

BÁN DẪN SiGeS_2 CÓ TỈ SỐ POISSON ÂM VÀ ĐỘ LINH ĐỘNG ĐIỆN TỬ CAO ĐỊNH HƯỚNG CHO CÁC ỨNG DỤNG TRONG THIẾT BỊ QUANG-ĐIỆN TỬ

Semiconductor SiGeS_2 with Negative Poisson's Ratio and High Electron Mobility Toward Applications in Opto-Electronic Devices

Nguyễn Phạm Quỳnh Anh^{(1)*}, Hồ Văn Cừ⁽¹⁾, Trương Tấn⁽¹⁾
Nguyễn Quang Cường⁽²⁾, Nguyễn Ngọc Hiếu⁽²⁾

⁽¹⁾Trường Đại học Sài Gòn

⁽²⁾Trường Đại học Duy Tân

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu một cách hệ thống các tính chất cơ học, tính chất điện tử và tính chất truyền dẫn của vật liệu hai chiều có cấu trúc bất đối xứng (Janus) SiGeS_2 bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Đơn lớp SiGeS_2 được xác định là cấu trúc tinh thể bền vững dựa trên các phân tích kết quả mô phỏng động học phân tử nguyên lý đầu, năng lượng cổ kết và so sánh với điều kiện Born–Huang về độ bền cơ học. Đơn lớp SiGeS_2 có các đặc trưng cơ học bất đẳng hướng với cả mô-đun Young và tỉ số Poisson phụ thuộc rất lớn vào hướng khảo sát. Hơn nữa, đơn lớp SiGeS_2 có tỉ số Poisson âm với giá trị dọc theo trục x lên đến -0.169 , đây là đặc trưng cơ học độc đáo với nhiều triển vọng ứng dụng trong các lĩnh vực khác nhau của công nghệ. Ở trạng thái cơ bản, đơn lớp SiGeS_2 là một bán dẫn có vùng cấm thẳng. Đặc biệt, các điện tử trong đơn lớp SiGeS_2 có độ linh động rất cao, lên đến $1386.27 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. Với độ linh động của điện tử cao, đơn lớp SiGeS_2 có nhiều triển vọng được sử dụng trong các thiết bị quang điện tử thế hệ mới.

Từ khóa: Vật liệu hai chiều, tỉ số Poisson âm, độ linh động hạt tải, lý thuyết phiếm hàm mật độ.

ABSTRACT

In this paper, we systematically study the mechanical, electronic and transport properties of the two-dimensional asymmetric Janus SiGeS_2 material by using density functional theory. The SiGeS_2 monolayer is determined to be a stable crystal structure based on the analysis of ab-initio molecular dynamics simulation results, cohesive energy and comparison with Born–Huang criteria for mechanical stability. The SiGeS_2 monolayer has anisotropic mechanical characteristics with both Young's modulus and Poisson's ratio strongly dependent on the direction of investigation. Furthermore, the SiGeS_2 monolayer has a negative Poisson's ratio with values along the x-axis up to -0.169 , which is a unique mechanical property with many application prospects in various fields of technology. In the ground state, the SiGeS_2 monolayer is a direct bandgap semiconductor. In particular, SiGeS_2 monolayer has very high mobility, up to $1386.27 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. With high electron mobility, the SiGeS_2 monolayer has great potential to be used in next-generation opto-electronic devices.

Keywords: Two-dimensional material, negative Poisson's ratio, carrier mobility, density functional theory.

*Tác giả liên hệ: npqanh@sgu.edu.vn

1. Giới thiệu

Graphene [1] có thể được xem là một biểu tượng của vật liệu hai chiều có cấu trúc lớp do lịch sử xuất hiện cũng như các tính chất vật lý hấp dẫn của nó. Mặc dù graphene có độ linh động của điện tử rất cao nhưng do có vùng cấm bằng không nên người ta thường gặp nhiều khó khăn khi sử dụng nó vào trong các thiết bị điện tử. Bên cạnh việc khắc phục các nhược điểm của graphene, các nhà khoa học đã không ngừng tìm kiếm các vật liệu có cấu trúc lớp mới.

