



SIMULATION OF TENSILE TESTS OF TWO-DIMENSIONAL PUCKERED HEXAGONAL BINARY SHEETS

Minh Quy Le¹, Huu Tu Nguyen^{2,*}, Do Thi Kim Lien³, Van Trang Nguyen⁴

¹Department of Mechatronics, School of Mechanical Engineering, Hanoi University of Science and Technology, Hanoi, Viet Nam

²Faculty of Fundamental Science, Military Academy of Logistics, Hanoi, Viet Nam

³Faculty of Mechanical and Civil Engineering, Vietnam-Hungary Industrial University, Ha Noi, Viet Nam

⁴Faculty of Mechanical Engineering, Thai Nguyen University of Technology, Thai Nguyen, Vietnam

ARTICLE INFO

TYPE: Research Article

Received: 28/01/2022

Revised: 04/04/2022

Accepted: 08/06/2022

Published online: 15/06/2022

<https://doi.org/10.47869/tcsj.73.5.6>

* *Corresponding author:*

Email: nguyenhuutu160382@gmail.com

Abstract. Two-dimensional materials have many special properties such as good thermal conductivity, good electrical conductivity. They have potential applications in many fields such as medicine, energy, electronics etc. Simple tensile tests were simulated by atomic-scale finite element method with Stillinger-Weber potentials. Among many two-dimensional binary materials, 6 two-dimensional puckered (p-) hexagonal materials are here investigated, namely p-SiS, p-SiSe, p-GeS, p-GeSe, p-CSe, and p-CTe, to study their mechanical properties. Results show that two-dimensional Young's modulus, Poisson's ratio, two-dimensional tensile fracture stress, and tensile fracture strain appear in the range from 10.6 through 89.1 N/m, from -0.11 to 0.42, from 2.3 to 9.4 N/m, from 20% to 43%, respectively. These materials exhibit high anisotropy with a large difference in the mechanical properties along the armchair and zigzag directions. Young's modulus in the zigzag direction is about three times larger than that in the armchair one. Results are useful for the design and application of these materials.

Keywords: two-dimensional materials, mechanical properties, Stillinger-Weber.



MÔ PHÒNG KÉO MÀNG VẬT LIỆU HAI CHIỀU HAI NGUYÊN TỬ CẤU TRÚC NÉP GẤP

Lê Minh Quý¹, Nguyễn Hữu Tú^{2,*}, Đỗ Thị Kim Liên³, Nguyễn Văn Trang⁴

¹Khoa Cơ điện tử, Trường Cơ khí, Đại học Bách Khoa Hà Nội

²Bộ môn Kỹ thuật cơ sở, Khoa Khoa học Cơ bản, Học viện Hậu cần, Ngọc Thụy - Long Biên - Hà Nội

³Khoa Cơ Khí-Xây dựng, Trường Đại Học Công Nghiệp Việt Hưng, Sơn Tây, Hà Nội

⁴Khoa Cơ khí, Đại học Kỹ thuật Công nghiệp Thái Nguyên

THÔNG TIN BÀI BÁO

CHUYÊN MỤC: Công trình khoa học

Ngày nhận bài: 28/01/2022

Ngày nhận bài sửa: 04/04/2022

Ngày chấp nhận đăng: 08/06/2022

Ngày xuất bản Online: 15/06/2022

<https://doi.org/10.47869/tcsj.73.5.6>

* Tác giả liên hệ

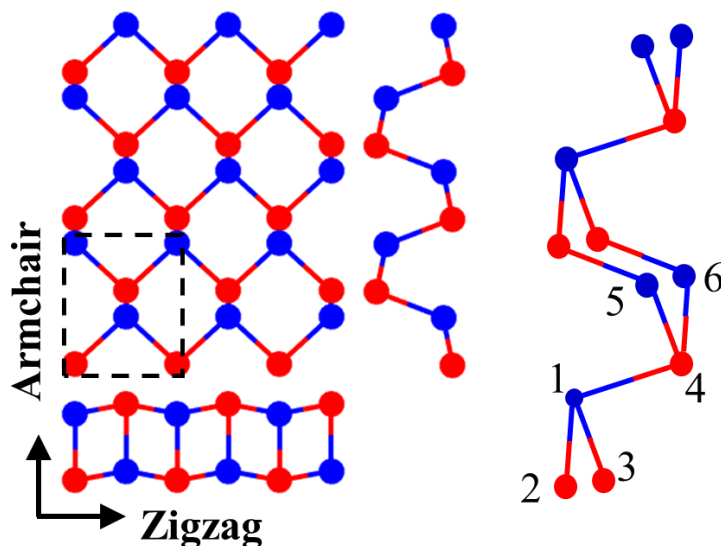
Email: nguyenuutu160382@gmail.com

Tóm tắt. Vật liệu hai chiều có nhiều tính chất đặc biệt như dẫn nhiệt, dẫn điện tốt, nên được ứng dụng trong các lĩnh vực như: y tế, năng lượng, điện tử... Bài báo nghiên cứu cơ tính của 6 vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp bao gồm: p-SiS, p-SiSe, p-GeS, p-GeSe, p-CSe, và p-CTe. Phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử với hàm thế Stillinger-Webber được sử dụng để mô phỏng tương tác giữa các nguyên tử trong quá trình kéo các màng của 6 vật liệu nêu trên. Kết quả xác định được: mô đun đàn hồi hai chiều của nhóm vật liệu này trong khoảng từ 10,6 đến 89,1 N/m; hệ số Poisson trong khoảng từ -0,11 đến 0,42; ứng suất hai chiều lớn nhất trong khoảng từ 2,3 đến 9,4 N/m và biến dạng kéo đứt từ 20% đến 43%. Kết quả cho thấy các vật liệu này có tính dị hướng cao, đồng thời là cơ sở để ứng dụng chúng trong thực tế.

