng cố kết âm chứng tỏ rằng các nguyên tử trong đơn lớp MgAlGaS₄ có xu hướng gắn kết với nhau để tạo thành cấu trúc ổn định hơn so với trạng thái tách rời. Điều này đồng nghĩa với việc cấu trúc có thể tồn tại bền vững trong điều kiện thực nghiệm. Hơn nữa, độ lớn của năng lượng cố kết càng âm thì mức độ gắn kết giữa các nguyên tử càng mạnh, cho thấy các liên kết hóa học trong vật liệu càng bền vững và cấu trúc càng khó bị phá vỡ bởi nhiễu loạn năng lượng bên ngoài. Kết quả này cho chúng ta khẳng định rằng, cấu trúc tinh thể của đơn lớp MgAlGaS₄ là ổn định về mặt năng lượng cũng như các liên kết hóa học bền trong vật liệu này có độ bền vững cao.

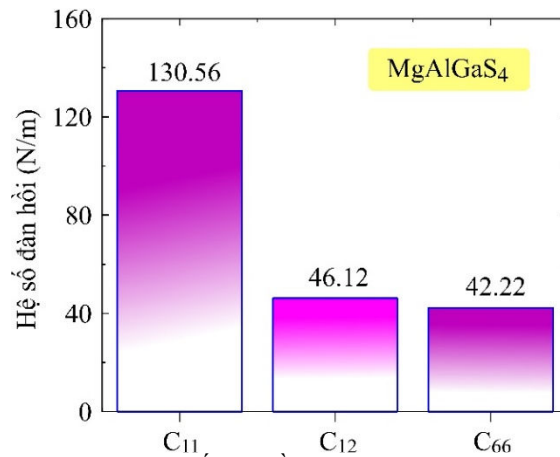
Cùng với phân tích năng lượng cố kết, chúng tôi đã phân tích phổ phonon để đánh giá độ bền

động học cũng như thực hiện các mô phỏng động học phân tử (AIMD) để đánh giá độ ổn định nhiệt động của vật liệu. Phân tích phổ phonon đóng vai trò then chốt trong việc đánh giá độ bền của vật liệu hai chiều. Thông qua việc khảo sát các mode dao động trong toàn bộ vùng Brillouin, phổ phonon cho phép xác định liệu cấu trúc có ổn định động học hay không. Vật liệu có cấu trúc được xác định là bền về mặt động học khi phổ phonon của chúng không có các tần số ảo trong toàn vùng Brillouin. Một khi phổ phonon có chứa các tần số ảo, lực phục hồi chống lại các dịch chuyển của các nguyên tử sẽ bị triệt tiêu. Khi đó, cấu trúc của vật liệu là không bền vững. Phổ phonon của đơn lớp MgAlGaS₄ được trình bày ở Hình 2(a). Chúng ta thấy rằng phổ phonon của đơn lớp MgAlGaS₄ có 21 nhánh dao động do ô đơn vị của nó chứa 7 nguyên tử như đã trình bày ở trên. Trong số 21 nhánh phonon đó, có 3 nhánh dao động âm học ở miền tần số thấp và 18 nhánh quang học nằm ở miền tần số cao hơn. Hình 2(a) cũng cho thấy rằng có sự chồng lấn giữa các dao động âm học và dao động quang học. Điều này sẽ làm cho các tán xạ giữa phonon âm và phonon quang trong đơn lớp MgAlGaS₄ là mạnh đáng kể, và do đó làm ảnh hưởng đến độ dẫn nhiệt của vật liệu này. Đặc biệt, không phát hiện các tần số dao động ảo trong toàn vùng Brillouin. Điều này cho phép chúng ta đi đến kết luận rằng cấu trúc của đơn lớp MgAlGaS₄ là bền vững về mặt động học và chúng ta có thể chế tạo nó bằng các phương pháp thực nghiệm thông thường.