Gần đây, Yang và các cộng sự đã đề xuất một cấu trúc vật liệu mới dựa trên các nguyên tử nhóm IVA và IVA đó là SiS với đối xứng $Pma2$ [2]. Đây là nhóm vật liệu thân thiện với môi trường và có giá thành rẻ. Đặc biệt $Pma2$ -SiS được cho là có cấu trúc bền vững hơn các dạng thù hình khác của SiS như α -SiS hay β -SiS [3] và đặc biệt nó là chất bán dẫn có nhiều triển vọng ứng dụng trong các lĩnh vực khác nhau của công nghệ điện tử do có độ linh động của điện tử rất cao. Các vật liệu nhóm IV với cấu trúc tương tự nhanh chóng thu hút sự quan tâm của cộng đồng khoa học. Hệ vật liệu SiX với $X = S, Se$ được nghiên cứu một cách có hệ thống ngay sau đó bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Các tính toán này cho thấy SiX có các tính chất vật lý vượt trội với hiệu suất nhiệt điện cao [4]. Jing và các cộng sự cũng đã phát hiện các vật liệu hai chiều nhóm IV–IV như SiS, SiSe là những vật liệu có tỉ số Poisson âm với nhiều triển vọng ứng dụng trong công nghệ lưu trữ năng lượng [5]. Gần đây, các cấu trúc bất đối xứng Janus dựa trên các cấu trúc đối xứng nhóm IV–IV SiS hay SiSe cũng đã được đề xuất và nghiên cứu [6]. Chẳng hạn như Janus Si_2SSe được tạo ra bằng cách thay thế một lớp nguyên tử S trong SiS bằng một lớp Se [6]. Cũng cần lưu ý là cách thức thay thế này đã được các nghiên cứu thực nghiệm thực hiện thành công để tạo ra Janus $MoSSe$ trước đó [7]. Một số nghiên cứu gần đây cũng chứng tỏ được rằng các cấu trúc bất đối xứng Janus có nhiều tính chất vật lý mới lạ mà không tồn tại trong các cấu trúc đối xứng nguyên thủy của nó [8, 9]. Cũng theo dòng nghiên cứu đó, trong bài báo này chúng tôi đề xuất vật liệu Janus $SiGeS_2$ và nghiên cứu một cách có hệ thống các đặc trưng vật lý cơ bản của nó bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ.

Các tính toán trong bài báo tập trung vào việc xác định các đặc trưng và tham số cấu trúc của đơn lớp $SiGeS_2$ đồng thời kiểm tra tính bền vững của cấu trúc cũng như khả năng tồn tại trong thực tế của nó. Chúng tôi tính toán và phân tích các đặc trưng cơ học của $SiGeS_2$ dựa trên các hằng số biến dạng. Các đặc trưng điện tử và truyền dẫn là những tính toán quan trọng trong bài báo này để thấy được khả năng cũng như triển vọng ứng dụng của $SiGeS_2$ vào trong các lĩnh vực khác nhau của công nghệ.

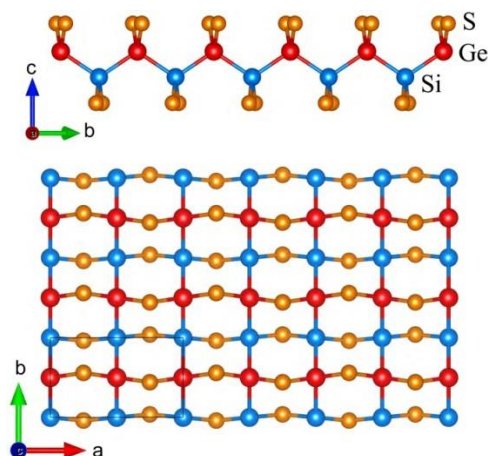
2. Phương pháp tính toán

Các tính toán trong bài báo này được thực hiện bằng phương pháp phiếm hàm mật độ với gói phần mềm mô phỏng Vienna ab initio simulation package (VASP) [10, 11]. Chúng tôi sử dụng phương pháp gần đúng gradient suy rộng (GGA) với phiếm hàm PBE (Perdew, Burke và Ernzerhof) [12] để khảo sát tương tác trao đổi tương quan trong hệ. Phiếm hàm

lai được đề xuất bởi Heyd, Scuseria và Ernzerhof (HSE06) [13] cũng được sử dụng để hiệu chỉnh cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu. Năng lượng ngưỡng trong phương pháp sóng phẳng được thiết lập là 500 eV. Vùng Brillouin được chia thành lưới với kích thước $12 \times 12 \times 1$ k -mesh bằng phương pháp chia lưới Monkhorst-Pack [14]. Ngưỡng hội tụ về năng lượng và lực lần lượt là 10^{-6} eV và 10^{-3} eV/Å. Để hạn chế tương tác giữa các lớp lân cận, chúng tôi sử dụng một khoảng chân không 20 Å dọc theo trục z . Độ bền của cấu trúc được kiểm tra bằng các mô phỏng động học phân tử nguyên lý đầu (AIMD) với tập hợp chính tắc ở nhiệt độ phòng ($T = 300$ K) trong thời gian 8 ps (8000 bước, mỗi bước 1 fs). Độ linh động của hạt tải được tính toán dựa trên lý thuyết thế biến dạng của Bardeen và Shockley [15].

3. Kết quả và thảo luận

Đơn lớp SiGeS_2 có cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng (thường được gọi là cấu trúc Janus) có thể được tạo ra từ các đơn lớp SiS (hoặc GeS) bằng cách thay thế một lớp Si trong SiS bằng một lớp Ge (hoặc thay thế một lớp GeS trong GeS bằng một lớp Si) [4]. Cấu trúc tinh thể của Janus SiGeS_2 được trình bày ở Hình 1. Ô đơn vị của SiGeS_2 là hình chữ nhật và chứa tám nguyên tử (bốn nguyên tử S, hai nguyên tử Si và hai nguyên tử Ge). Ở trạng thái cân bằng, Janus SiGeS_2 có hằng số mạng $a = 6.69$ Å và $b = 4.00$ Å. Đơn lớp SiGeS_2 có hằng số mạng lớn hơn hằng số mạng của SiS ($a = 6.62$ Å và $b = 3.96$ Å) [5]. Chiều dài liên kết giữa Si và Ge đo được là 2.42 Å. Đơn lớp SiGeS_2 có cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng là do chiều dài liên kết giữa S với Si và Ge khác nhau. Chiều dài liên kết S–Si và S–Ge lần lượt là 2.12 Å và 2.24 Å. Chiều dài liên kết S–Si nhỏ hơn chiều dài liên kết S–Ge là do bán kính nguyên tử của Si nhỏ hơn bán kính nguyên tử của Ge. Sự phá vỡ cấu trúc đối xứng gương trong vật liệu có thể làm xuất hiện nhiều tính chất vật lý mới mà không tồn tại trong các vật liệu có cấu trúc đối xứng.



