

XÁC ĐỊNH CƠ TÍNH CỦA CÁC MÀNG MỎNG VẬT LIỆU HAI CHIỀU P-CS, P-GEO, P-SNS VÀ P-SNSE

DETERMINATION OF MECHANICAL PROPERTIES OF P-CS, P-GEO, P-SNS VÀ
P-SNSE TWO-DIMENSIONAL MATERIAL THIN FILMS

TS. Nguyễn Hữu Tú

Bộ môn Kỹ thuật cơ sở, Khoa Khoa học Cơ bản, Học viện Hậu cần

TÓM TẮT

Trong bài báo này, thí nghiệm kéo màng mỏng được mô phỏng bằng phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử với việc sử dụng hàm thế Stillinger-Webber đối với bốn vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp gồm: p-SnS, p-SnSe, p-GeO và p-CS. Qua đó, xác định được một số thông số cơ học như hệ số Poisson, ứng suất hai chiều kéo đứt, mô đun đàn hồi hai chiều, biến dạng khi kéo đứt. Kết quả mô phỏng thí nghiệm xác định được: Mô đun đàn hồi hai chiều của các vật liệu trên khi kéo theo phương zigzag trong khoảng $24.28 \div 75.6$ N/m, phương armchair trong khoảng $9.13 \div 15.7$ N/m; Ứng suất hai chiều lớn nhất trong khoảng $1.68 \div 7.75$ N/m, hệ số Poisson trong khoảng $-0.26 \div 0.56$, biến dạng nhỏ nhất và lớn nhất khi kéo đứt tương ứng là: $14 \div 30,6\%$. Kết quả khi kéo cho thấy các vật liệu này có tính dị hướng. Những kết quả tính toán được có thể làm cơ sở để tính toán một số thông số cơ học khác của chúng như tần số dao động riêng, chỉ tiêu phá hủy vật liệu và dùng để tham khảo cũng như ứng dụng trong thực tế.

Từ khóa: Stillinger-Weber; Phần tử hữu hạn; Vật liệu hai chiều; Pucked; Thí nghiệm kéo.

ABSTRACT

In this paper, the membranes tensile test is simulated by the atomic finite element method with using the Stillinger-Webber potential function of 4 two-dimensional materials with pucked structure including: p-CS, p-GeO, p-SnS and p-SnSe. The results determined mechanical parameters such as Poisson's ratio, two-dimensional tensile stress, two-dimensional elastic modulus, and tensile strain. The results show that: the two-dimensional elastic modulus of these materials when tensile in the zigzag direction appear in the range of $24.28 \div 75.6$ N/m, in the armchair direction appear in the range of $9.13 \div 15.7$ N/m; The largest two-dimensional stress appear in the range of $1.68 \div 7.75$ N/m, the Poisson's ratio is in the range of $-0.26 \div 0.56$, the smallest and largest deformation when tensile are: $14 \div 30.6\%$, respectively. Tensile results show that these materials are anisotropic. The calculated results can be used as a basis to calculate some of their other parameters such as natural oscillation frequency and material crack index. Results are useful for the design and application of these materials.

Keywords: Stillinger-Weber; Finite element method; 2D material; Pucked; Tensile test.

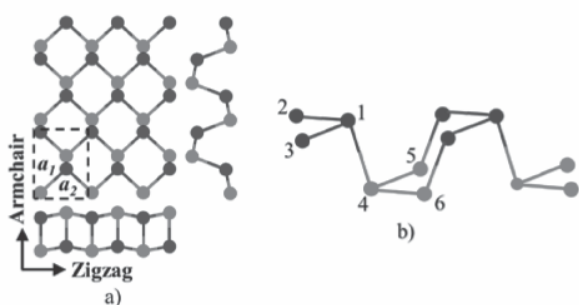
1. VẬT LIỆU HAI CHIỀU

Công nghệ về vật liệu nano đã được nghiên cứu và ứng dụng thành công ở nhiều lĩnh vực trong thời gian gần đây và có nhiều công trình khoa học đã được công bố, trong đó phải kể đến giải Nobel vật lý năm 2010, được trao cho hai nhà khoa học Geim và Novoselov tổng hợp thành công graphene [1, 2]. Các màng vật liệu nano như graphene [1,2], AlN, SiC [3], silicene [4], p-CS, p-GeO, p-SnS, p-SnSe... là những vật liệu hai chiều (2D material) cấu tạo do một lớp nguyên tử tạo thành. Trong đó, graphene có kết cấu dạng mạng lục giác phẳng các nguyên tử nằm ở 6 đỉnh của hình lục giác