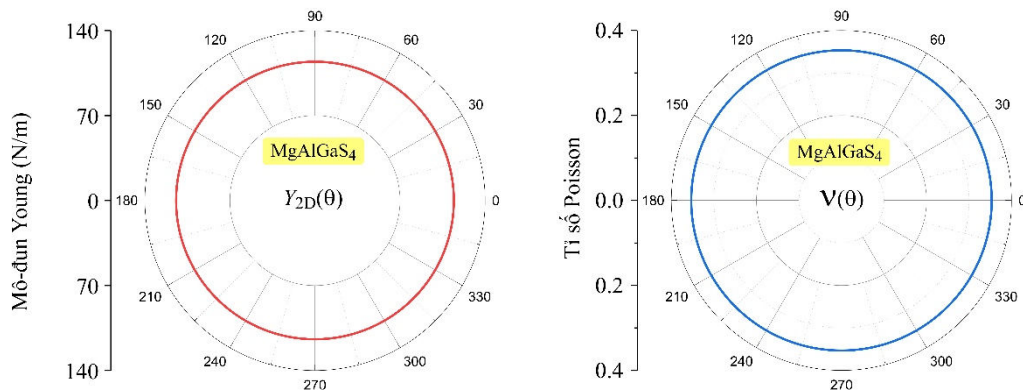
Để đánh giá độ bền nhiệt của vật liệu, chúng tôi đã thực hiện các mô phỏng AIMD như biểu diễn ở Hình 2(a). Mô phỏng AIMD được thực hiện ở nhiệt độ phòng trong khoảng thời gian 6 ps với bước thời gian là 1 fs. Kết quả mô phỏng sự phụ thuộc thời gian của năng lượng toàn phần cho thấy năng lượng của hệ chỉ dao động nhẹ xung quanh giá trị trung bình, với biên độ dao động khoảng 0.5 eV trong suốt quá trình AIMD. Biên độ dao động nhỏ này chứng tỏ hệ không trải

qua bất kỳ bất thường động lực học nào và vẫn duy trì trạng thái cân bằng nhiệt ổn định. Đồng thời, không quan sát thấy bất kỳ dấu hiệu nào của chuyển pha cấu trúc hoặc tái sắp xếp nguyên tử, cho thấy cấu trúc không bị kích hoạt bởi dao động nhiệt ở nhiệt độ mô phỏng. Đáng chú ý, cấu trúc tinh thể của đơn lớp MgAlGaS₄ vẫn được bảo toàn đến thời điểm cuối của mô phỏng,

chẳng hạn như, các nguyên tử duy trì vị trí tương đối ổn định, không xuất hiện đứt gãy liên kết hay biến dạng nghiêm trọng trong mạng tinh thể. Những quan sát này khẳng định rằng đơn lớp MgAlGaS₄ sở hữu độ bền nhiệt động tốt và có khả năng ổn định trong các điều kiện nhiệt độ thực tế.



Hình 3. Các hệ số đàn hồi của đơn lớp MgAlGaS₄.



Hình 4. Sự phụ thuộc theo hướng (được đặc trưng bởi góc θ) của mô-đun Young (a) và tỉ số Poisson (b) của đơn lớp MgAlGaS₄.

Ngoài ra, chúng tôi cũng phân tích độ bền cơ học cũng như các đặc trưng cơ học cơ bản của đơn lớp MgAlGaS₄ để đánh giá một cách toàn diện các đặc trưng cấu trúc của nó. Để thực hiện được các nhiệm vụ này, chúng ta cần tính toán các hệ số đàn hồi của vật liệu. Đối với vật liệu hai chiều, có 4 hệ số đàn hồi độc lập, bao gồm C₁₁, C₁₂, C₂₂ và C₆₆. Tuy nhiên, do cấu trúc lục giác của đơn lớp MgAlGaS₂ (như biểu diễn ở Hình 1), chúng ta chỉ cần tính toán hai hệ số đàn hồi C₁₁ và C₁₂ do C₂₂ = C₁₁ và C₁₁ = (C₁₁ - C₁₂)/2. Các hằng số này được xác định thông qua

mối tương quan giữa biến dạng và năng lượng của hệ vật liệu, trong đó cấu trúc được áp dụng một loạt biến dạng trục nhỏ theo các hướng khác nhau [13]. Năng lượng toàn phần tương ứng với mỗi mức biến dạng được tính toán và sau đó được khớp theo hàm bậc hai dựa trên lý thuyết đàn hồi trong giới hạn tuyến tính. Việc khớp đường cong năng lượng–biến dạng cho phép suy ra trực tiếp các hệ số đàn hồi, đảm bảo độ chính xác cao và phản ánh đúng phản ứng cơ học của vật liệu dưới các biến dạng nhỏ. Phương pháp này cung cấp cơ sở quan trọng cho việc đánh giá