Từ khóa: Vật liệu hai chiều, cơ tính, Stillinger-Weber.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Vật liệu nano được nghiên cứu rộng rãi trong thời gian gần đây, đã có nhiều công trình khoa học nghiên cứu về vật liệu nano được công bố trên nhiều tạp chí trong và ngoài nước. Với việc phát hiện và tổng hợp thành công các màng vật liệu nano hai chiều như graphene [1], BN [2], AlN [3-5]... đã mở ra hướng nghiên cứu mới về chúng với nhiều triển vọng trong tương lai. Trong các cấu trúc vật liệu nano cần kể đến cấu trúc dạng lục giác do mỗi nguyên tử chiếm vị trí đỉnh của lục giác, các cạnh của hình lục giác được tạo thành do các nguyên tử ở hai đỉnh liền kề liên kết với nhau. Vật liệu này có thể có kết cấu dạng màng lục giác phẳng (graphene [1], BN [2], AlN [3-5]); màng lục giác low-buckled (silicene [6-8], blue phosphorus [9]) và màng lục giác pucked (p-SiS, p-SiSe, p-GeS, p-GeSe, p-CSe, và p-CTe [10]). Với màng lục giác pucked của các vật liệu p-SiS, p-SiSe, p-GeS, p-GeSe, p-CSe và p-CTe), do hai nguyên tử khác nhau nằm xen kẽ ở các đỉnh của lục giác đồng thời các nguyên tử nằm trên 4 mặt phẳng song song [10] (Hình 1). Bốn mặt phẳng lần lượt chứa các nguyên tử số 2, 3; số 1; số 4 và số 5, 6 của một ô cơ bản trong hình chữ nhật vẽ bằng nét đứt trên Hình 1.



Hình 1. Cấu trúc vật liệu pucked p-MX. a) Hình chiếu thẳng góc; b) Cấu trúc không gian. Nguyên tử M có màu xanh, nguyên tử X có màu đỏ hoặc ngược lại, M và X là ký hiệu hai nguyên tố khác nhau.

Các nghiên cứu chỉ ra rằng vật liệu hai chiều có nhiều tính chất đặc biệt như dẫn nhiệt, dẫn điện tốt. Do có những tính chất ưu việt nên vật liệu hai chiều được ứng dụng cho nhiều lĩnh vực như: y học [11], năng lượng [12], điện tử [13] và nhiều lĩnh vực khác. Do việc thí nghiệm đối với vật liệu 2D phức tạp và tốn kém nên nhóm vật liệu này thường được tiến hành mô phỏng thí nghiệm bằng các phương pháp như: phần tử hữu hạn nguyên tử, phiếm hàm mật độ, mô phỏng động lực học phân tử. Qua đó, xác định các đặc trưng cơ học như: mô đun đàn hồi hai chiều, hệ số Poisson, ứng suất kéo đứt hai chiều, biến dạng khi kéo đứt. Đáng chú ý, trong các nghiên cứu [14-17], phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử cho kết quả đáng tin cậy, đảm bảo độ chính xác. Phương pháp này sử dụng nhiều dạng hàm thế khác nhau: hàm thế Stillinger-Weber [18], hàm thế Tersoff [19]; hàm thế điều hòa [20]... Hàm thế Tersoff phức tạp đòi hỏi thời gian tính lâu. Hàm thế harmonic đơn giản, không mô tả được tính phi tuyến và phá hủy của vật liệu. Hàm số Stillinger khắc phục được nhược điểm của 2 hàm thế vừa nêu, tức là thời gian tính toán hợp lý mà vẫn mô tả được tính phi tuyến và sự phá hủy của vật liệu ở mức độ chính xác chấp nhận được. Trong nghiên cứu này, hàm thế Stillinger-Weber

[18] được sử dụng đối với 6 vật liệu: p-SiS, p-SiSe, p-GeS, p-GeSe, p-CSe, và p-CTe để tính thế năng tương tác nguyên tử trong quá trình mô phỏng kéo màng nguyên của chúng.

2. PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG SỐ

2.1. Hàm thế

Khi sử dụng Hàm thế Stillinger-Weber [18], thế năng tương tác nguyên tử được xác định như sau:

$$E = E_r + E_\theta \tag{1}$$

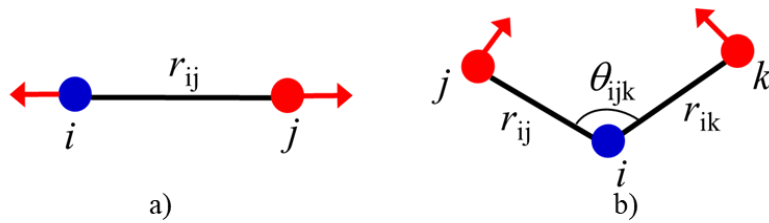
$$E_r = \sum_{i=1}^m V_2 \tag{2}$$

$$E_\theta = \sum_{i=1}^n V_3 \tag{3}$$

$$V_2 = A e^{\left[\rho / (r_{ij} - r_{\max})\right]} \left(B / r_{ij}^4 - 1 \right) \tag{4}$$

$$V_3 = K e^{\left[\rho_{ij} / (r_{ij} - r_{\max ij}) + \rho_{ik} / (r_{ik} - r_{\max ik})\right]} \left(\cos(\theta_{ijk}) - \cos(\theta_0) \right)^2 \tag{5}$$

trong đó, E : tổng năng lượng liên kết nguyên tử; E_r (eV): tổng năng lượng liên kết thẳng giữa hai nguyên tử của màng; E_θ (eV): tổng năng lượng liên kết góc của 3 nguyên tử trên toàn bộ màng; V_2 (eV): năng lượng liên kết thẳng của hai nguyên tử liền kề; V_3 (eV): năng lượng liên kết của 3 nguyên tử liền kề; m, n : số liên kết thẳng và liên kết góc trong mô hình tính; A (eV), K (eV): hệ số vật liệu, phụ thuộc vào từng loại vật liệu; ρ (Å), B (Å⁴), ρ_{ij} (Å), ρ_{ik} (Å), θ_0 (độ): những thông số hình học của vật liệu; r_{ij} (Å), r_{ik} (Å): chiều dài liên kết giữa hai nguyên tử i và j ; giữa nguyên tử i và k ; θ_{ijk} (độ): góc liên kết giữa ba nguyên tử i, j, k (trong đó i là nguyên tử ở giữa) (Hình 2). Các thông số này được tổng hợp trong Bảng 1 và Bảng 2.



Hình 2. Mô hình phân tử khi sử dụng hàm thế Stillinger-Weber: a) Liên kết thẳng; b) Liên kết góc.