phẳng; silicene [4] có cấu tạo là mạng lục giác low-buck và các vật liệu: p-CS, p-GeO, p-SnS, p-SnSe có cấu tạo mạng lục giác pucked như hình 1 [5]. Mạng lục giác pucked của các vật liệu p-CS, p-GeO, p-SnS và p-SnSe được tạo thành bởi 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 (Hình 1). Bốn mặt phẳng lần lượt chứa các nguyên tử số 1, 2; số 3; số 4 và số 5, 6 của một ô cơ bản (hình chữ nhật vẽ bằng nét đứt) trên Hình 1, kích thước ô cơ bản cho trong bảng 1 với a_1 là chiều dày theo phương z của màng, d_{12} và d_{14} là chiều dài liên kết.

Bảng 1. Thông số hình học của 4 vật liệu p-CS, p-GeO, p-SnS và p-SnSe [5]:

STT	Vật liệu	a_1 , Å	a_2 , Å	a_3 , Å	d_{12} , Å	d_{14} , Å
1	p-CS	4.323	2.795	10.0	1.757	1.849
2	p-GeO	4.801	3.055	10.0	1.956	1.986
3	p-SnS	4.347	4.047	10.0	2.728	2.595
4	p-SnSe	4.453	4.260	10.0	2.887	2.730



Hình 1. Cấu trúc pucked của 4 vật liệu p-CS, p-GeO, p-SnS và p-SnSe: a) Hình chiếu thẳng góc; b) Hình chiếu trực đo.

Các nghiên cứu chỉ ra rằng, vật liệu hai chiều có nhiều tính chất đặc biệt như khả năng dẫn nhiệt, dẫn điện tốt và có độ cứng rất cao, ví dụ: Graphene cứng tương đương kim cương

và gấp khoảng 200 lần so với thép. Với những tính chất cơ, lý, hóa vượt trội nên vật liệu hai chiều được ứng dụng cho nhiều lĩnh vực, như: Thiết bị năng lượng, thiết bị điện tử, y học [6] và nhiều lĩnh vực khác. Trong nghiên cứu về vật liệu hai chiều, thí nghiệm để các định cơ tính đối với vật liệu 2D phức tạp và tốn kém nên các vật liệu loại này thường được tiến hành mô phỏng thí nghiệm sử dụng các phương pháp như: Lý thuyết mật độ phiếm hàm, phần tử hữu hạn nguyên tử, động lực học phân tử. Trong đó, phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử cho kết quả đáng tin cậy [7], trong nghiên cứu này, hàm thế Stillinger-Weber [8] được sử dụng cho 4 vật liệu: p-CS, p-GeO, p-SnS và p-SnSe để tính thế năng tương tác nguyên tử trong quá trình mô phỏng kéo màng nguyên tử của chúng.

2. PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG THÍ NGHIỆM KÉO MÀNG

2.1. Hàm thế

Khi sử dụng hàm thế Stillinger-Weber [8], thế năng tương tác nguyên tử được xác định như sau:

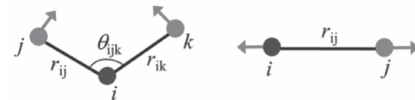
$$E = E_r + E_\theta; E_r = \sum_{i=1}^m V_2; E_\theta = \sum_{i=1}^n V_3;$$

$$V_2 = Ae^{\left[\rho_{ij}/(r_{ij}-r_{\max ij})\right]} \left(B/r_{ij}^4 - 1\right);$$

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

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 liên kề; V_3 (eV): Năng lượng liên kết của 3 nguyên tử liên 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): 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 2b). Các thông số này được tổng hợp trong Bảng 2 và Bảng 3.