Hình 1. Cấu trúc tinh thể của đơn lớp SiGeS_2 theo các góc nhìn khác nhau.

Ô đơn vị được biểu diễn bằng hình chữ nhật

Để kiểm tra độ bền cấu trúc tinh thể, chúng tôi đã thực hiện mô phỏng động học phân tử (AIMD) cho đơn lớp SiGeS_2 ở nhiệt độ phòng ($T = 300$ K). Quá trình mô phỏng AIMD

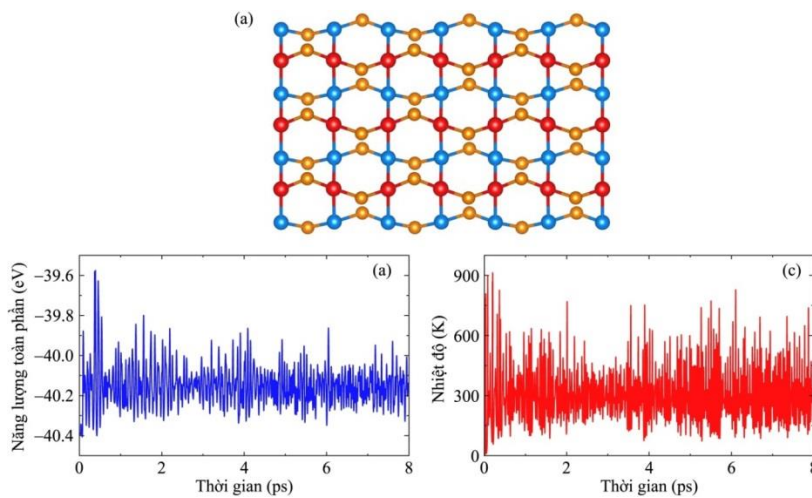
được thực hiện trong thời gian 8 ps với mỗi bước thời gian là 1 fs. Hình 2 biểu diễn cấu trúc tinh thể của SiGeS₂ sau 8 ps mô phỏng AIMD cũng như sự phụ thuộc vào thời gian của năng lượng toàn phần và nhiệt độ của hệ bằng mô phỏng AIMD. Kết quả mô phỏng cho thấy cấu trúc tinh thể của SiGeS₂ vẫn bền vững, không có sự phá vỡ các liên kết hóa học hay sự chuyển pha cấu trúc trong SiGeS₂ sau 8 ps như trong Hình 2(a). Hình 2(b) cho thấy năng lượng của đơn lớp SiGeS₂ thẳng giáng nhỏ, cỡ khoảng 0.5 eV, trong suốt thời gian mô phỏng. Bên cạnh đó, nhiệt độ của hệ dao động xung quanh giá trị 300 K và không có các thăng giáng bất thường nào về nhiệt độ của hệ được tìm thấy như biểu diễn ở Hình 2(c). Điều này có nghĩa là cấu trúc tinh thể của SiGeS₂ ổn định nhiệt ở nhiệt độ phòng.

Để đánh giá độ bền của các liên kết nội phân tử bên trong cấu trúc, chúng tôi thực hiện tính toán năng lượng cố kết của vật liệu. Năng lượng cố kết E_{coh} của SiGeS₂ được tính bằng biểu thức:

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

trong đó E_{tot} là năng lượng toàn phần của đơn lớp SiGeS₂; E_{Si} , E_{Ge} và E_S lần lượt là năng lượng của các đơn nguyên tử Si, Ge và S. N_{Si} , N_{Ge} và N_S lần lượt là số nguyên tử Si, Ge và S trong ô đơn vị.

Kết quả tính toán cho thấy năng lượng cố kết của SiGeS₂ bằng 4.97 eV/nguyên tử. Giá trị dương của năng lượng cố kết, được tính bằng công thức (1), ngầm hiểu rằng các liên kết nội phân tử bên trong của SiGeS₂ là bền vững về mặt năng lượng. Giá trị năng lượng cố kết càng lớn thì các liên kết nội phân tử càng bền vững. Đơn lớp SiGeS₂ có năng lượng cố kết tương đương với một số Janus khác có cấu trúc tương tự, chẳng hạn như Janus Si₂SSe (5.10 eV/nguyên tử) hay Si₂STe (4.85 eV/nguyên tử) [6].