Bảng 1. Thông số hàm thế Stillinger-Weber cho liên kết thẳng của vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp. Công thức tính thế năng tương tác $V_2 = A e^{\left[\rho / (r_{ij} - r_{\max})\right]} \left(B / r_{ij}^4 - 1 \right)$ [21]. Thứ tự các nguyên tử như trên hình 1b. r_{ij} là khoảng cách giữa hai nguyên tử i và j .

| TT | Vật liệu | | A , eV | ρ , Å | B , Å ⁴ | r_{\min} , Å | r_{\max} , Å | Tài liệu tham khảo |
|----|----------|----------|----------|------------|----------------------|----------------|----------------|--------------------|
| 1 | p-SiS | r_{12} | 3,878 | 0,797 | 13,992 | 0,0 | 2,977 | [21] |
| | | r_{14} | 6,051 | 1,301 | 15,094 | 0,0 | 3,217 | [21] |

| | | | | | | | | |
|---|--------|----------|--------|-------|--------|-----|-------|------|
| 2 | p-SiSe | r_{12} | 1,883 | 0,230 | 20,292 | 0,0 | 2,905 | [21] |
| | | r_{14} | 8,098 | 1,665 | 17,956 | 0,0 | 3,457 | |
| 3 | p-GeS | r_{12} | 2,096 | 0,351 | 18,371 | 0,0 | 2,926 | [21] |
| | | r_{14} | 6,694 | 1,571 | 17,234 | 0,0 | 3,398 | |
| 4 | p-GeSe | r_{12} | 0,962 | 0,115 | 25,070 | 0,0 | 2,938 | [21] |
| | | r_{14} | 6,572 | 1,846 | 20,943 | 0,0 | 3,628 | |
| 5 | p-CSe | r_{12} | 6,141 | 1,114 | 7,394 | 0,0 | 2,700 | [21] |
| | | r_{14} | 7,411 | 1,316 | 8,226 | 0,0 | 2,828 | |
| 6 | p-CTe | r_{12} | 4,165 | 0,424 | 10,965 | 0,0 | 2,643 | [21] |
| | | r_{14} | 12,519 | 1,569 | 11,313 | 0,0 | 3,106 | |

Bảng 2. Thông số hàm thế Stillinger-Weber cho liên kết góc của 4 vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp với công thức tính thế năng tương tác $V_3 = Ke^{[\rho_1/(r_{12}-r_{\max 12})+\rho_2/(r_{13}-r_{\max 13})]} (\cos(\theta) - \cos(\theta_0))^2$ [21].
Thứ tự các nguyên tử như trên hình 1b.

| TT | Góc | K, eV | θ_0 , độ | ρ_1 , Å | ρ_2 , Å | $r_{\min 12}$, Å | $r_{\max 12}$, Å | $r_{\min 13}$, Å | $r_{\max 13}$, Å | $r_{\min 23}$, Å | $r_{\max 23}$, Å | Tài liệu tham khảo | |
|----|--------|----------------|-----------------|--------------|--------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|--------------------|------|
| 1 | p-SiS | θ_{123} | 13,284 | 93,554 | 0,797 | 0,797 | 0 | 2,977 | 0 | 2,977 | 0 | 4,063 | [21] |
| | | θ_{134} | 21,310 | 96,500 | 1,301 | 0,797 | 0 | 3,217 | 0 | 2,977 | 0 | 4,232 | |
| | | θ_{415} | 24,372 | 111,710 | 1,301 | 0,797 | 0 | 3,217 | 0 | 2,977 | 0 | 4,423 | |
| 2 | p-SiSe | θ_{123} | 5,440 | 95,513 | 0,230 | 0,230 | 0 | 2,905 | 0 | 2,905 | 0 | 4,069 | [21] |
| | | θ_{134} | 28,616 | 98,200 | 1,665 | 0,230 | 0 | 3,457 | 0 | 2,905 | 0 | 4,379 | |
| | | θ_{415} | 28,545 | 97,686 | 1,665 | 0,230 | 0 | 3,457 | 0 | 2,905 | 0 | 4,369 | |
| 3 | p-GeS | θ_{123} | 4,905 | 95,402 | 0,350 | 0,350 | 0 | 2,926 | 0 | 2,926 | 0 | 4,067 | [21] |
| | | θ_{134} | 20,842 | 94,400 | 1,571 | 0,350 | 0 | 3,398 | 0 | 2,926 | 0 | 4,292 | |
| | | θ_{415} | 22,173 | 104,837 | 1,571 | 0,350 | 0 | 3,398 | 0 | 2,926 | 0 | 4,438 | |
| 4 | p-GeSe | θ_{123} | 2,614 | 96,322 | 0,115 | 0,115 | 0 | 2,938 | 0 | 2,938 | 0 | 4,133 | [21] |
| | | θ_{134} | 25,087 | 97,400 | 1,846 | 0,115 | 0 | 3,628 | 0 | 2,938 | 0 | 4,455 | |
| | | θ_{415} | 24,789 | 93,964 | 1,846 | 0,115 | 0 | 3,628 | 0 | 2,938 | 0 | 4,404 | |
| 5 | p-CSe | θ_{123} | 47,768 | 101,354 | 1,114 | 1,114 | 0 | 2,700 | 0 | 2,700 | 0 | 3,667 | [21] |
| | | θ_{134} | 52,464 | 113,000 | 1,316 | 1,114 | 0 | 2,828 | 0 | 2,700 | 0 | 4,157 | |
| | | θ_{415} | 46,000 | 100,563 | 1,316 | 1,114 | 0 | 2,828 | 0 | 2,700 | 0 | 4,032 | |
| 6 | p-CTe | θ_{123} | 13,040 | 103,122 | 0,424 | 0,424 | 0 | 2,643 | 0 | 2,643 | 0 | 3,639 | [21] |
| | | θ_{134} | 29,206 | 110,00 | 1,569 | 0,424 | 0 | 3,106 | 0 | 2,643 | 0 | 4,280 | |
| | | θ_{415} | 25,795 | 90,854 | 1,569 | 0,424 | 0 | 3,106 | 0 | 2,643 | 0 | 4,043 | |

2.2. Phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử

Với mỗi màng vật liệu hai chiều, nếu gọi \mathbf{X}_i và \mathbf{u}_i là tọa độ ban đầu và chuyển vị của nguyên tử thứ i ; khi đó, tọa độ của nguyên tử sau khi có biến dạng là: $\mathbf{x}_i = \mathbf{X}_i + \mathbf{u}_i$. Thế năng tương tác nguyên tử của toàn bộ màng được xác định là một hàm phụ thuộc vào tọa độ của mỗi nguyên tử trên màng:

$$E = E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (6)$$

với N là tổng số nguyên tử có trong màng.

