



## CALCULATION MECHANICAL, ELECTRONIC AND PIEZOELECTRIC PROPERTIES OF MONOLAYER SiS MATERIAL USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Tran The Quang<sup>1,\*</sup>, Nguyen Hoang Linh<sup>2,3</sup>, Dinh The Hung<sup>4</sup>, Pham Quoc Viet<sup>5</sup>,  
Nguyen Trung Kien<sup>1</sup>, Do Van Truong<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Technology and Engineering, Thai Binh University, Thai Binh, Vietnam

<sup>2</sup>Semiconductor Materials Center, Korea Institute of Ceramic Engineering and Technology, Jinju, Republic of Korea

<sup>3</sup>Department of Materials Convergence and System Engineering, Changwon National University, Changwon, Republic of Korea

<sup>4</sup>Faculty of Mechanical Engineering and Mechatronics, Phenikaa University, Hanoi, Vietnam

<sup>5</sup>School of Mechanical Engineering, Hanoi University of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

### ARTICLE INFO

TYPE: Research Article

Received: 06/07/2024

Revised: 11/10/2024

Accepted: 10/12/2024

Published online: 15/12/2024

<https://doi.org/10.47869/tcsj.75.9.3>

\* Corresponding author

Email: tranthequang12@gmail.com; Tel: +84982346396

**Abstract.** Two-dimensional materials with many superior properties have received the attention of scientists. Among them, the monolayer SiS structure is a promising material for practical applications. In this study, we determined the mechanical, electronic, and piezoelectric properties of monolayer SiS materials using density functional theory. First, results about phonon spectra, thermal vibration spectra and elastic constants, we demonstrated that the monolayer SiS material structure has high stability. Through the application of mechanical strains, we can determine mechanical behaviors as well as control the energy band structure of the monolayer SiS material. Finally, the piezoelectric properties of the material were elucidated through the relationship between strain and the polarization shift among the atoms. The obtained piezoelectric charge and stress coefficients showed promising values, confirming that the monolayer SiS material structure is an excellent candidate in the field of piezoelectrics. Our results not only demonstrate the potential of SiS but also provide valuable information for the application of this material in advanced electronic devices.

**Keywords:** mechanical properties, energy band gap, piezoelectric properties, density functional theory, monolayer SiS material

@ 2024 University of Transport and Communications



## TÍNH TOÁN TÍNH CHẤT CƠ HỌC, ĐIỆN TỬ VÀ ÁP ĐIỆN CỦA VẬT LIỆU SiS ĐƠN LỚP BẰNG LÝ THUYẾT PHIẾM HÀM MẬT ĐỘ

Trần Thế Quang<sup>1,\*</sup>, Nguyễn Hoàng Linh<sup>2,3</sup>, Đinh Thế Hưng<sup>4</sup>, Phạm Quốc Việt<sup>5</sup>,  
Nguyễn Trung Kiên<sup>1</sup>, Đỗ Văn Trường<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Khoa Công nghệ và Kỹ thuật, Trường Đại học Thái Bình, Thái Bình, Việt Nam

<sup>2</sup>Trung Tâm Vật liệu Bán dẫn, Viện Công nghệ và Kỹ thuật Ceramic Hàn Quốc, Jinju, Hàn Quốc

<sup>3</sup>Khoa Hội tụ Vật chất và Kỹ thuật Hệ thống, Trường Đại học Quốc Gia Changwon, Changwon, Hàn Quốc

<sup>4</sup>Khoa Cơ khí và Cơ điện tử, Trường Đại học Phenikaa, Hà Nội, Việt Nam

<sup>5</sup>Trường Cơ khí, Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội, Việt Nam

### THÔNG TIN BÀI BÁO

CHUYÊN MỤC: Công trình khoa học

Ngày nhận bài: 06/07/2024

Ngày nhận bài sửa: 11/10/2024

Ngày chấp nhận đăng: 10/12/2024

Ngày xuất bản Online: 15/12/2024

<https://doi.org/10.47869/tcsj.75.9.3>

\* Tác giả liên hệ

Email: tranthequang12@gmail.com; Tel: +84982346396

**Tóm tắt.** Vật liệu 2D với nhiều tính chất ưu việt đã nhận được sự quan tâm của các nhà khoa học. Trong số đó, cấu trúc SiS đơn lớp là một vật liệu đầy hứa hẹn cho các ứng dụng thực tiễn. Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã xác định các tính chất cơ học, điện tử và áp điện của vật liệu SiS đơn lớp bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ. Đầu tiên, kết quả phổ dao động phonon, phổ dao động nhiệt và các hằng số đàn hồi được sử dụng để làm sáng tỏ tính ổn định của vật liệu. Bên cạnh đó, thông qua việc áp dụng biến dạng cơ học, chúng tôi đã khám phá được hành vi cơ học cũng như điều chỉnh cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu SiS đơn lớp. Cuối cùng, tính chất áp điện của vật liệu được làm sáng tỏ qua mối quan hệ giữa biến dạng và độ lệch phân cực giữa các nguyên tử. Hệ số điện tích áp điện và hệ số ứng suất áp điện thu được đã tiết lộ vật liệu SiS đơn lớp là một ứng cử viên sáng giá trong lĩnh vực áp điện. Những kết quả của chúng tôi là minh chứng cho tiềm năng của cấu trúc SiS và cung cấp thông tin hữu ích cho việc ứng dụng vật liệu này trong các thiết bị điện tử tiên tiến.

**Từ khóa:** tính chất cơ học, cấu trúc vùng năng lượng, tính chất áp điện, lý thuyết phiếm hàm mật độ, vật liệu SiS đơn lớp

@ 2024 Trường Đại học Giao thông vận tải

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Sự ra đời của vật liệu graphene đã tạo nên một cuộc cách mạng trong cộng đồng nghiên cứu khoa học vật liệu [1]. Từ một phương pháp chế tạo đơn giản, vật liệu graphene đã được tạo ra thành công, mở đường cho sự phát triển của các vật liệu hai chiều (2D). Trong hơn hai thập kỷ qua, nhờ những công nghệ chế tạo tiên tiến, số lượng các vật liệu 2D đã không ngừng gia tăng, bao gồm nhiều loại cấu trúc vật liệu như cấu trúc lục giác Boron-Nitơ (*h*-BN), dichalcogenides kim loại chuyển tiếp (TMDs), Phospho đen, các hợp chất oxit kim loại, MXenes và Silicon Carbide (SiC) [2-6]. Vật liệu 2D còn được biết đến với nhiều tính chất đặc biệt như tính chất cơ học linh hoạt, tính chất điện tử linh động, khả năng hấp thụ các photon ánh sáng mạnh và hệ số công suất nhiệt điện lớn [7, 8]. Những đặc tính này xuất phát từ cấu trúc nguyên tử độc đáo, độ dày chỉ vài nanomet và diện tích hoạt động bề mặt lớn. Nhờ vậy, vật liệu 2D đã và đang được ứng dụng rộng rãi trong nhiều lĩnh vực như thiết bị cảm biến quang học, siêu tụ điện, cơ bắp nhân tạo và thiết bị điện tử nano, mở ra nhiều triển vọng mới trong công nghệ và đời sống [9-11].