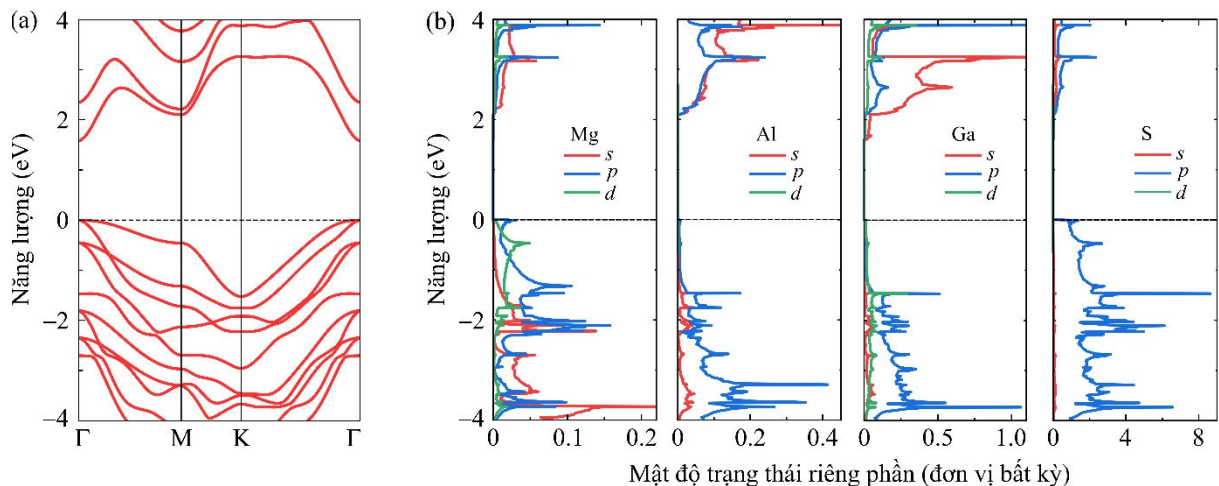
độ cứng, độ mềm và tính ổn định cơ học của vật liệu. Kết quả tính toán các hệ số đàn hồi của đơn lớp MgAlGaS₄ được trình bày ở Hình 3. Theo đó, đơn lớp MgAlGaS₄ có các hệ số đàn hồi C_{11} , C_{12} , và C_{66} lần lượt là 130.56 N/m, 46.12 N/m và 42.22 N/m. Kết quả này cho thấy rằng đơn lớp MgAlGaS₄ có các hệ số đàn hồi thỏa mãn tiêu chuẩn Born về độ bền cơ học cho vật liệu hai chiều $C_{11}^2 - C_{12}^2 > 0$ và $C_{11} > 0$ [14]. Điều này có nghĩa rằng đơn lớp MgAlGaS₄ có cấu trúc bền vững về mặt cơ học.

Từ kết quả tính toán về hệ số đàn hồi, chúng ta cũng có thể đánh giá một số đặc trưng cơ học cơ bản của vật liệu, chẳng hạn như mô-đun Young và tỉ số Poisson. Với cấu trúc lục giác, mô-đun Young Y_{2D} và tỉ số Poisson ν là những đại lượng đẳng hướng như biểu diễn ở Hình 4. Giá trị của mô-đun Young Y_{2D} và tỉ số Poisson ν được xác định bằng các biểu thức đơn giản [14]:

$$Y_{2D} = \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2}{C_{11}},$$

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11}}.$$

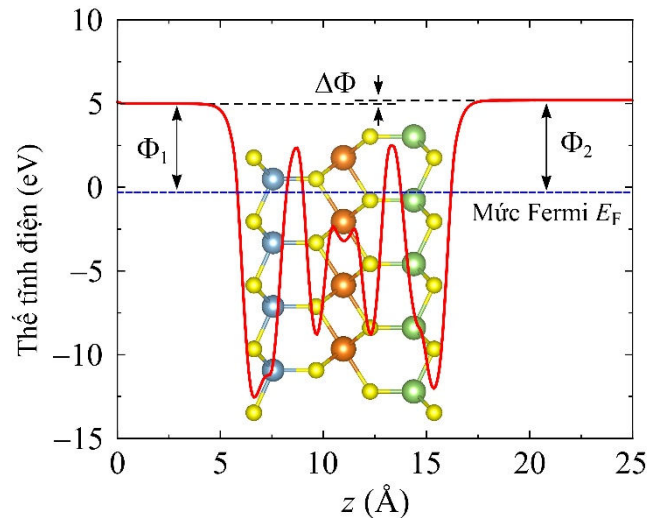
Kết quả tính toán cho thấy đơn lớp MgAlGaS₄ có mô-đun Young là 114.17 N/m và tỉ số Poisson là 0.35. Giá trị mô-đun Young như vậy cho thấy đơn lớp MgAlGaS₄ sở hữu độ cứng trong mặt phẳng ở mức khá cao, phản ánh khả năng chống biến dạng kéo tốt và mạng tinh thể có liên kết hóa học tương đối mạnh. Bên cạnh đó, tỉ số Poisson bằng 0.35 nằm trong phạm vi phổ biến của nhiều vật liệu hai chiều, cho thấy vật liệu có xu hướng co ngang ở mức trung bình khi chịu kéo dọc và không biểu hiện các hành vi cơ học bất thường. Sự kết hợp giữa mô-đun Young lớn và tỉ số Poisson vừa phải cho thấy hệ vật liệu có độ đàn hồi tốt, bền cơ học và có thể duy trì hình dạng dưới các biến dạng nhỏ.