Thế năng của ngoại lực tác dụng được tính:

$$E_{ext} = \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i \mathbf{u}_i \quad (7)$$

\mathbf{f}_i là ngoại lực tác dụng lên nguyên tử thứ i , \mathbf{u}_i là chuyển vị của nguyên tử thứ i tương ứng. Khi đó, thế năng toàn phần của hệ là:

$$\Pi = E - E_{ext} \quad (8)$$

Từ nguyên lý cực tiểu thế năng, hệ cân bằng khi thế năng toàn phần của hệ đạt giá trị nhỏ nhất. Theo đó, đạo hàm bậc nhất của thế năng toàn phần sẽ bằng không.

$$\frac{\partial \Pi}{\partial \mathbf{u}_i} = 0; \quad i = 1 \div N \quad (9)$$

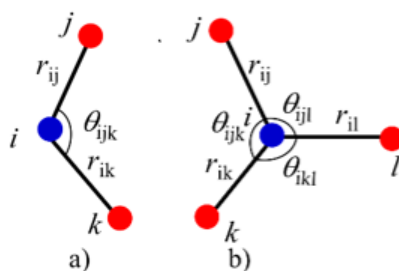
Chuyển vị của nguyên tử được tính toán khi chúng ta giải hệ phương trình (9). Ở đây, sử dụng phương pháp lặp Newton–Raphson để giải hệ phương trình (9), cách sử dụng phương pháp này đã thể hiện rõ trong [14–17], khi đó phương trình có dạng:

$$\mathbf{K}^{(k)} \cdot \mathbf{u}^{(k)} = \mathbf{F}^{(k)} \quad (10)$$

với

$$\mathbf{K}_{ij}^k = \frac{\partial^2 \Pi^{(k)}}{\partial \mathbf{u}_i \partial \mathbf{u}_j}; \quad \mathbf{F}_i^{(k)} = -\frac{\partial \Pi^{(k)}}{\partial \mathbf{u}_i} = \mathbf{f}_i - \frac{\partial E^{(k)}}{\partial \mathbf{u}_i}; \quad (11)$$

Các phương trình (10) và (11) là phương trình cơ bản của phần tử hữu hạn. Với $\mathbf{K}^{(k)}$ là ma trận độ cứng tổng thể, $\mathbf{u}^{(k)}$ là véc tơ chuyển vị nút và $\mathbf{F}^{(k)}$ là véc tơ lực nút. Nếu coi mỗi nguyên tử như một nút thì chuyển vị của nguyên tử là chuyển vị của nút. Do cấu tạo của màng lục giác nếp gấp (Hình 1), trên màng hình thành hai dạng phần tử: phần tử 3 nút (Valence) và phần tử 4 nút (Improper) (Hình 3). Do mỗi nguyên tử có thể di chuyển theo 3 phương nên sử dụng công thức (11) để tính ma trận độ cứng của mỗi phần tử có kích thước $[\mathbf{K}_{Val}]_{9 \times 9}^{(e)}; [\mathbf{K}_{Imp}]_{12 \times 12}^{(e)}$, tương ứng với phần tử 3 và 4 nút. Từ đó, tính ma trận độ cứng tổng thể $[\mathbf{K}]_{3N \times 3N}^{(k)}$ là ma trận hợp khối của các ma trận độ cứng phần tử. Các véc tơ chuyển vị và véc tơ lực có kích thước tương ứng với ma trận độ cứng tổng thể.



Hình 3. Mô hình phần tử khi sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử: a) Phần tử 3 nút (phần tử Valence); b) Phần tử 4 nút (Phần tử improver).

3. KẾT QUẢ KÉO MÀNG NGUYÊN

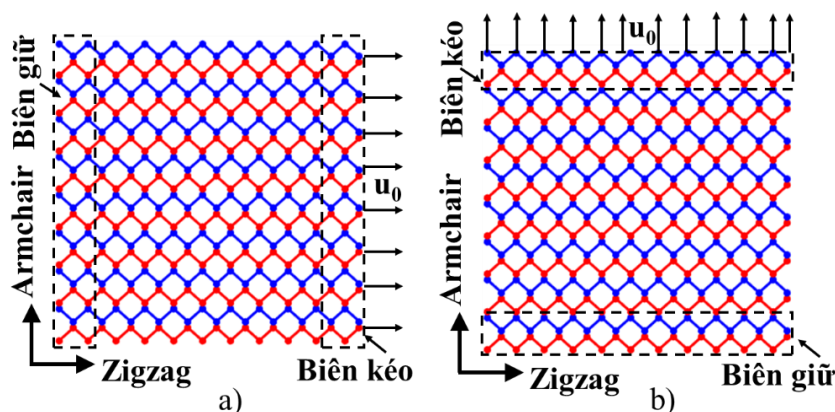
3.1. Mô hình mô phỏng kéo màng nguyên

Giải hệ phương trình (10) khi sử dụng phương pháp lặp Newton–Raphson với điều kiện biên về chuyển vị như sau: các nguyên tử trên biên kéo (Hình 4) có chuyển vị bằng $u(0)$; các nguyên tử trên biên giữ (Hình 4) có chuyển vị ban đầu không. Thay giá trị đó vào và giải phương trình (10) để xác định chuyển vị, lực nút của toàn bộ nguyên tử trên màng ở bước này. Vị trí nguyên tử trong các bước tiếp theo được xác định như sau:

$$x_{(k+1)} = x_{(k)} + u_{(k)} \quad (12)$$

quá trình lặp tiếp tục đến khi $\|F_{(k)}\| \leq \delta$, với δ là sai số cho trước.

Tiến hành mô phỏng kéo màng nguyên hình chữ nhật với kích thước các cạnh xấp xỉ bằng nhau (hình chữ nhật coi gần đúng là hình vuông); mỗi màng có khoảng từ 5124 (p-CSe) đến 6552 (p-GeSe) nguyên tử tùy thông số mạng thuộc từng loại [21].