Trong số các vật liệu 2D, cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp nổi lên như một ứng cử viên đầy tiềm năng nhờ các đặc tính nổi trội được chứng minh qua nhiều nghiên cứu. Alam và cộng sự [12] đã chỉ ra rằng vật liệu van der Waals của cấu trúc SiS mang lại những lợi ích đáng kể cho quá trình chuyển đổi năng lượng mặt trời thành nguồn năng lượng sạch. Nghiên cứu này cũng đã làm sáng tỏ mối tương quan giữa sự phân cực của hàm điện môi cũng như vùng trống năng lượng trong cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp đến khả năng hấp thụ quang học tuyệt vời. Trong một nghiên cứu khác, Zhao và cộng sự [13] đã tập trung nghiên cứu vật liệu van der Waals của cấu trúc SiS và phát hiện ra hai cấu trúc dị thể của vật liệu này có khả năng tăng cường đáng kể tốc độ hấp thụ năng lượng mặt trời so với cấu trúc tự nhiên. Zhao và cộng sự [13] cũng chỉ ra rằng biến dạng cơ học và điện trường là những phương pháp hiệu quả để tối ưu hóa cấu trúc vùng năng lượng của các dị thể cũng như tăng cường độ linh động của các điện tử, từ đó cải thiện quá trình quang xúc tác. Behzad và cộng sự [14] đã sử dụng biến dạng cơ học để nghiên cứu khả năng hấp thụ năng lượng của vật liệu SiS đơn lớp. Kết quả cho thấy vật liệu SiS đơn lớp là một vật liệu đầy hứa hẹn cho công nghệ quang học tương lai, với khả năng hấp thụ ánh sáng có thể điều chỉnh linh hoạt bằng biến dạng cơ học. Nhìn chung, các nghiên cứu trước đây đã khẳng định rằng SiS đơn lớp sở hữu nhiều ưu điểm vượt trội, đặc biệt là những đặc tính quang học. Tuy nhiên, để có thể ứng dụng vật liệu này vào trong thực tế nhiều nghiên cứu chuyên sâu vẫn cần phải thực hiện. Trong số đó, nghiên cứu tính chất cơ học đóng một vai trò quan trọng, không chỉ cung cấp thông tin hữu ích về độ bền ở kích thước 2D, còn cung cấp những dự đoán sự thay đổi các tính chất của vật liệu dưới tác động của biến dạng cơ học. Đây có thể được coi là một trong những cơ sở tiên tiến nâng cao hiệu quả hoạt động của các thiết bị sử dụng SiS đơn lớp trong tương lai.

Xuất phát từ những mục tiêu trên, nghiên cứu này tập trung xác định các tính chất cơ bản như cơ học, điện tử và áp điện của vật liệu SiS đơn lớp thông qua lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). Quan trọng hơn, nghiên cứu còn tập trung khảo sát ảnh hưởng của biến dạng cơ học đến các tính chất điện tử và tìm ra hệ số áp điện của vật liệu. Dựa vào sự biến động độ lệch phân cực của vật liệu SiS đơn lớp, chúng tôi có thể tính toán hệ số ứng suất áp điện ( $d$ ) và hệ số điện tích áp điện ( $e$ ). Các kết quả được từ nghiên cứu này cung cấp những thông tin hữu ích cho việc ứng dụng vật liệu SiS đơn lớp trong các thiết bị điện tử và quang học tiên tiến, mở ra triển vọng mới trong lĩnh vực vật liệu 2D.

## 2. PHƯƠNG PHÁP TÍNH TOÁN

Tính chất cơ học, điện tử và áp điện của vật liệu SiS đơn lớp được nghiên cứu bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ thông qua phần mềm Quantum Espresso (QE) [15]. Trong đó, hàm thế năng dựa trên thư viện PS [16] để mô tả tương tác giữa các nguyên tử. Để đảm bảo tính chính xác và sự hội tụ của quá trình tính toán, ngưỡng năng lượng cho bán kính tương tác giữa các nguyên tử được lựa chọn bằng 60 Ry và mật độ điện tích là 720 Ry [17]. Sử dụng xấp xỉ gradient tổng quát (GGA) của hàm Perdew-Burke-Ernzerhof làm hàm thế năng tương quan trao đổi [18] và lựa chọn lưới điểm  $k$  là  $15 \times 15 \times 1$  theo phương pháp Monkhorst-Pack [19]. Để tránh sự tương tác giữa các lớp nguyên tử, cấu trúc vật liệu được thiết lập một vùng chân không bằng 30 Å theo phương  $z$ . Cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp được tính toán với các điều kiện về lực và ứng suất nhỏ hơn 0,005 Ry/a.u. và 0,05 GPa ở nhiệt độ 0K [20]. Ngoài ra, để thu được kết quả chính xác cao hơn của tính chất điện tử, chúng tôi đã sử dụng hàm thế năng tương quan trao đổi HSE (Heyd-Scuseria-Ernzerhof) [16] để tính toán cấu trúc vùng năng lượng. Thêm vào đó, gói công cụ Wannier 90 được sử dụng để nội suy và hiệu chỉnh cấu trúc vùng năng lượng cho phù hợp [21]. Sự kết hợp các phương pháp này đã giúp hiểu rõ hơn về tính chất điện tử của vật liệu SiS đơn lớp, góp phần định hướng ứng dụng vật liệu trong thực tế được tốt hơn.

## 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

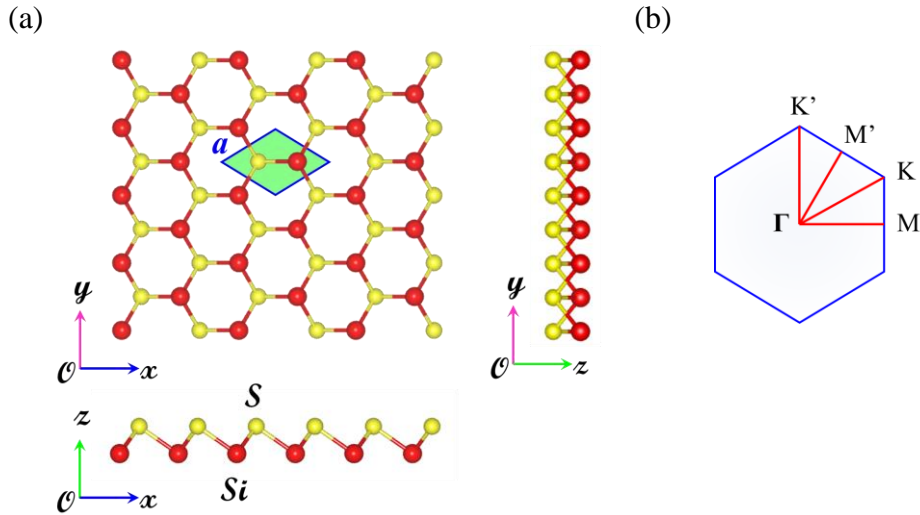
### 3.1. Tối ưu hoá cấu trúc và kiểm tra tính ổn định của vật liệu SiS đơn lớp

Bảng 1. Hằng số mạng tinh thể -  $a$  &  $b$  (Å), hằng số đàn hồi -  $C_{ij}$  (GPa), mô-đun đàn hồi -  $\mathcal{Y}$  (GPa) và hệ số Poisson-P.

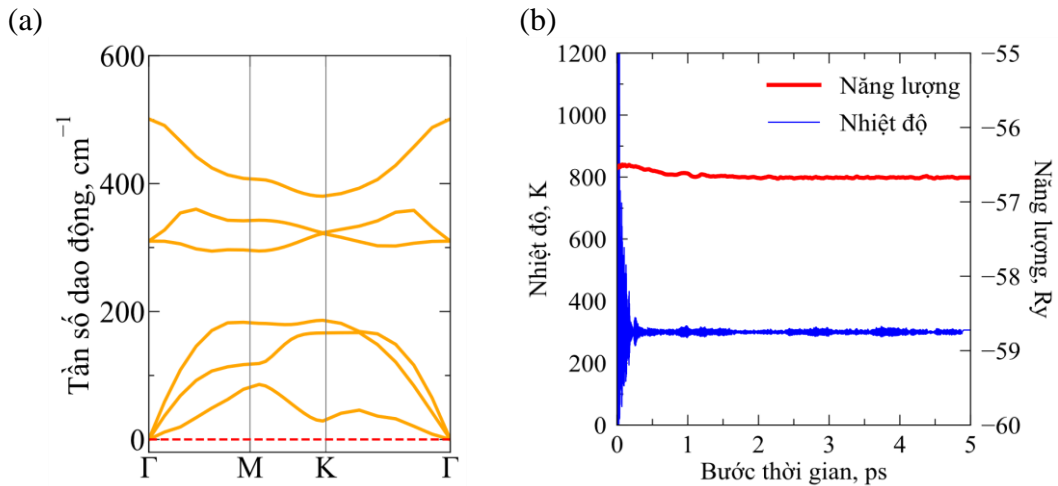
$a = b$	$C_{11} = C_{22}$	$C_{12}$	$C_{66}$	$\mathcal{Y}_{xx} = \mathcal{Y}_{yy}$	$\mathcal{P}_{xx} = \mathcal{P}_{yy}$
3,31	121,03	19,63	50,64	117,85	0,16

Cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp được tối ưu hóa ở nhiệt độ 0K thông qua phương pháp cân bằng năng lượng cực tiểu Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) [22-24], với điều kiện về ứng suất và lực nhỏ hơn giá trị cho phép. Kết quả thu được cho thấy cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp có dạng lục giác, mỗi ô cơ sở gồm một nguyên tử Silic (Si) và một nguyên tử lưu huỳnh (S) như Hình 1(a). Trong hệ tọa độ không gian ba chiều, hai nguyên tử Si và S nằm trên hai mặt phẳng khác nhau, do đó chiều dày của cấu trúc được xác định bằng khoảng cách tọa độ theo phương  $z$  giữa hai nguyên tử này trên Hình 1(a). Dựa trên tính toán về cấu trúc và tọa độ không gian của các nguyên tử, hằng số mạng tinh thể của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp là  $a = b = 3,31$  Å. Kết quả này phù hợp với các nghiên cứu trước đây [12, 13, 25].

Để chứng minh tính ổn định của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp, nghiên cứu này sử dụng đồng thời ba tiêu chuẩn để kiểm tra. Tiêu chuẩn đầu tiên được sử dụng là tiêu chuẩn về động lực học với sự dao động của phonon. Phổ dao động mạng phonon của cấu trúc được thể hiện như Hình 2(a). Kết quả thu được chỉ ra rằng, phổ dao động của vật liệu bao gồm sáu nhánh, trong đó có ba nhánh dao động âm thanh tần số thấp và ba nhánh dao động quang học ở tần số cao. Tần số dao động lớn nhất của vật liệu đạt  $500\text{cm}^{-1}$ . Ngoài ra, kết quả cũng cho thấy trong toàn miền Brillouin không tồn tại bất kì dao động âm. Những kết quả này là minh chứng sự tồn tại của cấu trúc vật liệu.



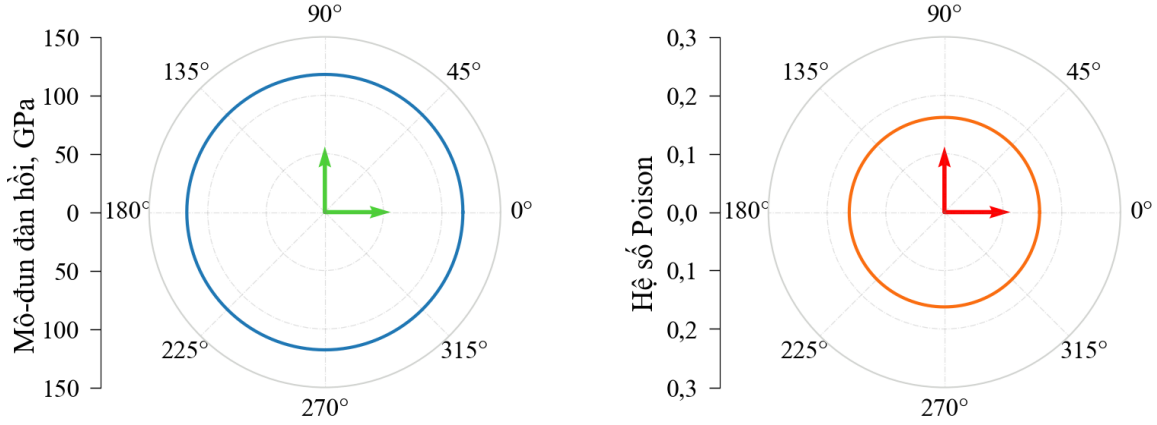
Hình 1. (a) Cấu trúc nguyên tử ở trạng thái cân bằng, (b) vùng Brillouin với các điểm đối xứng bậc cao của vật liệu SiS đơn lớp.



Hình 2. (a) Phổ dao động phonon của vật liệu SiS đơn lớp, (b) đồ thị cân bằng nhiệt độ và năng lượng của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp bằng thuật toán AIMD.

Tiêu chuẩn thứ hai là kiểm tra sự ổn định về mặt cơ học, được chứng minh qua lý thuyết Born [26]. Kết quả tính toán hằng số đàn hồi của vật liệu được trình bày trong Bảng 1, cho thấy cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp thỏa mãn tiêu chuẩn ổn định cơ học của lý thuyết Born với điều kiện  $C_{11} > |C_{12}| > 0$  và  $C_{66} > 0$ . Tiêu chuẩn thứ ba kiểm tra sự cân bằng về năng lượng và nhiệt độ khi gia nhiệt cho cấu trúc. Hình 2(b) thể hiện kết quả về cân bằng nhiệt độ và năng lượng của vật liệu SiS đơn lớp qua thuật toán *ab-initio* kết hợp động lực học phân tử (AIMD) [27]. Trong thời gian gia nhiệt khoảng 5 ps, cấu trúc có sự dao động hỗn độn ở những bước thời gian đầu tiên ( $< 0,5$  ps). Giai đoạn dao động hỗn độn này có thể được giải thích là quá trình cấu trúc tự điều chỉnh trạng thái để thích nghi với nhiệt độ mới. Đáng chú ý, sau giai đoạn dao động ban đầu, cấu trúc nhanh chóng đạt đến trạng thái ổn định với sự dao động nhiệt quanh mức nhiệt độ 300K. Qua đó cho thấy khả năng tự điều chỉnh trạng thái và ổn định theo nhiệt độ của vật liệu. Hơn nữa, sự ổn định về mặt năng lượng của hệ khi tăng thời gian gia nhiệt cho thấy cấu trúc không những chỉ ổn định về mặt nhiệt động học mà còn có khả năng duy trì tính toàn vẹn cấu trúc ở nhiệt độ 300K. Qua ba phương pháp kiểm tra trên, có thể kết

luận rằng cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp rất ổn định.



Hình 3. Đồ thị phân tán giá trị của mô-đun đàn hồi -  $\mathcal{Y}$  và hệ số Poisson -  $\mathcal{P}$  phụ thuộc vào góc  $\theta$  hợp bởi vector khảo sát và trục  $x$ .

$$\mathcal{Y}(\theta) = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}\Delta^4 + C_{22}\Pi^4 + \left(\frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} - 2C_{12}\right)\Delta^2\Pi^2} \quad (1)$$

$$\mathcal{P}(\theta) = -\frac{\left(C_{11} + C_{22} - \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}}\right)\Delta^2\Pi^2 - C_{12}(\Delta^4 + \Pi^4)}{C_{11}\Delta^4 + C_{22}\Pi^4 + \left(\frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} - 2C_{12}\right)\Delta^2\Pi^2} \quad (2)$$