Hình 5. Cấu trúc vùng năng lượng (a) và mật độ trạng thái riêng phần của đơn lớp MgAlGaS₄.

Tiếp theo, chúng tôi khảo sát các đặc trưng điện tử cơ bản của đơn lớp MgAlGaS₄ dựa trên các tính toán bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ. Hình 5 biểu diễn cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái tương ứng của đơn lớp MgAlGaS₄ được tính toán với phiếm hàm PBE. Kết quả tính toán cho thấy đơn lớp MgAlGaS₄ là một bán dẫn có vùng cấm thẳng với cực đại vùng hóa trị và cực tiểu vùng dẫn đều nằm tại điểm Γ trong vùng Brillouin như biểu diễn ở Hình 5(a).

Độ rộng vùng cấm của đơn lớp MgAlGaS₄ là 1.58 eV, lớn hơn độ rộng vùng cấm của đơn lớp MgGa₂S₄ (1.18 eV) nhưng nhỏ hơn độ rộng vùng cấm của đơn lớp MgAl₂S₄ [8]. Dựa vào mật độ trạng thái riêng phần biểu diễn ở Hình 5(b), chúng ta thấy rằng các orbital p của các nguyên tử S và Mg có đóng góp lớn cho sự hình thành cực đại vùng hóa trị. Trong khi đó, cực tiểu vùng dẫn được hình thành với sự đóng góp chủ yếu từ các orbital s của các nguyên tử Ga.



Hình 6. Thế tĩnh điện trung bình của đơn lớp MgAlGaS₂. Độ chênh lệch mức chân không giữa hai bề mặt được ký hiệu là $\Delta\Phi$. Mức Fermi E_F được biểu diễn bằng đường thẳng đứt nét nằm ngang.

Bên cạnh cấu trúc vùng năng lượng, một đại lượng quan trọng khác trong khi khảo sát các đặc trưng điện tử của vật liệu, đặc biệt là vật liệu hai chiều có cấu trúc bất đối xứng Janus, đó là công thoát điện tử. Đại lượng này thể hiện năng lượng tối thiểu cần thiết để một điện tử ở mức Fermi thoát ra khỏi bề mặt vật liệu vào vùng chân không, từ đó phản ánh khả năng phát xạ điện tử và các đặc tính quang–điện của vật liệu. Công thoát điện tử Φ có thể được xác định dựa trên việc phân tích thế năng tĩnh điện của vật liệu và xác định lượng thông qua biểu thức $\Phi = E_{vac} - E_F$, trong đó E_{vac} là mức năng lượng chân không và E_F là mức Fermi. Thế năng tĩnh điện của đơn lớp MgAlGaS₄ được biểu diễn ở Hình 6. Rõ ràng, sự chênh lệch về độ âm điện giữa các nguyên tử ở hai mặt của vật liệu Janus dẫn đến sự khác nhau về mức năng lượng chân không giữa hai bề mặt. Sự bất đối xứng này tạo ra điện tích phân cực theo phương vuông góc với mặt phẳng hai chiều, ảnh hưởng trực tiếp đến công thoát điện tử và đặc tính tương tác bề mặt. Kết quả tính toán cho thấy độ chênh lệch mức chân không giữa hai bề mặt của vật liệu MgAlGaS₄ là không lớn, $\Delta\Phi = 0.20$ eV. Điều này có thể giải thích bởi sự khác nhau về độ âm điện của Al và Ga là tương đối nhỏ. Sự chênh lệch về các mức chân không này cũng đã dẫn đến có sự khác biệt về công thoát điện tử ở hai bề mặt của vật liệu.

Kết quả tính toán cho thấy công thoát điện tử ở bề mặt bên dưới của vật liệu Φ_1 là 5.30 eV, nhỏ hơn công thoát điện tử ở mặt còn lại ($\Phi_2 = 5.50$ eV).