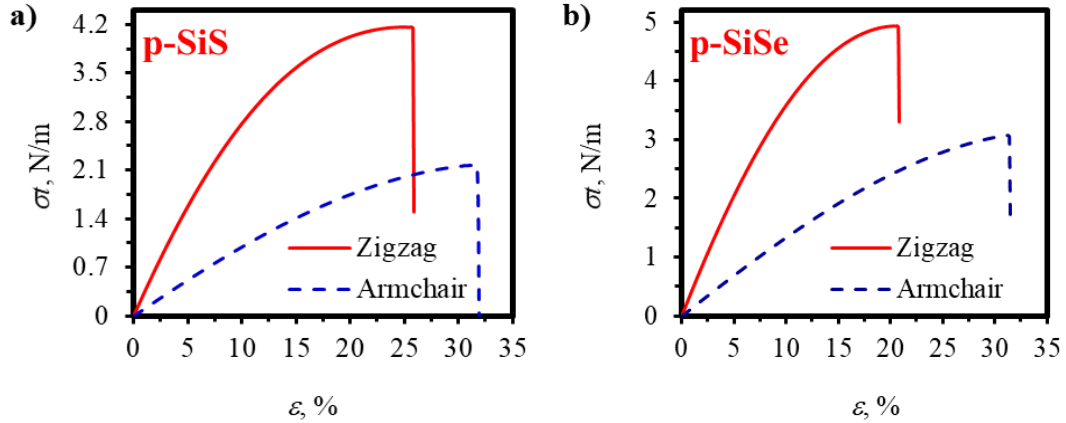


Hình 4. Kéo màng với điều kiện biên về chuyển vị: a) Kéo màng theo phương zigzag, b) kéo màng theo phương armchair. Các nguyên tử nằm trong hình chữ nhật (kẻ bằng nét đứt) được áp điều kiện biên về chuyển vị; với biên giữ, các nguyên tử có chuyển vị bằng không; biên kéo các nguyên tử có chuyển vị là $u(0)$.

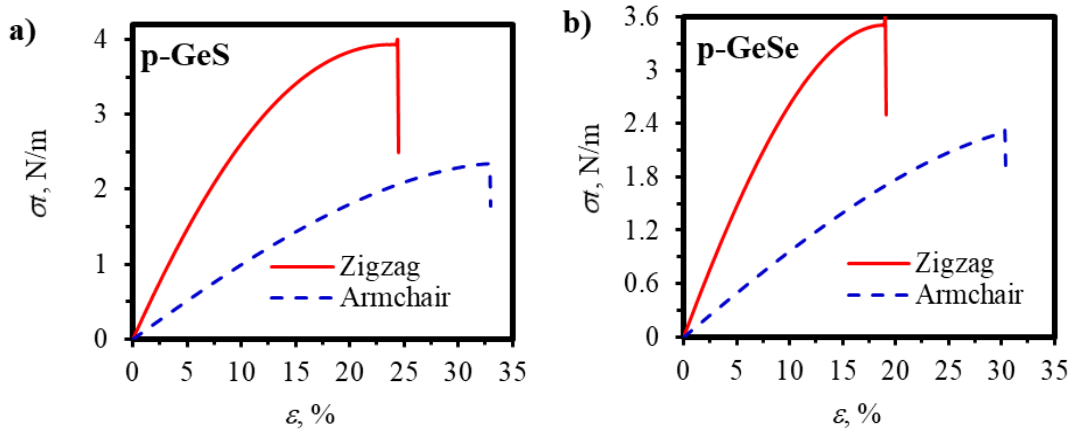
3.2. Kết quả và thảo luận

Kết quả kéo màng của các vật liệu này được thể hiện thông qua đồ thị quan hệ ứng suất - biến dạng; mô đun đàn hồi hai chiều được xác định khi làm tuyến tính hóa quan hệ của chúng

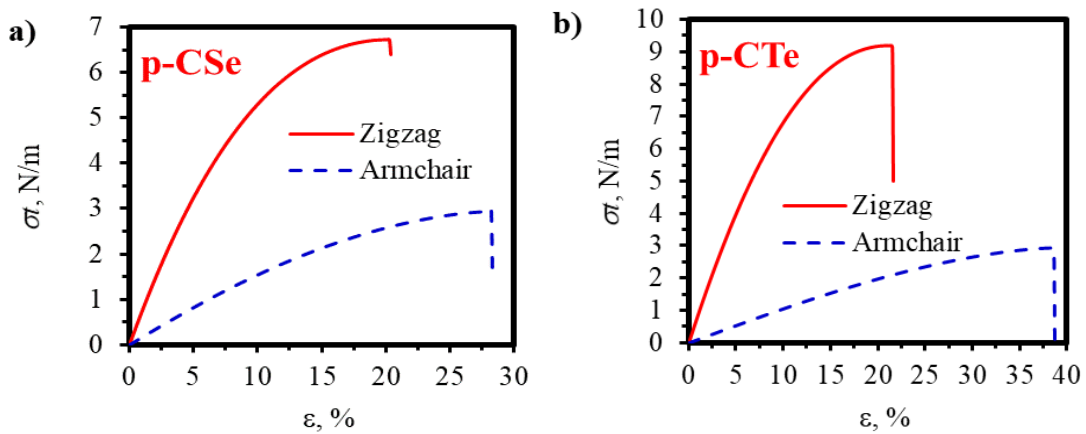
với biến dạng trong khoảng từ 0 đến 0,1; Hệ số Poisson được xác định dựa vào tỷ số biến dạng ngang và biến dạng dọc trục: $\nu = -\varepsilon_y / \varepsilon_x$; ứng suất kéo đứt hai chiều và biến dạng kéo đứt xảy ra khi kết thúc chương trình kéo. Quan hệ ứng suất và biến dạng khi kéo các màng nguyên của 6 vật liệu được thể hiện trên các Hình 5, 6 và 7.



Hình 5. Quan hệ ứng suất và biến dạng khi kéo màng p-SiX; trong đó: a) Kéo màng p-SiS; b) Kéo màng p-SiSe.



Hình 6. Quan hệ ứng suất và biến dạng khi kéo màng p-GeX; trong đó: a) Kéo màng p-GeS; b) Kéo màng p-GeSe.



Hình 7. Quan hệ ứng suất và biến dạng khi kéo màng nguyên, trong đó: a) Kéo màng p-CSe, p-CTe;

Giá trị mô đun đàn hồi hai chiều, hệ số Poisson, ứng suất hai chiều khi kéo đứt, biến dạng khi kéo đứt được thể hiện dưới đây (Bảng 3).

Bảng 3. Thông số cơ học của 4 vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp. Trong đó: t là chiều dày của màng vật liệu hai chiều.