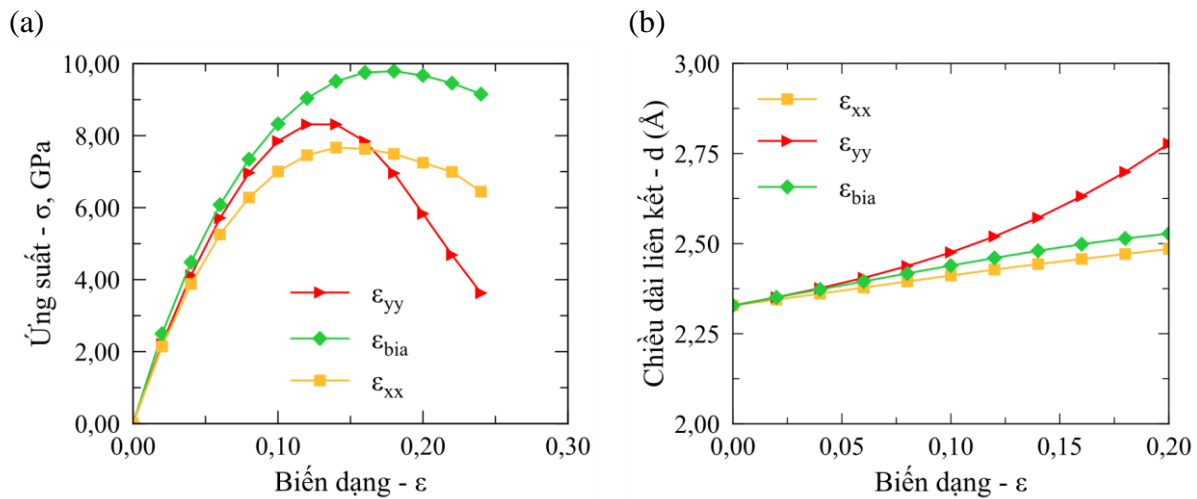
ở đây,  $\Delta = \sin(\theta)$  và  $\Pi = \cos(\theta)$  với  $\theta$  là góc hợp bởi vector được khảo sát và phương  $x$ .

Hình 3 trình bày đồ thị phân tán giá trị của mô-đun đàn hồi và hệ số Poisson tại trạng thái cân bằng của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp được tính toán theo phương trình (1) và (2) [7]. Kết quả thu được cho thấy rằng, cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp là một vật liệu đẳng hướng trong miền đàn hồi. Dưới biến dạng kéo theo một góc  $\theta$  bất kỳ, giá trị của mô-đun đàn hồi và hệ số Poisson luôn duy trì ổn định ở các giá trị  $\mathcal{Y} = 117,85$  GPa và  $\mathcal{P} = 0,16$  tương ứng. So sánh với một số cấu trúc vật liệu thấp chiều đã được nghiên cứu trước đây như SnS<sub>2</sub> [20], PbS<sub>2</sub> [3], mô-đun đàn hồi của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp nhỏ hơn thể hiện tính chất cơ học linh hoạt và biến dạng cơ học phá hủy tốt. Tóm lại, các đặc tính cơ học của vật liệu SiS đơn lớp cho thấy đây là một vật liệu đầy hứa hẹn cho nhiều ứng dụng công nghệ tiên tiến, đặc biệt trong lĩnh vực chế tạo các thiết bị điện tử linh hoạt và cảm biến.

### 3.2. Tính chất cơ học của vật liệu SiS đơn lớp

Hình 4 trình bày mối quan hệ giữa ứng suất và biến dạng kéo của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp, bao gồm: biến dạng kéo một trục dọc theo phương  $x$  ( $\varepsilon_{xx}$ ), biến dạng kéo một trục dọc theo phương  $y$  ( $\varepsilon_{yy}$ ) và biến dạng kéo đồng thời hai trục ( $\varepsilon_{bia}$ ). Trong nghiên cứu này, để phù hợp với thực tế, chúng tôi đã hiệu chỉnh ứng suất thu được với  $h/d_0$ . Với  $d_0$  là chiều dày hiệu dụng của vật liệu, được tính toán với hàm VDW-DF3 thông qua mô hình 3D tối ưu,  $h$  là kích thước của vùng chân không [28, 29]. Ở giai đoạn biến dạng nhỏ ( $\varepsilon < 0,04$ ), ứng xử cơ học có sự tương đồng ở cả ba loại biến dạng, thể hiện tính đẳng hướng cao trong miền đàn hồi tuyến

tính. Khi giá trị biến dạng gia tăng ( $\epsilon > 0,04$ ), sự dịch chuyển của các nguyên tử Si và S có sự khác biệt đáng kể, dẫn đến ứng xử cơ học tách biệt giữa các loại biến dạng. Nhìn chung, cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp có độ bền phá hủy tương đối lớn, với biến dạng phá hủy lớn nhất  $\epsilon_{bia} = 0,18$  và ứng suất tới hạn tương ứng  $\sigma_{bia} \sim 10$  GPa đạt được dưới tác dụng của biến dạng kéo đồng thời hai trục  $xy$  ( $\epsilon_{bia}$ ). Độ bền của các biến dạng dọc theo một trục ( $\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}$ ) và ứng suất tới hạn tương ứng ( $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}$ ) thấp hơn đáng kể so với biến dạng kéo đồng thời hai trục ( $\sigma_{bia}$ ), lần lượt khoảng  $1,28 \div 1,5$  và  $1,17 \div 1,27$  lần. So sánh với một số cấu trúc tương tự như  $PbS_2$ ,  $PbSe_2$  [3],  $SiTe_2$ ,  $SiSe_2$  [7] độ bền của biến dạng kéo đồng thời hai trục cũng luôn lớn hơn độ bền của biến dạng kéo một trục. Nguyên nhân chính là do dưới tác động của biến dạng kéo đồng thời hai trục cho phép nguyên tử di chuyển đều đặn và tăng diện tích bề mặt, giúp phân tán áp lực hiệu quả hơn. Ngược lại, biến dạng kéo một trục gây dịch chuyển nguyên tử xa hơn khỏi vị trí cân bằng mà không thay đổi đáng kể bề mặt vật liệu, dẫn đến tập trung ứng suất và làm cho cấu trúc của vật liệu phá hủy sớm hơn. Xu hướng này phù hợp với đặc tính chung của vật liệu 2D. Kết quả cho thấy khả năng chịu biến dạng tốt của vật liệu SiS đơn lớp và thích hợp trong các thiết bị yêu cầu tính bền. Đồng thời đây cũng là thông tin hữu ích cung cấp cơ sở cho việc thiết kế và tối ưu các thiết bị sử dụng vật liệu này. Hình 4(b) thể hiện chiều dài liên kết giữa hai nguyên tử Si và S trong cấu trúc vật liệu dưới tác động của các biến dạng cơ học. Kết quả thu được cho thấy, khi mức độ biến dạng lên cấu trúc tăng thì độ dài liên kết giữa hai nguyên tử cũng có xu hướng tăng theo. Trong đó, chiều dài của liên kết dưới biến dạng kéo một trục dọc theo trục  $y$  ( $\epsilon_{yy}$ ) có xu hướng biến đổi nhiều nhất. Ngược lại, sự biến đổi của chiều dài liên kết của hai biến dạng còn lại có xu hướng giống nhau.

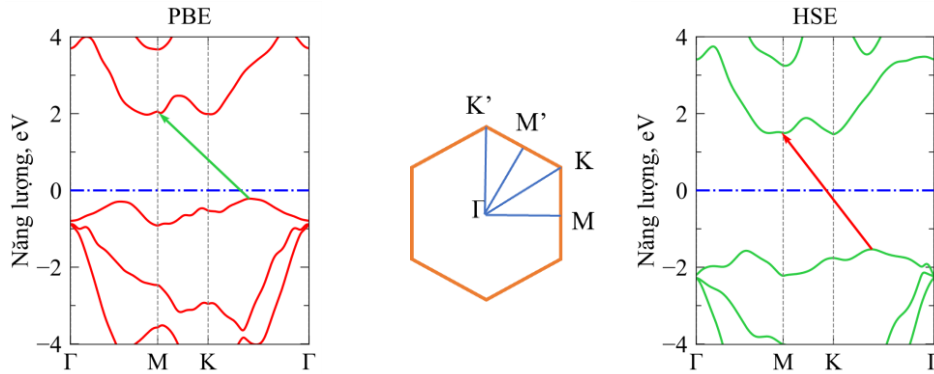


Hình 4. (a) Mối quan hệ giữa ứng suất và biến dạng cơ học, (b) chiều dài liên kết giữa hai nguyên tử của vật liệu SiS đơn lớp ở các trạng thái kéo dọc theo trục  $x$  ( $\epsilon_{xx}$ ), kéo dọc theo trục  $y$  ( $\epsilon_{yy}$ ) và kéo đồng thời hai trục  $xy$  ( $\epsilon_{bia}$ ).