Hình 2. Mô phỏng AIMD về độ bền nhiệt của đơn lớp SiGeS₂ ở nhiệt độ phòng: Cấu trúc tinh thể cuối quá trình mô phỏng (a), sự phụ thuộc thời gian của năng lượng toàn phần (b) và của nhiệt độ (b)

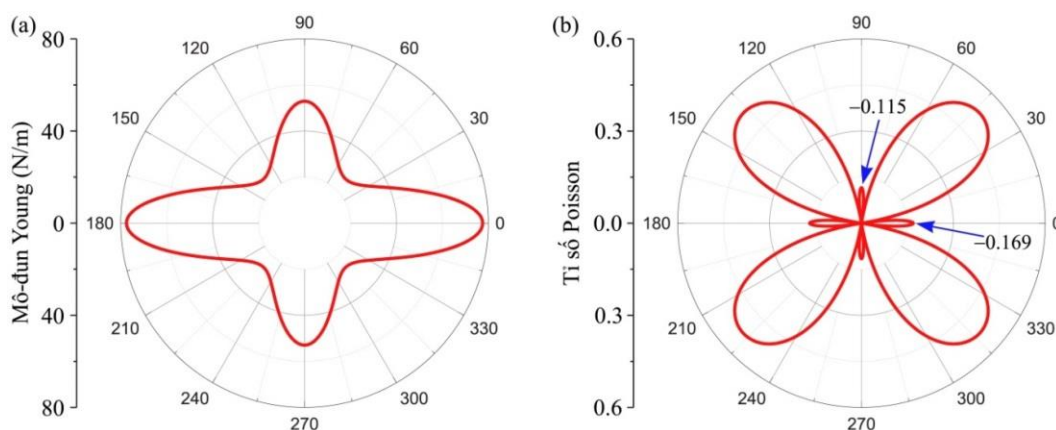
Tiếp theo, chúng tôi khảo sát các đặc trưng cơ học của SiGeS₂ dựa trên các tính toán các hệ số đàn hồi của nó. Các hằng số biến dạng C_{ij} được tính toán thông qua việc phân tích sự phụ thuộc của năng lượng vào độ biến dạng trục. Với hệ hai chiều, có bốn hệ số đàn hồi cần phải tính toán, đó là C_{11} , C_{12} , C_{22} và C_{66} . Kết quả tính toán cho thấy các hệ số đàn hồi của SiGeS₂ lần lượt là $C_{11} = 79.05$ N/m, $C_{12} = -9.13$ N/m, $C_{22} = 53.96$ N/m và $C_{66} = 8.61$ N/m. Các hệ số đàn hồi của đơn lớp SiGeS₂ thỏa mãn điều kiện Born-Huang về độ bền cơ học ($C_{11}C_{22} - C_{12}^2 > 0$ và $C_{66} > 0$) [16]. Điều này chứng tỏ đơn lớp SiGeS₂ bền vững về mặt cơ học. Nhìn vào kết quả tính toán hệ số đàn hồi, chúng ta thấy rằng trong khi các hệ số C_{11} , C_{22} và C_{66} đều có giá trị dương thì C_{12} lại có giá trị âm. Với giá trị âm này, đơn lớp SiGeS₂ có thể có những đặc trưng cơ học dị thường mà một số vật liệu khác không có, đó là tỉ số Poisson có giá trị âm.

Với các vật liệu bất đẳng hướng như SiGeS₂, các đặc trưng cơ học như mô-đun Young và tỉ số Poisson là những đại lượng phụ thuộc vào hướng khảo sát. Mô-đun Young $Y_{2D}(\alpha)$ và tỉ số Poisson $P(\alpha)$ được tính thông qua các biểu thức [17]:

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

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

với $A = (C_{11}C_{22} - C_{12}^2)/C_{66} - 2C_{12}$; $B = C_{11} + C_{22} - (C_{11}C_{22} - C_{12}^2)/C_{66}$ và α là góc giữa hướng khảo sát và trục x.



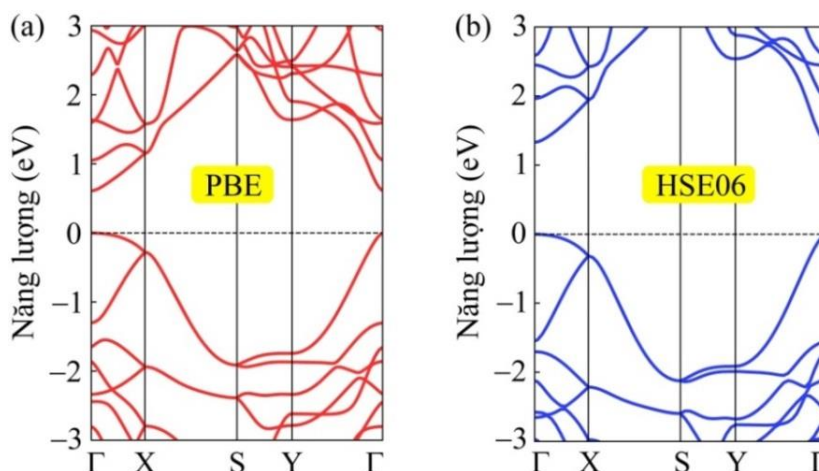
Hình 3. (a) Mô-đun Young và (b) tỉ số Poisson của đơn lớp SiGeS₂. Cánh hoa bốn cánh nhỏ dọc theo các trục ứng với 0° và 90° trong (b) có giá trị âm