4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã đề xuất và khảo sát một cấu trúc vật liệu hai chiều mới, MgAlGaS₄, thông qua các tính toán chi tiết dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ. Kết quả cho thấy đơn lớp MgAlGaS₄ sở hữu các tính chất của một bán dẫn cùng với các đặc trưng cơ học đẳng hướng do cấu trúc tinh thể lục giác của nó. Đáng chú ý, đơn lớp MgAlGaS₄ có vùng cấm thẳng với độ rộng 1.58 eV nằm tại điểm Γ trong vùng Brillouin, cho thấy tiềm năng trong các ứng dụng điện tử và quang học. Bên cạnh đó, sự khác biệt về công thoát điện tử giữa hai bề mặt bắt nguồn từ tính bất đối xứng trong cấu trúc tinh thể đã mang lại những đặc tính độc đáo có thể được khai thác trong nhiều công nghệ tiên tiến. Đặc biệt, sự phân cực nội tại này hứa hẹn cải thiện hiệu suất của các quá trình tách điện tích, mở ra triển vọng ứng dụng trong lĩnh vực quang xúc tác, cảm biến và các thiết bị quang–điện tử. Nhìn chung, các kết quả thu được không chỉ giới thiệu một vật liệu hai chiều mới có cấu trúc ổn định và các tính chất điện tử đặc biệt mà còn gợi mở nhiều hướng nghiên cứu tiếp theo, bao gồm điều

chỉnh cấu trúc hóa học, khảo sát tương tác với chất hấp phụ và đánh giá hiệu suất trong các thiết bị thực tế. Những phát hiện này góp phần mở rộng họ vật liệu hai chiều và thúc đẩy sự phát triển của các công nghệ điện tử và quang xúc tác thế hệ mới.

Tài liệu tham khảo

- [1] Geim, A.K. and Novoselov, K.S. (2007). "The rise of graphene" *Nat. Mater.* (6), 183.
- [2] Nguyen, C.V., Truong, P. T., Phuc, H.V., Nguyen, C. Q., Hiep, N.T., and Hieu, N.N., .(2025). "Rationally designed versatile heterostructures consisted of two-dimensional goldene and MXene Sc₂CF₂". *Nano Lett.* (25), 10673.
- [3] Berman, D., Jastrzebska, A., Papi, M., and Rosenkranz, A. (2024) "Introduction to 2D materials and their applications". *RSC Adv.* (14) 17234.
- [4] Montes-García, V. and Samorì, P. (2022). "Janus 2D materials via asymmetric molecular functionalization". *Chem. Sci.* (13) 315.
- [5] J. Zhang *et al.* (2017). "Janus monolayer transition-metal dichalcogenides". *ACS Nano* (11) 8192.
- [6] Hiep, N.T., Nguyen, C.Q., Nguyen, C.V., Vu, T.V., and Hieu, N.N. (2025). "Formation of Janus goldene by surface halogenation: First-principles calculations". *Phys. Rev. B* (112) 045431.
- [7] Vu, T.V., Hung, L.V., Phuong, L.T.T., Phuc, H.V., Nguyen, C.V., Kartamyshev, A.I., and Hieu, N.N. (2025). "Electron-phonon scattering dominated intrinsic mobility in Janus MBNS₂ (M = Ti, Zr, Hf) monolayers". *J. Phys. Chem. C* (129) 20003.
- [8] Wang, L. *et al.* (2021). "Intercalated architecture of MA₂Z₄ family layered van der Waals materials with emerging topological, magnetic and superconducting properties". *Nat. Commun.* (12) 2361.
- [9] Kresse, G. and Furthmüller, J. (1996). "Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set". *Phys. Rev. B* (54) 11169.
- [10] Kresse, G. and Furthmüller, J. (1996). "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set". *Comput. Mater. Sci.*(6) 15.
- [11] Perdew, J.P., Burke, K., and Ernzerhof, M. (1996). "Generalized gradient approximation made simple". *Phys. Rev. Lett.* (77) 3865.
- [12] Togo, A., Chaput, L., and Tanaka, I. (2015). "Distributions of phonon lifetimes in Brillouin zones". *Phys. Rev. B* (91) 094306.
- [13] Duerloo, K.-A.N., Ong, M.T., and Reed, E.J. (2012). "Intrinsic piezoelectricity in two-dimensional materials". *J. Phys. Chem. Lett.* (3) 2871.
- [14] Andrew, R.C., Mapasha, R.E., Ukpong, A.M., and Chetty, N. (2012). "Mechanical properties of graphene and boronitrene". *Phys. Rev. B* (85) 125428.