### 3.3. Tính chất điện tử của vật liệu SiS đơn lớp

Hình 5 trình bày cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu SiS đơn lớp, được tính toán bằng hàm trao đổi tương quan PBE và HSE. Mặc dù sử dụng hàm PBE tiết kiệm thời gian tính toán hơn, tuy nhiên kết quả từ hàm HSE gần đúng với kết quả thực nghiệm hơn [16]. Trên đồ thị cấu trúc vùng năng lượng, trục nằm ngang thể hiện đường đi của véc-tơ sóng trong vùng không gian đảo, trục thẳng đứng thể hiện mức năng lượng của các dải năng lượng. Đáng chú ý, cả hai phương pháp đều cho kết quả với hình dạng tương đồng, cũng có độ tin cậy của các tính toán. Kết quả này đã chứng minh rằng vật liệu SiS đơn lớp là một vật liệu bán dẫn gián tiếp, với các điểm cực trị của vùng dẫn (CBM) và vùng hoá trị (VBM) nằm ở các vị trí khác

nhau trong không gian. Cụ thể, CBM nằm tại điểm  $M$ , trong khi VBM nằm trong vùng  $K-\Gamma$ . Sự phân bố không đồng bộ này của các điểm cực trị ngụ ý rằng tính chất điện tử của vật liệu rất nhạy với các tác động bên ngoài, mở ra khả năng điều khiển tính chất điện tử của vật liệu. Hơn nữa, vùng trống năng lượng của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp được tính toán là 2,18 eV (PBE) và 3,0 eV (HSE), tương đồng với nghiên cứu trước đó [12, 13]. Các kết quả tính toán tiết lộ rằng đây là một vật liệu có vùng trống năng lượng khá lớn, mang nhiều hứa hẹn cho khả năng ứng dụng các thiết bị cần sự hấp thụ photon ánh sáng lớn như các cảm biến quang học hoặc tế bào quang điện, hoặc các thiết bị lưu trữ điện tích hiệu quả như siêu tụ điện hoặc pin lithium-ion thế hệ mới.

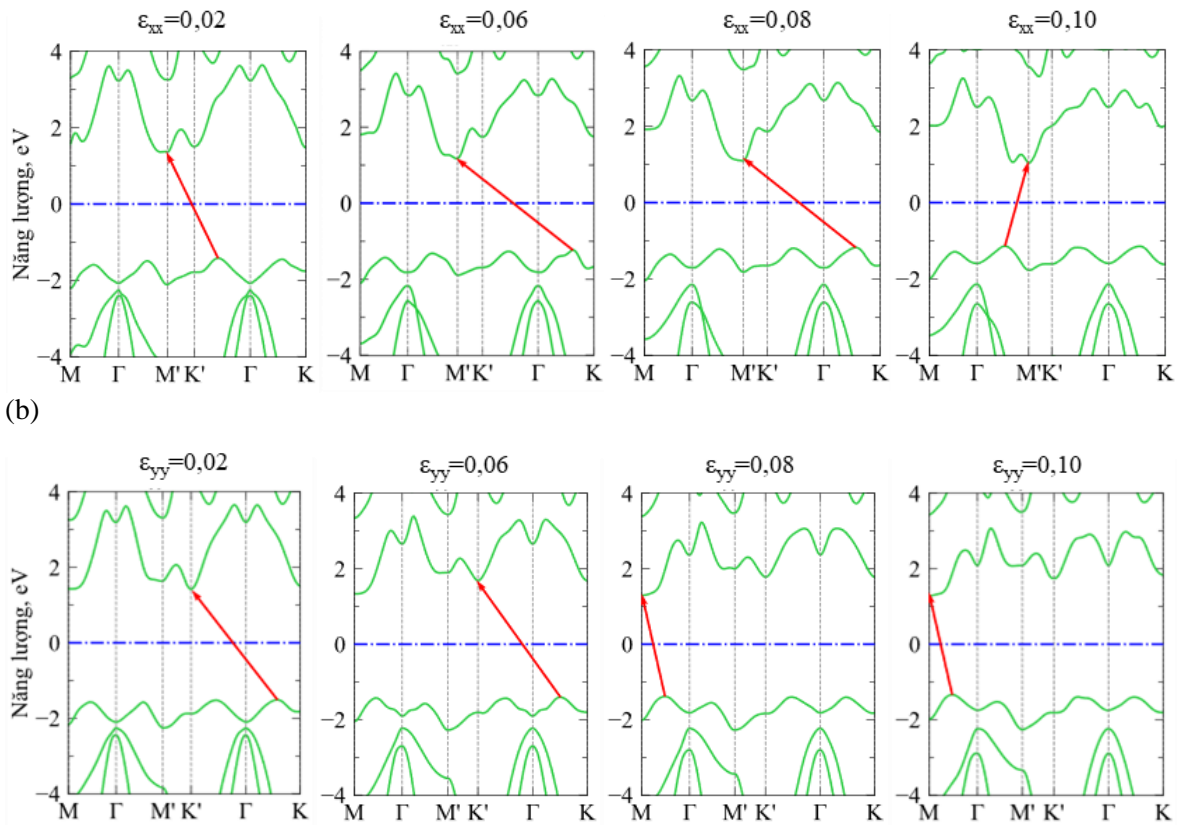


Hình 5. Cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu SiS đơn lớp được tính toán bằng hàm PBE và hàm HSE. Mức năng lượng Fermi được thiết lập ở giá trị 0eV.

Để đánh giá tiềm năng ứng dụng trong các lĩnh vực thực tế của vật liệu SiS đơn lớp, nghiên cứu này khảo sát cấu trúc vùng năng lượng dưới tác động của các biến dạng kéo. Đối với biến dạng kéo một trục, do sự phá vỡ tính đối xứng của cấu trúc tinh thể, vùng không gian đảo được lựa chọn lại theo thứ tự các điểm  $M-\Gamma-M'-K'-\Gamma-K$ . Hình 6 trình bày cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu SiS đơn lớp ở các trạng thái biến dạng kéo một trục khác nhau ( $\epsilon_{xx}$ ,  $\epsilon_{yy}$ ). Nhìn chung, biến dạng kéo một trục theo trục  $x$  ( $\epsilon_{xx}$ ) và trục  $y$  ( $\epsilon_{yy}$ ), có tác động đáng kể đến cấu trúc vùng năng lượng, với vị trí của các điểm CBM và VBM thay đổi liên tục. Đối với biến dạng kéo một trục dọc theo trục  $x$  ( $\epsilon_{xx}$ ), điểm CBM luôn giữ nguyên vị trí tại điểm  $M'$  Hình 6(a), trong khi các điểm VBM dịch chuyển sang vùng  $\Gamma-K$  ở biến dạng  $\epsilon_{xx} = 0,06$  và  $0,08$  và sang vùng  $\Gamma-M$  ở biến dạng  $\epsilon_{xx} = 0,10$ . Khác với biến dạng kéo một trục dọc theo trục  $x$  ( $\epsilon_{xx}$ ), biến dạng kéo một trục dọc theo trục  $y$  ( $\epsilon_{yy}$ ) không làm thay đổi vị trí các điểm VBM trong vùng  $\Gamma-K$  ở biến dạng  $\epsilon_{yy} = 0,02$  và  $0,06$ . Khi tăng dần biến dạng kéo một trục dọc theo trục  $y$  đến  $\epsilon_{yy} = 0,08$  và  $0,10$ , các điểm VBM lại dịch chuyển sang vùng  $M-\Gamma$  như Hình 6(b). Cuối cùng, Hình 7 thể hiện sự thay đổi của cấu trúc vùng năng lượng dưới tác động của biến dạng kéo đồng thời hai trục  $\epsilon_{bia}$ . Kết quả thu được cho thấy dưới tác động của biến dạng kéo đồng thời theo hai trục, cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu SiS đơn lớp chỉ có sự thay đổi về vùng trống năng lượng, còn vị trí các điểm cực trị không thay đổi. Như vậy, sự thay đổi về cấu trúc vùng năng lượng rất tích cực này, có ý nghĩa quan trọng, cho phép điều chỉnh vùng trống năng lượng, cải thiện khả năng hấp thụ ánh sáng trong các ứng dụng quang học. Những đặc điểm này không chỉ thể hiện tính chất điện tử linh hoạt của vật liệu SiS đơn lớp trong các ứng dụng điện tử nano và quang điện tử, mà còn gợi mở hướng nghiên cứu mới về khả năng điều chỉnh tính chất điện tử của vật liệu 2D.