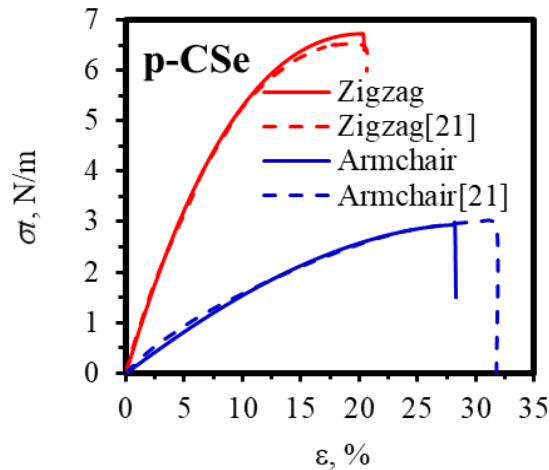
| TT | Vật liệu | Phương kéo | Mô đun đàn hồi hai chiều Y_t , N/m | Hệ số Poisson | Ứng suất hai chiều lớn nhất σ_t , N/m | Biến dạng khi ứng suất lớn nhất | Ghi chú |
|----|----------|------------|--------------------------------------|---------------|--|---------------------------------|--|
| 1 | p-SiS | AC | 10,59 | 0,03 | 2,18 | 0,317 | Kết quả tính |
| | | | 10,9 | 0,04 | 2,3 | 0,39 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | ZZ | -2,84 | -25,00 | -5,22 | -18,72 | Sai số so với [21] |
| | | | 34,39 | 0,12 | 4,16 | 0,256 | Kết quả tính |
| | | | 34,8 | 0,12 | 4,2 | 0,25 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | -1,18 | 0,00 | -0,95 | 2,40 | Sai số so với [21] | |
| 2 | p-SiSe | AC | 13,96 | 0,08 | 3,06 | 0,311 | Kết quả tính |
| | | | 14,4 | 0,09 | 3,1 | 0,37 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | ZZ | -3,06 | -11,11 | -1,29 | -15,95 | Sai số so với [21] |
| | | | 44,31 | 0,28 | 4,93 | 0,207 | Kết quả tính |
| | | | 44,6 | 0,30 | 5,3 | 0,21 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | -0,65 | -6,67 | -6,98 | -1,43 | Sai số so với [21] | |
| 3 | p-GeS | AC | 10,55 | 0,09 | 2,35 | 0,238 | Kết quả tính |
| | | | 10,6 | 0,10 | 2,4 | 0,39 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | ZZ | -0,47 | -10,00 | -2,08 | -38,97 | Sai số so với [21] |
| | | | 31,62 | 0,28 | 4,01 | 0,244 | Kết quả tính |
| | | | 32,1 | 0,29 | 4,2 | 0,24 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | -1,50 | -3,45 | -4,52 | 1,67 | Sai số so với [21] | |
| 4 | p-GeSe | AC | 9,97 | 0,12 | 2,32 | 0,303 | Kết quả tính |
| | | | 11,1 | 0,14 | 2,6 | 0,36 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | ZZ | -10,18 | -14,29 | -10,77 | -15,83 | Sai số so với [21] |
| | | | 31,51 | 0,40 | 3,59 | 0,19 | Kết quả tính |
| | | | 32,0 | 0,42 | 3,9 | 0,20 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | -1,53 | -4,76 | -7,95 | -5,00 | Sai số so với [21] | |
| 5 | p-CSe | AC | 17,07 | -0,02 | 2,99 | 0,282 | Kết quả tính |
| | | | 17,2 | -0,02 | 3,0 | 0,31 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | ZZ | -0,76 | 0,00 | -0,33 | -9,03 | Sai số so với [21] |
| | | | 75,4 | -0,09 | 6,74 | 0,202 | Kết quả tính |
| | | | 75,4 | -0,11 | 6,5 | 0,20 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | 0,00 | -18,18 | 3,69 | 1,00 | Sai số so với [21] | |
| 6 | p-CTe | AC | 10,75 | 0,02 | 2,94 | 0,385 | Kết quả tính |
| | | | 10,8 | 0,02 | 3,0 | 0,43 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | ZZ | -0,46 | 0,00 | -2,00 | -10,47 | Sai số so với [21] |
| | | | 88,86 | 0,2 | 9,19 | 0,205 | Kết quả tính |
| | | | 89,1 | 0,20 | 9,4 | 0,21 | Kết quả tính bằng MD ở 1 ⁰ K [21] |
| | | -0,27 | 0,00 | -2,23 | -2,38 | Sai số so với [21] | |

Trên Bảng 3 cho ta thấy khi kéo theo hai phương zigzag và armchair các giá trị tương ứng là: mô đun đàn hồi hai chiều Y_t có giá trị trong khoảng từ 31,51 đến 88,86 N/m và từ 9,97 đến 17,07 N/m; hệ số Poisson có giá trị trong khoảng từ -0,09 đến 0,4 và -0,02 đến 0,2; ứng suất hai chiều σ lớn nhất trong năm khoảng từ 3,59 đến 9,19 N/m và từ 2,18 đến 3,06 N/m; biến dạng khi kéo đứt trong khoảng từ 0,19 đến 0,256 và từ 0,238 đến 0,385. Trong đó, mô đun đàn hồi hai chiều Y_t (N/m), ứng suất hai chiều σ (N/m) là hai thông số phụ thuộc chiều

dày t của màng. Ví dụ, với màng graphene, chiều dày $t=3,4 \text{ \AA}$, mô đun đàn hồi hai chiều có giá trị $Yt=358 \text{ N/m}$ khi kéo theo phương zigzag và $Yt=340 \text{ N/m}$ khi kéo theo phương armchair; khi đó, mô đun đàn hồi của graphene khi kéo phương zigzag và armchair tương ứng là $Y=1,05.10^{12} \text{ N/m}^2$ và $Y=1,03.10^{12} \text{ N/m}^2$ [22]. Với màng p-P, khoảng cách giữa hai lớp nguyên tử là $5,5 \text{ \AA}$ khi đó chiều dày của màng $t=5,5 \text{ \AA}$ [23]; mô đun đàn hồi của màng p-P theo hai phương zigzag và armchair là $16,45.10^{10} \text{ N/m}^2$ và $4,19.10^{10} \text{ N/m}^2$, tương ứng mô đun đàn hồi hai chiều là $90,5 \text{ N/m}$ và $24,3 \text{ N/m}$ [21].