Hình 3 biểu diễn sự phụ thuộc của mô-đun Young $Y_{2D}(\alpha)$ và tỉ số Poisson $P(\alpha)$ vào góc α . Từ Hình 3(a) cho thấy, mô-đun Young của SiGeS₂ phụ thuộc rất lớn vào giá trị của α . Điều này do sự bất đẳng hướng trong cấu trúc tinh thể của nó. Đơn lớp SiGeS₂ có mô-

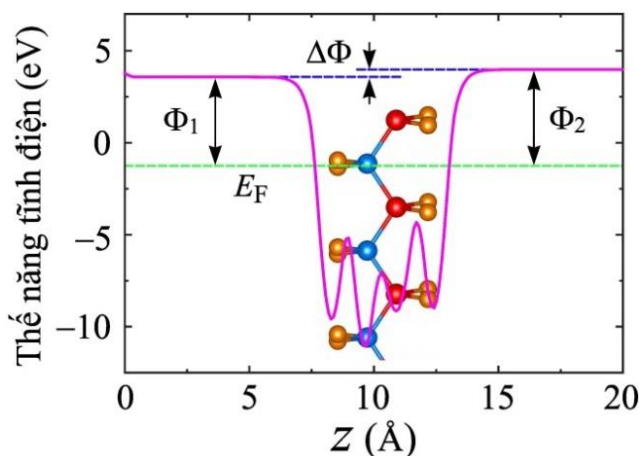
đơn Young lớn nhất dọc theo trục x (tương ứng với $\alpha = 0^\circ$). Giá trị mô-đun Young tại $\alpha = 0^\circ$ và $\alpha = 90^\circ$ lần lượt là 77.51 N/m và 52.90 N/m. Mô-đun Young của SiGeS₂ có giá trị nhỏ nhất tại $\alpha = 45^\circ$ và $\alpha = 135^\circ$ với $Y_{2D}(45^\circ) = Y_{2D}(135^\circ) = 26.26$ N/m. Điều này có nghĩa là đơn lớp SiGeS₂ cứng nhất dọc theo trục x và mềm nhất theo hướng $\alpha = 45^\circ$ và $\alpha = 135^\circ$. Cũng giống như mô-đun Young, tỉ số Poisson của SiGeS₂ cũng có tính bất đẳng hướng và giá trị của nó phụ thuộc lớn vào hướng khảo sát như biểu diễn ở Hình 3(b). Tỉ số Poisson của SiGeS₂ cực đại là 0.527 dọc theo các hướng tương ứng với $\alpha = 45^\circ$ và $\alpha = 135^\circ$. Đặc biệt hơn, đơn lớp SiGeS₂ có tỉ số Poisson âm khá lớn dọc theo trục x và trục y với $P(0^\circ) = -0.169$ và $P(90^\circ) = -0.115$. Như vậy, vật liệu SiGeS₂ có tỉ số Poisson âm hơn nhiều so với các đơn lớp SiS ($P(0^\circ) = -0.12$) hay SiSe ($P(0^\circ) = -0.08$) [5]. Với tỉ số Poisson âm, đơn lớp SiGeS₂ có khả năng chống đứt gãy tốt và có nhiều triển vọng ứng dụng trong công nghệ lưu trữ năng lượng.

Hình 4 biểu diễn cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp SiGeS₂ được tính toán bằng phiếm hàm PBE và HSE06. Dễ dàng thấy rằng đơn lớp SiGeS₂ là bán dẫn có vùng cấm thẳng với cả cực tiểu vùng dẫn (CBM) và cực đại vùng hóa trị (VBM) nằm tại điểm Γ trong vùng Brillouin. Các cấu trúc vùng năng lượng tính bằng phiếm hàm PBE và HSE06 có hình dáng cơ bản giống nhau. Tuy nhiên, độ rộng vùng cấm được tính bằng phiếm hàm PBE là 0.61 eV, nhỏ hơn nhiều so với độ rộng vùng cấm được tính bằng phiếm hàm HSE06 ($E_g^{HSE06} = 1.33$ eV). Phiếm hàm HSE06 được cho là có thể tính toán độ rộng vùng cấm của bán dẫn và điện môi chính xác hơn phiếm hàm PBE.

Bên cạnh cấu trúc vùng năng lượng, công thoát của điện tử cũng là một đại lượng quan trọng khi đánh giá các tính chất của điện tử. Do độ âm điện của các lớp nguyên tử ở hai bên khác nhau nên bên trong đơn lớp SiGeS₂ sẽ xuất hiện một điện trường nội. Điều này dẫn đến có sự khác nhau trong mức chân không giữa hai bề mặt của vật liệu. Độ chênh lệch mức chân không cũng như công thoát điện tử có thể tính toán dựa vào phân tích thể năng tĩnh điện như biểu diễn ở Hình 5. Kết quả tính toán cho thấy chênh lệch mức chân không giữa hai bề mặt của SiGeS₂ là $\Delta\Phi = 0.41$ eV. Giá trị của $\Delta\Phi$ khá nhỏ tuy vậy cũng sẽ làm cho công thoát điện tử ở hai mặt của SiGeS₂ là khác nhau. Công thoát điện tử Φ có thể được tính thông qua mức Fermi E_F và mức chân không E_{vac} theo biểu thức: $\Phi = E_{vac} - E_F$. Mức Fermi trong đơn lớp SiGeS₂ được xác định là $E_F = -1.26$ eV. Do có sự khác nhau giữa mức chân không giữa hai bề mặt nên công thoát ở hai bề mặt của SiGeS₂ cũng khác nhau. Phân tích thể năng tĩnh điện cho thấy công thoát điện tử ở mặt dưới (S–Si) là $\Phi_1 = 4.86$ eV, nhỏ hơn công thoát điện tử ở mặt trên (S–Ge) là $\Phi_1 = 5.27$ eV. Điều này có nghĩa là điện tử dễ thoát ra khỏi bề mặt dưới hơn so với mặt trên.