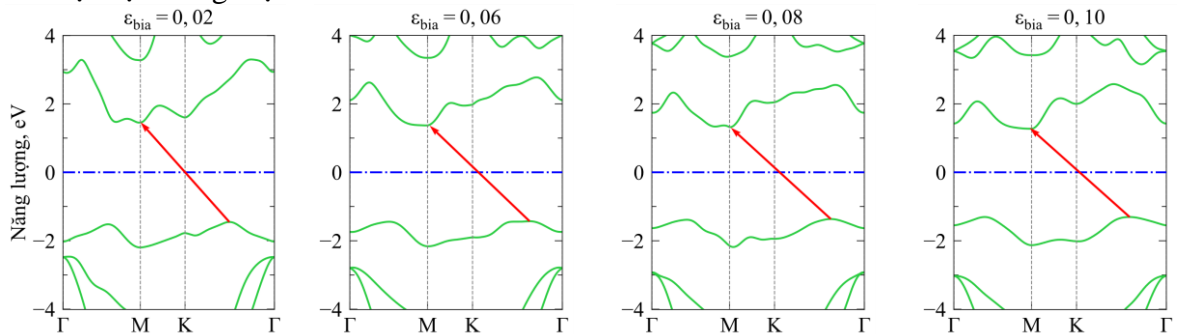
(a)



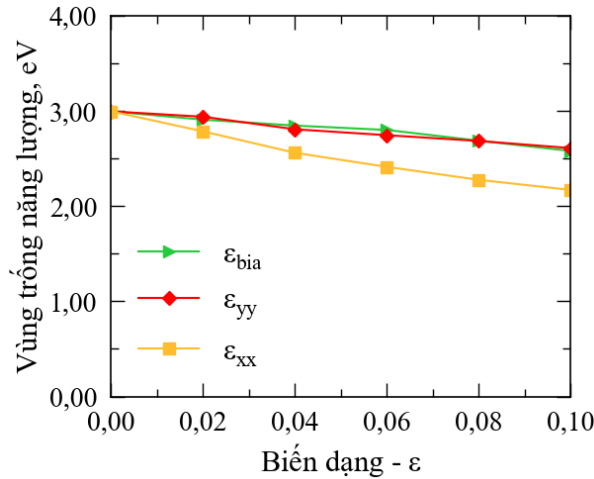


Hình 6. Cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu SiS đơn lớp ở một số trạng thái: (a) dưới tác dụng của biến dạng kéo một trục dọc theo trục  $x$ ; (b) dưới tác dụng của biến dạng kéo một trục dọc theo phương  $y$ . Các mức năng lượng Fermi được thiết lập ở  $0\text{eV}$  được thể hiện bằng màu xanh dương.

Hình 8 trình bày mối quan hệ giữa vùng trống năng lượng và các biến dạng cơ học của vật liệu SiS đơn lớp ở các trạng thái khác nhau. Sự thay đổi vùng trống năng lượng dưới tác dụng của biến dạng kéo xảy ra khá tương đồng, và gần như là một hàm tuyến tính. Trong ba biến dạng được nghiên cứu, biến dạng kéo một trục theo phương  $x$  ( $\epsilon_{xx}$ ) gây ra sự thay đổi lớn nhất, vùng trống năng lượng giảm 27,76% so với trạng thái cân bằng, trong khi biến dạng kéo một trục theo phương  $y$  ( $\epsilon_{yy}$ ) và biến dạng kéo đồng thời hai trục ( $\epsilon_{bia}$ ) chỉ làm vùng trống năng lượng giảm khoảng 13%. Như vậy, khả năng điều chỉnh vùng trống năng lượng thông qua biến dạng cơ học đã được làm sáng tỏ, gợi ý các định hướng ứng dụng tính chất điện tử của vật liệu trong thực tế.



Hình 7. Cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu SiS đơn lớp ở một số trạng thái dưới tác dụng của biến dạng kéo đồng thời hai trục. Các mức năng lượng Fermi được thiết lập ở  $0\text{eV}$  được thể hiện bằng màu xanh dương.



Hình 8. Mối quan hệ giữa vùng trống năng lượng và biến dạng kéo ở một số trạng thái.

### 3.4. Tính chất áp điện của vật liệu SiS đơn lớp

Hệ số áp điện tuyến tính của các cấu trúc vật liệu thấp chiều có thể được tính toán thông qua mối quan hệ giữa độ lệch phân cực  $P_i$  hoặc giá trị của điện trường và tensor ứng suất hoặc biến dạng. Các thông số này có thể được tính toán dựa theo công thức sau [30]:

$$e_{ijk} = \left( \frac{\partial P_i}{\partial \varepsilon_{jk}} \right)_{E,T} = - \left( \frac{\partial \sigma_{jk}}{\partial E_i} \right)_{E,T} \quad (3)$$

$$d_{ijk} = \left( \frac{\partial P_i}{\partial \sigma_{jk}} \right)_{E,T} = - \left( \frac{\partial \varepsilon_{jk}}{\partial E_i} \right)_{E,T} \quad (4)$$

trong đó,  $d$  là hệ số ứng suất áp điện và  $e$  là hệ số điện tích áp điện. Để xác định giá trị các hệ số áp điện, chúng tôi đã tính toán sự thay đổi độ lệch phân cực của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp dưới biến dạng dọc theo trục  $x$  ở mức biến dạng nhỏ (dưới 1%). Hệ số điện tích áp điện  $e_{11}$  được tính toán bằng cách phương pháp nội suy mối quan hệ giữa độ lệch phân cực và biến dạng. Hình 9 trình bày sự biến động của độ lệch phân cực dưới tác dụng của biến dạng kéo theo phương  $x$  ở các giá trị nhỏ, từ đó xác định hệ số  $e_{11}$ .