Kết quả mô phỏng cho thấy p-CSe có hệ số Poisson nhỏ hơn 0, phù hợp với nghiên cứu của Jiang [21]. Đó là do cấu tạo nếp gấp của vật liệu pucked dẫn đến khi kéo màng theo một phương, hai phương còn lại có một phương nở ra và một phương co lại, phương nở ra sẽ có hệ số Poisson nhỏ hơn không.

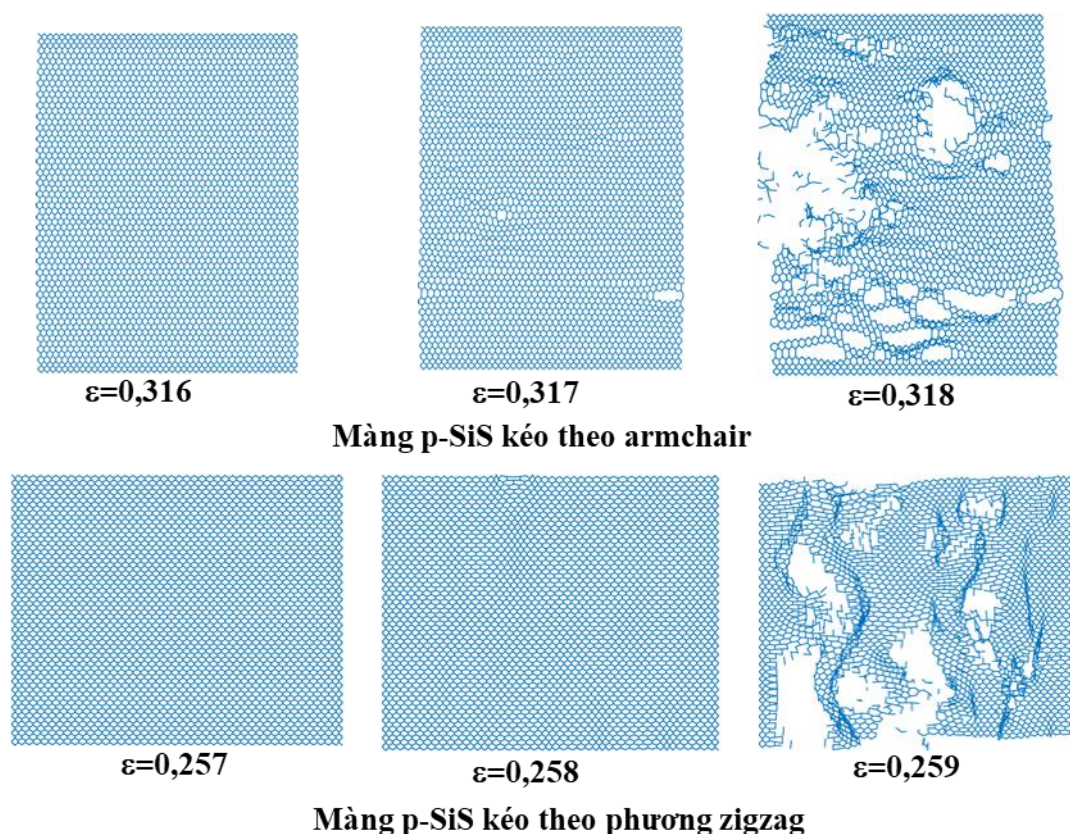
Thông qua so sánh cho thấy sự phù hợp và tương đồng so với kết quả nghiên cứu của Jiang [21]. Cụ thể: sai số so với nghiên cứu của Jiang là từ $-10,2\%$ (p-GeSe khi kéo theo armchair) đến 0% (p-CSe khi kéo theo phương zigzag) đối với mô đun đàn hồi; -25% (p-SiS khi kéo theo armchair) đến 0% (p-SiS, p-Sb, p-CTe khi kéo theo phương zigzag) đối với hệ số Poisson; ứng suất hai chiều lớn nhất khi kéo đứt từ $-10,8\%$ (p-GeSe khi kéo theo armchair) đến $3,68\%$ (p-CSe khi kéo theo phương zigzag); biến dạng khi đạt ứng suất lớn nhất có sai số tương ứng là $38,97\%$ và $2,4\%$ tương ứng khi kéo màng p-GeS theo phương armchair và p-SiS theo phương zigzag.



Hình 8. Quan hệ ứng suất - biến dạng khi kéo màng p-CSe.

Đồ thị trên Hình 8 biểu diễn mối quan hệ giữa ứng suất và biến dạng khi kéo màng p-CSe. Trong đó, đường nét liền là kết quả của nghiên cứu; đường nét đứt là kết quả nghiên cứu của Jiang [21] khi sử dụng MD để tính ở 1 K. Các đường này gần như trùng khớp nhau. Tuy nhiên, khi sử dụng MD [21] để kéo màng theo phương armchair, màng có biến dạng dài hơn trước khi bị phá hủy khoảng 9% ; đối với phương zigzag, biến dạng dài trước khi phá hủy sai lệch nhau 1% . Như vậy, có sự phù hợp và tương đồng với kết quả nghiên cứu của Jiang [21].

Trong quá trình mô phỏng kéo, màng sẽ phá hủy khi liên kết giữa các nguyên tử liên kề bị phá vỡ. Trên hình 9 cho thấy sự phá hủy màng p-SiS, khi kéo theo phương armchair với biến dạng $\epsilon = 0,317$ đã có một vài liên kết bị đứt, sau đó khi $\epsilon = 0,318$ rất nhiều liên kết bị đứt lúc này màng đã bị phá hủy. Tương tự, khi kéo theo phương zigzag, ở bước $\epsilon = 0,258$ đã có một vài liên kết ở biên bị đứt trước khi màng bị phá hủy với biến dạng $\epsilon = 0,259$.



Hình 9. Sự phá hủy của màng p-SiS chịu kéo, trong đó: Bên trên) Kéo màng theo phương Armchair; Bên dưới) Kéo màng theo phương zigzag.

4. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, cơ tính của 6 vật liệu hai chiều cấu trúc pucked được xác định khi sử dụng phương pháp phân tử hữu hạn nguyên tử với hàm thế Stillinger-Weber. Kết quả cho thấy, những vật liệu này có cơ tính tương đối tốt (mô đun đàn hồi hai chiều có giá trị trong khoảng từ 10,6 đến 89,1 N/m). Các kết quả nghiên cứu này đã được so sánh với nghiên cứu trước đó[21], với kết quả so sánh thể hiện rõ trên bảng 3 cho thấy kết quả tính toán đảm bảo tin cậy. Cơ tính của các vật liệu này theo hai phương armchair và phương zigzag khác nhau khá nhiều, do đó 6 vật liệu hai chiều cấu trúc pucked có tính dị hướng cao. Đặc biệt, vật liệu p-CSe có hệ số Poisson âm là một phát hiện mới. Các thông số cơ học của 6 vật liệu trên là cơ sở để tính toán, nghiên cứu những đặc trưng cơ học khác như: đặc trưng phá hủy của vật liệu, dao động của màng, ảnh hưởng của khuyết tật.