Hình 2. Các thông số vật liệu tương ứng khi sử dụng hàm thế Stillinger-Weber: a) Thông số của mô hình liên kết thẳng; b) Thông số của mô hình liên kết góc.

Bảng 2. Thông số hàm thế Stillinger-Weber cho liên kết thẳng của p-CS, p-GeO, p-SnS và p-SnSe với công thức tính thế năng tương tác $V_2 = Ae^{\left[\rho_{ij}/(r_{ij}-r_{\max ij})\right]} \left(B/r_{ij}^4 - 1\right)$ [5]:

STT	Vật liệu	Kích thước	A, eV	ρ , Å	B, Å ⁴	$r_{\min}$, Å	$r_{\max}$, Å
1	p-CS	r_{12}	8.898	1.894	4.765	0.0	2.669
		r_{14}	5.791	1.220	5.844	0.0	2.600
2	p-GeO	r_{12}	21.562	2.889	7.319	0.0	3.144
		r_{14}	9.258	1.384	7.778	0.0	2.815
3	p-SnS	r_{12}	0.782	0.106	27.692	0.0	2.997
		r_{14}	5.636	1.887	22.674	0.0	3.702
4	p-SnSe	r_{12}	0.565	0.056	34.734	0.0	3.088
		r_{14}	5.811	1.989	27.773	0.0	3.895

Bảng 3. Thông số hàm thế Stillinger-Weber cho liên kết góc của p-CS, p-GeO, p-SnS và p-SnSe với công thức tính thế năng tương tác $V_3 = Ke^{\left[\rho_1/(r_{12}-r_{\max 12})+\rho_1/(r_{13}-r_{\max 13})\right]}(\cos(\theta)-\cos(\theta_0))^2$ [5]. Thứ tự các nguyên tử như trên Hình 1b:

STT	Vật liệu	Góc	K, eV	θ , 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
1	p-CS	θ_{123}	134.527	105.384	1.894	1.894	0	2.669	0	2.669	0	3.559
		θ_{134}	79.992	118.100	1.220	1.894	0	2.600	0	2.669	0	4.046
		θ_{415}	66.283	104.288	1.220	1.894	0	2.600	0	2.669	0	3.921
2	p-GeO	θ_{123}	314.008	95.989	2.720	2.720	0	2.962	0	2.962	0	3.720
		θ_{134}	85.406	96.000	1.133	2.720	0	2.585	0	2.962	0	3.875
		θ_{415}	152.982	132.005	1.133	2.720	0	2.585	0	2.962	0	4.194
3	p-SnS	θ_{123}	1.968	95.762	0.106	0.106	0	2.997	0	2.997	0	4.197
		θ_{134}	23.839	89.000	1.887	0.106	0	3.702	0	2.997	0	4.366
		θ_{415}	24.888	101.887	1.887	0.106	0	3.702	0	2.997	0	4.566
4	p-SnSe	θ_{123}	2.777	95.087	0.056	0.056	0	3.088	0	3.088	0	4.357
		θ_{134}	27.996	92.500	1.989	0.056	0	3.895	0	3.088	0	4.530
		θ_{415}	28.193	95.411	1.989	0.056	0	3.895	0	3.088	0	4.576

2.2. Phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử

Gọi X_i và u_i là tọa độ ban đầu và chuyển vị của nguyên tử thứ i . Sau khi có biến dạng, tọa độ của nguyên tử là $x_i = X_i + u_i$. Khi đó, thế năng tương tác nguyên tử của toàn bộ màng là $E = E(x_1, x_2, \dots, x_N)$ với N là tổng số nguyên tử có trong màng. Biểu thức trên là một hàm của tọa độ nguyên tử, bao gồm cả chuyển vị của chúng. Thế năng của ngoại lực tác dụng,

thế năng toàn phần của hệ là: $E_{\text{ext}} = \sum_{i=1}^N f_i u_i$,

$\Pi = E - E_{\text{ext}}$, trong đó: f_i là ngoại lực tác dụng lên nguyên tử thứ i , u_i là chuyển vị của nguyên tử thứ i tương ứng.