Chúng tôi sử dụng phương pháp giản lược Voight để thu gọn các giá trị không có ý nghĩa trong ma trận hằng số áp điện đối với các hệ số áp điện  $d$  và  $e$  như công thức sau [30]:

$$\begin{aligned} e_{111} &= e_{11} & ; d_{111} &= d_{11} \\ e_{122} &= e_{12} = -e_{11} & ; d_{122} &= d_{12} = -d_{11} \\ e_{212} &= e_{221} = \frac{1}{2} e_{26} = -e_{11} ; & d_{212} &= d_{221} = \frac{1}{2} d_{26} = -d_{11} \end{aligned} \quad (5)$$

Cấu trúc SiS có cấu tạo một lớp duy nhất, vì thế trong nghiên cứu này không xem xét đến sự thay đổi của độ lệch phân cực theo phương  $z$ . Do đó, tất cả các hệ số áp điện liên quan đến phương  $z$  được loại trừ. Sự phân bố của các nguyên tử trong không gian là lý do chính để độ lệch phân cực của vật liệu chỉ xuất hiện theo trục  $x$  [31-33]. Vì thế, hệ số áp điện của cấu trúc

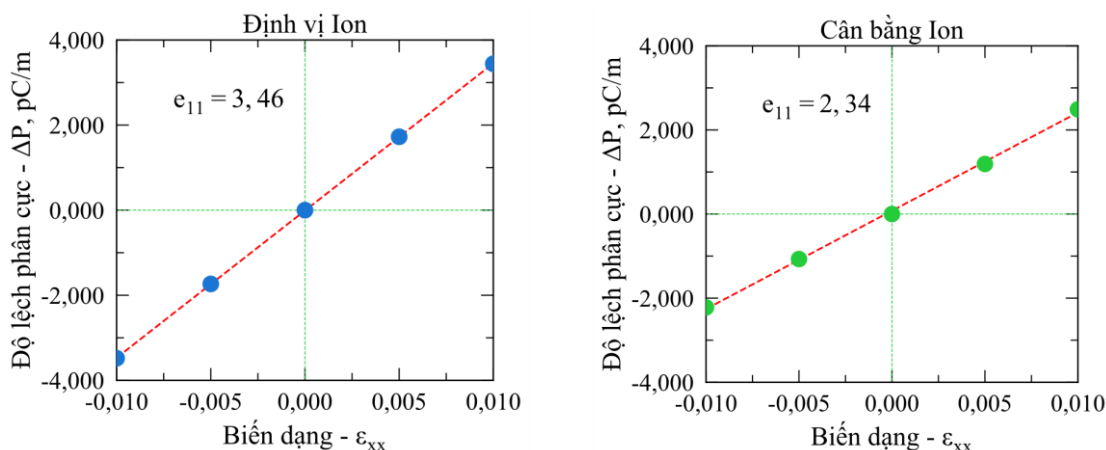
vật liệu SiS đơn lớp chỉ gồm thành phần  $e_{11}$  và được tính toán dựa theo quan hệ giữa biến dạng dọc theo trục  $x$  và độ lệch phân cực  $P_1$ . Hệ số ứng suất áp điện  $d$  có thể được xác định thông qua mối quan hệ giữa  $e_{11}$  và các hằng số đàn hồi của vật liệu, theo công thức (6):

$$d_{11} = \frac{e_{11}}{C_{11} - C_{12}} \quad (6)$$

Bảng 2. Hệ số điện tích áp điện  $e_{11}$  và hệ số ứng suất áp điện  $d_{11}$  của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp ở hai trạng thái: định vị ion và cân bằng ion.

Trạng thái định vị ion		Trạng thái cân bằng ion	
$e_{11} (\times 10^{-10} \text{ C/m})$	$d_{11} (\text{pm/V})$	$e_{11} (\times 10^{-10} \text{ C/m})$	$d_{11} (\text{pm/V})$
3,46	7,47	2,34	5,64

Trong nghiên cứu này, chúng tôi khảo sát tính chất áp điện của cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp ở hai trạng thái: trạng thái định vị ion và trạng thái cân bằng ion. Trạng thái định vị ion ('clamp-ion') cho biết tình trạng của các nguyên tử trong mạng tinh thể đang bị giữ cố định, không thể di chuyển dù có tác động của biến dạng. Trạng thái này thường được sử dụng để nghiên cứu những ảnh hưởng trực tiếp của lực cơ học lên mạng tinh thể mà không có sự ảnh hưởng từ dao động hay dịch chuyển nguyên tử, nhằm đơn giản hóa quá trình tính toán. Ngược lại, trạng thái cân bằng ion ('relax-ion') mô tả trường hợp các nguyên tử trong mạng tinh thể có khả năng dao động tự do và tự sắp xếp lại vị trí khi chịu tác động của biến dạng cơ học. Trong trường hợp này, mạng tinh thể có khả năng phản ứng một cách linh hoạt, cho phép các nguyên tử tái sắp xếp vị trí nhằm đạt được trạng thái năng lượng thấp nhất. Điều này mô phỏng chân thực hơn cách mà vật liệu phản ứng trong thực tế, bởi sự dao động tự do của các ion phản ánh khả năng vật liệu điều chỉnh để tối ưu hóa sự ổn định và cơ tính khi chịu tác động từ ngoại lực [32]. Bảng 2 trình bày kết quả thu được của hệ số  $e_{11}$  và  $d_{11}$  ở hai trạng thái cân bằng ion và định vị ion. Từ kết quả thu được cho thấy, vật liệu SiS đơn lớp có hai hệ số  $e_{11}$  và  $d_{11}$  lớn hơn so với một số vật liệu phổ biến như: thạch anh ( $d_{11} = 2,3 \text{ pm/V}$ ) [34]; WS<sub>2</sub> ( $e_{11} = 2,20 \div 2,47 \times 10^{-10} \text{ C/m}$ ,  $d_{11} = 1,93 \div 2,19 \text{ pm/V}$ ); WTe<sub>2</sub> ( $e_{11} = 1,60 \div 3,40 \times 10^{-10} \text{ C/m}$ ) [31]. Những kết quả này chứng minh rằng vật liệu SiS đơn lớp thể hiện hiệu ứng áp điện mạnh mẽ, vượt trội hơn so với một số vật liệu truyền thống. Điều này có ý nghĩa quan trọng trong việc phát triển các ứng dụng công nghệ tiên tiến, các thiết bị cảm biến điều khiển ở cấp độ nano.



Hình 9. Sự biến động của độ lệch phân cực  $P$  và biến dạng kéo dọc theo trục  $x$  thu được ở hai trạng thái. (a) trạng thái định vị ion; (b) trạng thái cân bằng ion. Hệ số ứng suất áp điện  $e_{11}$  thu được bằng phương pháp làm khớp độ dốc của các điểm phân tán.

#### 4. KẾT LUẬN

Dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ, chúng tôi đã khám phá ra những tính chất cơ học, điện tử và áp điện của vật liệu SiS đơn lớp. Kết quả cho thấy, SiS là một ứng cử viên đầy triển vọng cho các ứng dụng trong lĩnh vực điện tử và áp điện. Với các hằng số đàn hồi nhỏ và diện tích bề mặt hoạt động lớn, cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp thể hiện khả năng chịu biến dạng vượt trội. Đặc biệt, tính chất điện tử của vật liệu SiS đơn lớp có thể thay đổi linh hoạt dưới tác động của biến dạng, tạo nên những lợi thế quan trọng cho việc sử dụng trong các thiết bị điện tử nano. Hơn nữa, chúng tôi đã xác định được hệ số ứng suất áp điện và hệ số điện tích áp điện của vật liệu này. Nhờ tính phân cực nguyên tử nổi bật, cấu trúc vật liệu SiS đơn lớp có các hằng số áp điện ưu việt so với nhiều cấu trúc thông thường. Những kết quả này mở ra triển vọng ứng dụng rộng rãi của vật liệu SiS đơn lớp trong thực tế.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, et al., Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science*, 306 (2004) 666-669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- [2]. M. L. Hu, Zhizhou Yu, J. L. Yin, C. X. Zhang, L. Z. Sun, A DFT-LDA study of electronic and optical properties of hexagonal boron nitride under uniaxial strain, *Computational Materials Science*, 54 (2012) 165-169. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.10.041>
- [3]. Nguyen Hoang Linh, Nguyen Minh Son, Tran The Quang, Nguyen Van Hoi, Vuong Van Thanh, Do Van Truong, First-principles investigation on the electromechanical properties of monolayer 1H Pb-Dichalcogenides, *Materials Research Society of Korea*, 33 (2023) 189-194. <https://doi.org/10.3740/MRSK.2023.33.5.189>
- [4]. Z. Zhen, G. Jie, L. Dan, T. David, Designing Isoelectronic Counterparts to Layered Group V Semiconductors, *ACS Nano*, 9 (2015) 8284-8290. <https://doi.org/10.1021/acsnano.5b02742>
- [5]. Y. Ugur, De. Ilker, D. Çakir, G. Oguz, S. Cem, A systematical ab-initio review of promising 2D MXene monolayers towards Li-ion battery applications, *JPhys Energy*, 2 (2020) 1-15. <https://doi.org/10.1088/2515-7655/ab9fe3>
- [6]. Hanh Thi Thu Tran, Phi Minh Nguyen, Hoa Van Nguyen, Vi Toan Lam, Tranh Thi Nhu Duong, Tet Vui Chong, Ab Initio Investigation of the Hydrogen Interaction on Two Dimensional Silicon Carbide, *ACS Omega*, 7 (2022) 47642-47649. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c04532>