LỜI CẢM ƠN

Công trình này do Quỹ phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia Việt Nam (NAFOSTED) tài trợ, mã đề tài 107.02-2020.09.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. A.K. Geim, Graphene: status and prospects. *Science*, 324 (2009) 1530-1534. <https://www.science.org/doi/10.1126/science.1158877>
- [2]. A. Pakdel, Z. Chunyi, B. Yoshio, G. Dmitri, Low-dimensional boron nitride nanomaterials, *Materials Today*, 15 (2012) 256–265. [https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(12\)70116-5](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(12)70116-5).
- [3]. P. Tsipas, S. Kassavetis, D. Tsoutsou, E. Xenogiannopoulou, E. Golias, S. A. Giamini, C. Grazianetti, D. Chiappe, A. Molle, M. Fanciulli, A. Dimoulas, Evidence for graphite-like hexagonal AlN nanosheets epitaxially grown on single crystal Ag(111), *Applied Physics Letters*, 103 (2013) 251605. <https://doi.org/10.1063/1.4851239>
- [4]. V. Mansurov, T. V. Malin, Yu. G. Galitsyn, K. S. Zhuravlev, Graphene-like AlN layer formation on (111) Si surface by ammonia molecular beam epitaxy, *Journal of Crystal Growth*, 428 (2015) 93-97. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2015.07.030>
- [5]. T. Malin, V. G. Mansurov, Y. Galitsyn, K. S. Zhuravlev, 2D AlN crystal phase formation on (0001) Al₂O₃ surface by ammonia MBE, *Physica status solidi c*, 12 (2015) 443-446. <https://doi.org/10.1002/pssc.201400168>
- [6]. B. Aufray, A. Kara, S. Vizzini, H. Oughaddou, C. Léandri, B. Ealet, G. L. Lay, Graphene-like silicon nanoribbons on Ag (110): A possible formation of silicene, *Applied Physics Letters*, 96 (2010) 183102-183102. <https://doi.org/10.1063/1.3419932>
- [7]. P.D. Padova C. Quaresima, C. Ottaviani, P.M. Sheverdyeva, C. Carbone, D. Topwal, B. Oliveieri, A. Kara, H. Oughaddou, B. Aufray, G. L. Lay, Evidence of graphene-like electronic signature in silicene nanoribbons, *Applied Physics Letters*, 96 (2010) 261905-261908. <https://doi.org/10.1063/1.3459143>
- [8]. L. Meng, Yeliang Wang, Lizhi Zhang, Shixuan Du, Buckled silicene formation on Ir (111), *Nano letters*, 13 (2013) 685-690. <https://doi.org/10.1021/nl304347w>
- [9]. Z. Zhu, D. Tomanek, Semiconducting Layered Blue Phosphorus: A Computational Study, *Physical review letters*, 112 (2014) 176802-176807. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.176802>
- [10]. K. Chinnathambi, A. Chakrabarti, M. Ezawa, Direct Band Gaps in Group IV-VI Monolayer Materials: Binary Counterparts of Phosphorene. *Physical Review B*, 93 (2015) 125428-125441. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.125428>
- [11]. L. Miaomiao, Taojian Fan, Yun Zhou, Han Zhang, Lin Mei, 2D Black Phosphorus–Based Biomedical Applications, *Advanced Functional Materials*, 29 (2019) 1808306. <https://doi.org/10.1002/adfm.201808306>
- [12]. H. Jiang, T. S. Zhao, Yuxun Ren, Zhang Ruihan, Ab initio prediction and characterization of phosphorene-like SiS and SiSe as anode materials for sodium-ion batteries, *Science Bulletin*, 62 (2017) 572-578. <https://doi.org/10.1016/j.scib.2017.03.026>
- [13]. A. Sarkar, E. Stratakis, Recent Advances in 2D Metal Monochalcogenides, *Advanced Science*, 7 (2020) 2001655. <https://doi.org/10.1002/advs.202001655>
- [14]. B. Liu, Ying-sheng Huang, Hanqing Jiang, Shaojian Qu, The atomic-scale finite element method. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 193 (2004) 1849-1864. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.12.037>
- [15]. W. Youqi, C. Zhang, E. Zhou, C. Sun, J. Hinkley, T. S. Gates, J. Su, Atomistic finite elements applicable to solid polymers, *Computational materials science*, 36 (2006) 292-302. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2005.03.016>
- [16]. J. Wackerfu, Molecular mechanics in the context of the finite element method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 77 (2009) 969-997. <https://doi.org/10.1002/nme.2442>
- [17]. L. Nasdala, A. Kempe, R. Rolfes, The molecular dynamic finite element method (MDFEM), *Computers Materials and Continua*, 19 (2010) 57-104. <https://doi.org/10.3970/cmc.2010.019.057>

- [18].F.H. Stillinger, T.A. Weber, Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, *Physical review B*, 31(1985) 5262-5271. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.5262>
- [19].J.Tersoff, Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems, *Physical Review B*, 39 (1989) 5566-5568. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.5566>
- [20].Nguyen Danh Truong, Minh Quy Le, Tham Lam Bui, Hai Le Bui, Atomistic simulation of free transverse vibration of graphene, hexagonal SiC, and BN nanosheets. *Acta Mechanica Sinica*, 33 (2016) 132-147. <https://10.1007/s10409-016-0613-z>
- [21].J.-W. Jiang, Y.-P. Zhou, Handbook of Stillinger-Weber Potential Parameters for Two-Dimensional Atomic Crystals, InTech, 2017.
- [22].M.-Q. Le, Mode-I stress intensity factor in single layer graphene sheets, *Computational Materials Science*, 118 (2016) 251-258. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.03.027>
- [23].F. Hao, X. Chen, First-principles study of the defected phosphorene under tensile strain, *Journal of Applied Physics*, 120 (2016) 1063-1073 . <https://doi.org/10.1063/1.4966167>