Hình 4. Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp SiGeS₂ được tính bằng phiếm hàm PBE (a) và HSE06 (b). Mức Fermi được thiết lập tại giá trị 0 eV



Hình 5. Thế biến dạng của đơn lớp SiGeS₂. Đường đứt nét nằm ngang là mức Fermi và $\Delta\Phi$ là chênh lệch giữa các mức chân không ở hai bề mặt của đơn lớp

Độ linh động của hạt tải

Các đặc trưng truyền dẫn, đặc biệt là độ linh động của hạt tải, đóng vai trò quan trọng trong việc xác định tiềm năng ứng dụng vật liệu đó vào trong các thiết bị điện tử và quang điện tử. Hiện nay, có nhiều phương pháp khác nhau để xác định độ linh động của hạt tải. Độ linh động của hạt tải phụ thuộc rất lớn vào các quá trình tán xạ bên trong vật liệu. Dưới đây, chúng tôi sử dụng phương pháp thế biến dạng được đề xuất bởi Bardeen và Shockley để tính toán độ linh động của hạt tải. Đây là mô hình được sử dụng rộng rãi để tính toán độ linh động của hạt tải trong cả vật liệu khối cũng như trong các cấu trúc thấp chiều. Theo lý thuyết thế biến dạng, độ linh động của hạt tải trong vật liệu hai chiều được tính thông qua biểu thức:

$$\mu_{2D} = \frac{e\hbar^3 C_{2D}}{k_B T m^* \bar{m} E_d^2}, \quad (2)$$

trong đó e là điện tích nguyên tố, $\hbar$ là hằng số Plank rút gọn, k_B là hằng số Boltzmann và T là nhiệt độ của hệ; C_{2D} và E_d lần lượt là mô đun đàn hồi và hằng số thể biến dạng; m^* là khối lượng hiệu dụng của hạt tải và $\bar{m} = \sqrt{m_x m_y}$ là khối lượng hiệu dụng trung bình của hạt tải. Các tham số truyền dẫn như khối lượng hiệu dụng m^* , mô đun đàn hồi C_{2D} và hằng số thể biến dạng E_d được tính bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ.

Khối lượng hiệu dụng m^* được tính dựa vào cấu trúc vùng năng lượng điện tử lân cận cực tiểu vùng hóa trị (cho điện tử) và lân cận cực đại vùng hóa trị (cho lỗ trống) của vật liệu theo biểu thức:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right|, \quad (3)$$

với $E(k)$ là năng lượng phụ thuộc vectơ sóng k .

Dựa vào biểu thức (3), chúng ta thấy rằng cấu trúc vùng năng lượng xung quanh cực tiểu vùng dẫn và cực đại vùng hóa trị càng phẳng (bán kính cong càng lớn) thì khối lượng hiệu dụng của hạt tải càng lớn. Khối lượng hiệu dụng đóng vai trò quan trọng trong việc xác định giá trị độ linh động của hạt tải. Khối lượng hiệu dụng càng nhỏ thì khả năng phản ứng với trường ngoài càng nhanh và hạt tải có độ linh động cao và ngược lại. Từ Hình 3, chúng ta thấy rằng cấu trúc vùng năng lượng điện tử của vùng dẫn xung quanh điểm G khá dốc, điều này có thể dự đoán rằng các điện tử trong SiGeS₂ có khối lượng hiệu dụng thấp và bán dẫn SiGeS₂ được kỳ vọng là có độ linh động của điện tử cao. Chúng ta sẽ tính các tham số truyền dẫn dọc theo hướng zigzag (trục x) và dọc theo hướng armchair (trục y) trong cấu trúc tinh thể của đơn lớp SiGeS₂.

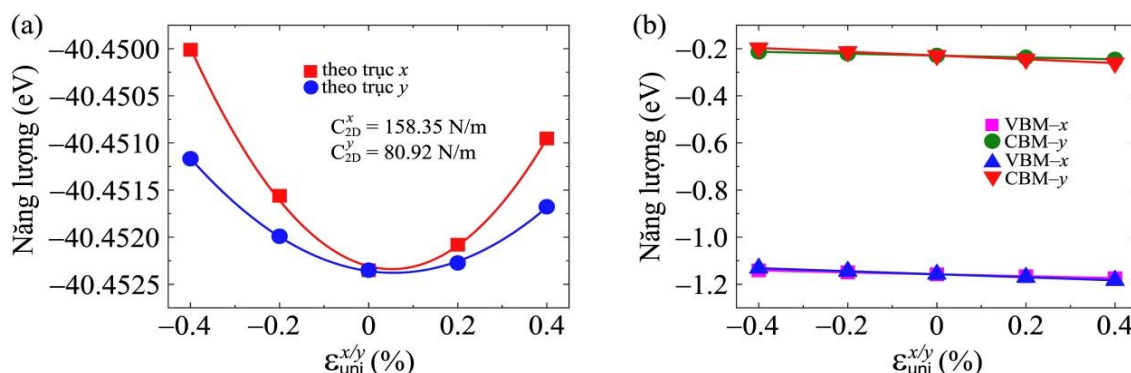
Mô-đun đàn hồi và hằng số thể biến dạng được xác định bằng các biểu thức sau:

$$C_{2D} = \frac{1}{S_0} \frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon_{uni}^2}, \quad (4)$$

$$E_d = \frac{\Delta E}{\epsilon_{uni}}, \quad (5)$$

trong đó S_0 là diện tích ô đơn vị, E là năng lượng toàn phần của hệ, ϵ_{uni} là độ biến dạng trục dọc theo các hướng truyền dẫn x và y ; ΔE là độ lệch năng lượng của cực tiểu vùng dẫn (CBM) (đối với điện tử) hoặc cực đại vùng hóa trị (VBM) (đối với lỗ trống) so với mức chân không biến dạng dọc theo các hướng x và y gây nên.

Hình 6 trình bày sự phụ thuộc của năng lượng toàn phần và năng lượng của CBM/VBM vào biến dạng trục. Giá trị biến dạng trục (dọc theo trục x và trục y) trong tính toán này được thiết lập từ -0.4% đến $+0.4\%$ trong đó dấu “-” dùng để biểu diễn biến dạng nén và dấu “+” dùng để biểu diễn biến dạng kéo. Sự phụ thuộc năng lượng của CBM/VBM vào biến dạng được khớp theo hàm tuyến tính như Hình 6(b) và độ dốc của đường khớp tuyến tính này chính là giá trị của hằng số thể biến dạng E_d .



Hình 6. Sự phụ thuộc vào biến dạng trực $\varepsilon_{uni}^{x/y}$ của năng lượng toàn phần (a) và năng lượng tại cực tiểu vùng dẫn (CBM) và cực đại vùng hóa trị (VBM) (b)

Bảng 1. Khối lượng hiệu dụng của hạt tải m^* (tính theo khối lượng điện tử tự do m_0), mô-đun đàn hồi C_{2D} (N/m), hằng số thể biến dạng E_d (eV) và độ linh động hạt tải μ ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) dọc theo hướng $x(y)$ của đơn lớp SiGeS_2 .

	m_x^*	m_y^*	C_{2D}^x	C_{2D}^y	E_d^x	E_d^y	μ_x	μ_y
Điện tử	0.55	0.14	158.35	80.92	-3.99	-8.01	1386.27	690.52
Lỗ trống	4.82	0.21	158.35	80.92	-4.09	-6.47	41.52	194.62

Kết quả tính toán khối lượng hiệu dụng, mô-đun đàn hồi và độ linh động tương ứng của hạt tải dọc theo các hướng truyền dẫn x và y trong bán dẫn SiGeS_2 được trình bày ở Bảng 1. Đúng như kỳ vọng, điện tử trong đơn lớp SiGeS_2 có khối lượng hiệu dụng thấp do cấu trúc vùng năng lượng lân cận điểm CBM khá dốc. Bên cạnh đó, khối lượng hiệu dụng của hạt tải là không đẳng hướng dọc theo hai hướng truyền dẫn x và y . Kết quả tính toán cho thấy khối lượng hiệu dụng của điện tử dọc theo hai hướng truyền dẫn x và y là $m_x^* = 0.55m_0$ và $m_y^* = 0.14m_0$ với m_0 là khối lượng điện tử tự do. Lỗ trống có khối lượng hiệu dụng theo trục x là khá lớn, lên đến $4.28m_0$, trong khi khối lượng hiệu dụng của lỗ trống dọc theo trục y chỉ $0.21m_0$. Với khối lượng hiệu dụng nhỏ, các điện tử trong đơn lớp SiGeS_2 có độ linh động rất lớn. Kết quả tính toán cho thấy độ linh động của điện tử trong SiGeS_2 dọc theo hai hướng truyền dẫn x và y lần lượt là 1386.27 và 690.52 $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. Một điều cần lưu ý rằng, mặc dù khối lượng hiệu dụng của điện tử dọc theo trục x lớn hơn dọc theo trục y nhưng độ linh động của điện tử dọc theo trục x vẫn lớn hơn dọc theo trục y bởi vì độ lớn của thể biến dạng $|E_d^x| < |E_d^y|$ như biểu diễn trong Bảng 1. Với độ linh động của điện tử cao, đơn lớp SiGeS_2 là bán dẫn có nhiều triển vọng ứng dụng trong các thiết bị điện tử thế hệ mới.