- [7]. Nguyen Hoang Linh, Tran The Quang, Nguyen Minh Son, Vuong Van Thanh, Do Van Truong, Prediction of mechanical, electronic and optical properties of monolayer 1T Si-dichalcogenides via first-principles theory, *Materials Today Communications*, 36 (2023) 1-16. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106553>
- [8]. Nguyen Hoang Linh, Tran The Quang, Nguyen Minh Son, To Toan Thang, Vuong Van Thanh, Do Van Truong, Theoretical computational of electronic and transport properties and optical conductivity of monolayer NiS<sub>2</sub> under mechanical strain, *Journal of science and technology technical universities*, 33 (2023) 34-41. <https://doi.org/10.51316/jst.164.etsd.2023.33.1.5>
- [9]. Viet Anh Cao, Minje Kim, Weiguang Hu, Sol Lee, Sukhyeong Youn, Jiwon Chang, et al., Enhanced Piezoelectric Output Performance of the SnS<sub>2</sub>/SnS Heterostructure Thin-Film Piezoelectric Nanogenerator Realized by Atomic Layer Deposition, *ACS Nano*, 15 (2021) 10428-10436. <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c02757>
- [10]. Z. Luwei, W. Ning, L. Yuliang, Design, synthesis, and application of some two-dimensional materials, *Chemical Science*, 14 (2023) 5266-5290. <https://doi.org/10.1039/d3sc00487b>
- [11]. K. Karim, T. A. Khan, A. Muhammad, W. Renheng, Z. Yupeng, M. Asif, et al., Recent developments in emerging two-dimensional materials and their applications, *Journal of Materials Chemistry C*, 8 (2020) 387-440. <https://doi.org/10.1039/c9tc04187g>
- [12]. Q. Alam, S. Muhammad, M. Idrees, N. V. Hieu, N. T. T. Binh, C. Nguyen, et al., First-principles study of the electronic structures and optical and photocatalytic performances of van der Waals heterostructures of SiS, P and SiC monolayers, *RSC Advances*, 11 (2021) 14263-14268. <https://doi.org/10.1039/d0ra10808a>
- [13]. W. J. Zhao, L. Ma, L. Cai. Ma, X. H. Tian, J. M. Zhang, First-principles study on the photocatalytic property of SiS/BSe and SiS<sub>2</sub>/BSe van der Waals heterojunctions, *The European Physical Journal B*, 96 (2023) 92-102. <https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-023-00569-0>
- [14]. S. Behzad, R. Chegel, First-principles study of the band structure and optical spectra of germanium carbide under mechanical strain, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 242 (2020) 1-19. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2020.146969>
- [15]. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *J Phys Condens Matter*, 21 (2009) 1-19. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- [16]. J. Heyd, G. E. Scuseria, Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential, *Journal of Chemical Physics*, 118 (2003) 8207-8215. <https://doi.org/10.1063/1.1564060>
- [17]. Nguyen Hoang Linh, Nguyen Minh Son, Tran The Quang, To Toan Thang, Vuong Van Thanh, Dinh The Hung, et al., Physico-mechanical Properties and Carrier Mobility of HfS<sub>2</sub> Monolayer, in: Kacprzyk J., *Lecture Notes in Networks and Systems*, 944, Springer Nature Switzerland AG, Switzerland 2024, 20-26.
- [18]. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Physical Review Letters*, 77 (1996) 3865-3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- [19]. H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B*, 13 (1976) 5188-5192. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- [20]. Nguyen Hoang Linh, Tran The Quang, Nguyen Minh Son, Nguyen Van Hoi, Vuong Van Thanh, Do Van Truong, First-principles study of electronic and optical properties and photocatalytic performance of MS monolayer under strain, *Journal of science and technology technical universities*, 33 (2023) 44-51. <https://doi.org/10.51316/jst.165.etsd.2023.33.2.7>
- [21]. A. A. Mostofi, J. R. Yates, G. Pizzi, Y. S. Lee, I. Souza, D. Vanderbilt, et al., An updated version of wannier 90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions, *Computer Physics Communications*, 185 (2014) 2309-2310. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2014.05.003>
- [22]. C. G. Broyden, The convergence of a class of double-rank minimization algorithms 1. General considerations, *Institute of Maths Applies*, 6 (1970) 76-90. <https://doi.org/10.1093/imat/6.1.76>
- [23]. R. Fletcher, A new approach to variable metric algorithms, *The Computer Journal*, 13 (1970) 317-322. <https://doi.org/10.1093/comjnl/13.3.317>

- [24]. D. F. Shanno, Conditioning of Quasi-Newton Methods for Function Minimization, *Mathematics of Computation*, 24 (1970) 647-656. <https://doi.org/10.2307/2004840>
- [25]. S. S. Ullah, H. U. Din, Sheraz Ahmad, Q. Alam, S. Sardar, B. Amin, et al., Theoretical prediction of the electronic structure, optical properties and photocatalytic performance of type-I SiS/GeC and type-II SiS/ZnO heterostructures, *RSC Advances*, 13 (2023) 7436-7442. <https://doi.org/10.1039/d3ra01061a>
- [26]. F. Mouhat, F. X. Coudert, Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems, *Physical Review B - Condensed American Physical Society*, 90 (2014) 224104-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.224104>
- [27]. D. Marx, J. Hutter, Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation, in: J. Groendorst., I. John von Neumann Institute for Computing, Jülich, 2000, 301-449.
- [28]. Fang Liu, Pingbing Ming, Ju Li, Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension, *Physical Review B*, 76 (2007) 064120-7. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.064120>
- [29]. Tianshu Li, Ideal strength and phonon instability in single-layer MoS<sub>2</sub>, *Physical Review B*, 85 (2012) 235407-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.235407>
- [30]. J. F. Nye, *Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices*, New York, USA, Oxford University Press, 1985.
- [31]. K. A.N. Duerloo, M. T. Ong, E. J. Reed, Intrinsic piezoelectricity in two-dimensional materials, *Journal of Physical Chemistry Letters*, 3 (2012) 2871-2876. <https://doi.org/10.1021/jz3012436>
- [32]. R. Fei, W. Li, J. Li, L. Yang, Giant piezoelectricity of monolayer group IV monochalcogenides: SnSe, SnS, GeSe, and GeS, *Applied Physics Letters*, 107 (2015) 173104-5. <https://doi.org/10.1063/1.4934750>
- [33]. T. Hu, J. Dong, Two new phases of monolayer group-IV monochalcogenides and their piezoelectric properties, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18 (2016) 32514-32520. <https://doi.org/10.1039/c6cp06734d>
- [34]. R. Bechmann, Elastic and piezoelectric constants of alpha-quartz, *Physical review journals archive*, 110 (1958) 1060-1061. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.110.1060>