4. Kết luận

Trong bài báo này, các đặc trưng cấu trúc, tính chất điện tử và truyền dẫn của bán dẫn hai chiều SiGeS_2 được nghiên cứu bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Đơn

lớp SiGeS₂ có cấu trúc bền vững và là một bán dẫn có vùng cấm thẳng ở trạng thái cân bằng. Các kết quả tính toán cho thấy đơn lớp SiGeS₂ có các đặc trưng cơ học bất đẳng hướng và mô-đun Young khá nhỏ (lớn nhất cũng chỉ 77.51 N/m), nghĩa là nó là vật liệu khá mềm và có thể chịu được các biến dạng với cường độ lớn. Đặc biệt, SiGeS₂ có tỉ số Poisson âm dọc, đây là một tính chất cơ học độc đáo với khả năng chống đứt gãy tốt cùng với nhiều triển vọng ứng dụng trong thiết bị hấp thụ năng lượng. Bên cạnh đó, bán dẫn SiGeS₂ sở hữu các đặc trưng truyền dẫn vượt trội với độ linh động của điện tử lên đến 1386.27 cm²V⁻¹s⁻¹. Điều này mở ra nhiều triển vọng ứng dụng vật liệu SiGeS₂ vào trong các thiết bị điện tử và quang điện tử thế hệ mới. Kết quả nghiên cứu của chúng tôi không chỉ đưa ra những tính chất vật lý cơ bản của bán dẫn hai chiều có cấu trúc bất đối xứng theo phương thẳng đứng SiGeS₂ mà còn cung cấp nhiều thông tin hữu ích cho các nghiên cứu ứng dụng về nhóm vật liệu này trong tương lai.

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sài Gòn trong đề tài mã số CSA2024-03.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films, *Science*, 306 (2004) 666-669.
- [2] J.-H. Yang, Y. Zhang, W.-J. Yin, X.G. Gong, B.I. Yakobson, S.-H. Wei, Two-Dimensional SiS Layers with Promising Electronic and Optoelectronic Properties: Theoretical Prediction, *Nano Letters*, 16 (2016) 1110-1117.
- [3] Z. Zhu, J. Guan, D. Liu, D. Tománek, Designing Isoelectronic Counterparts to Layered Group V Semiconductors, *ACS Nano*, 9 (2015) 8284-8290.
- [4] J.-H. Yang, Q. Yuan, H. Deng, S.-H. Wei, B.I. Yakobson, Earth-Abundant and Non-Toxic SiX (X = S, Se) Monolayers as Highly Efficient Thermoelectric Materials, *The Journal of Physical Chemistry C*, 121 (2017) 123-128.
- [5] T. Jing, D. Liang, M. Deng, S. Cai, Two-dimensional IV–VI materials with in-plane negative Poisson's ratio and anisotropic carrier mobility, *Journal of Materials Chemistry C*, 8 (2020) 10382-10389.
- [6] N.T. Hiep, C.Q. Nguyen, N.N. Hieu, Negative Poisson's ratio and anisotropic carrier mobility in ternary Janus Si₂XY (X/Y= S, Se, Te): First-principles prediction, *Applied Physics Letters*, 123 (2023) 092102.
- [7] J. Zhang, S. Jia, I. Kholmanov, L. Dong, D. Er, W. Chen, H. Guo, Z. Jin, V.B. Shenoy, L. Shi, J. Lou, Janus Monolayer Transition-Metal Dichalcogenides, *ACS Nano*, 11 (2017) 8192-8198.
- [8] T.V. Vu, H.V. Phuc, A.I. Kartamyshev, N.N. Hieu, Enhanced out-of-plane piezoelectricity and carrier mobility in Janus γ -Sn₂XY (X/Y= S, Se, Te) monolayers: A first-principles prediction, *Applied Physics Letters*, 122 (2023) 061601

- [9] T.V. Vu, N.T. Hiep, H.V. Phuc, B.D. Hoi, A.I. Kartamyshev, N.N. Hieu, Raman response, piezoelectricity, and transport properties of the two-dimensional JanusHfSiX₃H (X = N/P/As) semiconductors: A first-principles study, *Physical Review B*, 110 (2024) 235403.
- [10] G. Kresse, J. Furthmüller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Physical Review B*, 54 (1996) 11169-11186.
- [11] G. Kresse, J. Furthmüller, Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set, *Computational Materials Science*, 6 (1996) 15-50.
- [12] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters*, 77 (1996) 3865-3868.
- [13] J. Heyd, G.E. Scuseria, M. Ernzerhof, Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential, *The Journal of Chemical Physics*, 118 (2003) 8207-8215.
- [14] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B*, 13 (1976) 5188-5192.
- [15] J. Bardeen, W. Shockley, Deformation Potentials and Mobilities in Non-Polar Crystals, *Physical Review*, 80 (1950) 72-80.
- [16] W. Fang, H. Wei, X. Xiao, Y. Chen, M. Li, Y. He, Monolayer SnX (X = O, S, Se): Two-Dimensional Materials with Low Lattice Thermal Conductivities and High Thermoelectric Figures of Merit, *ACS Applied Energy Materials*, 5 (2022) 7802-7812.
- [17] N.T. Hung, A.R.T. Nugraha, R. Saito, Two-dimensional MoS₂ electromechanical actuators, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51 (2018) 075306.

Ngày nhận bài: 19/12/2024

Ngày chấp nhận đăng: 20/6/2025