Áp dụng nguyên lý cực tiểu thế năng

ta có: $\frac{\partial \Pi}{\partial u_i} = 0$; $i = 1 \div N$. Giải hệ phương trình

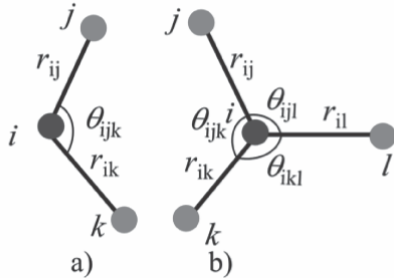
này bằng phương pháp lặp Newton–Raphson sẽ xác định được chuyển vị của nguyên tử. Cách sử dụng phương pháp lặp Newton–Raphson được thể hiện rõ trong [7], khi đó, phương trình có dạng: $K^{(k)} \cdot u^{(k)} = F^{(k)}$

với: $K_{ij}^k = \frac{\partial^2 \Pi^{(k)}}{\partial u_i \partial u_j}$; $F_i^{(k)} = -\frac{\partial \Pi^{(k)}}{\partial u_i} = f_i - \frac{\partial E^{(k)}}{\partial u_i}$;

với $K^{(k)}$ là ma trận độ cứng tổng thể, $u^{(k)}$ là véc tơ chuyển vị nút và $F^{(k)}$ là véc tơ lực nút, mỗi nguyên tử là một nút, chuyển vị của nguyên tử là chuyển vị của nút. Phần tử 3 nút (Hình 3a) ở trên biên và phần tử 4 nút (Hình 3b) ở phía bên trong màng (Hình 1). Kích thước các ma

trận độ cứng phần tử tương ứng là: $[K_{val}]_{9 \times 9}^{(e)}$ 

và $[K_{Imp}]_{12 \times 12}^{(e)}$ với phần tử 3 và 4 nút tương ứng. Ma trận độ cứng tổng thể $[K]_{3N \times 3N}^{(k)}$ là ma trận hợp khối của các ma trận phần tử trên toàn màng. 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; b) Phần tử 4 nút.

3. KẾT QUẢ XÁC ĐỊNH CƠ TÍNH CỦA 4 VẬT LIỆU P-CS, P-GEO, P-SNS VÀ P-SNSE

3.1. Mô hình thí nghiệm kéo màng

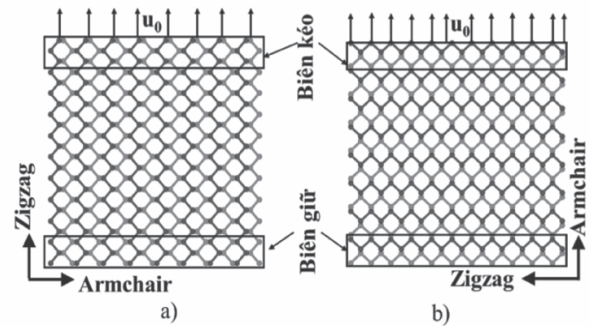
Mô phỏng kéo màng nguyên các vật liệu trên với điều kiện biên về chuyển vị như trên hình 4: Các nguyên tử trên biên kéo có chuyển vị bằng $u(0)$; các nguyên tử trên biên giữ có chuyển vị bằng không. Thay giá trị từ điều kiện biên để xác định chuyển vị, lực nút của toàn bộ nguyên tử trên màng ở từng bước kéo. Vị trí nguyên tử trong các bước tiếp theo

được xác định như sau: $\mathbf{x}_{(k+1)} = \mathbf{x}_{(k)} + \mathbf{u}_{(k)}$, quá

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

Tiến hành mô phỏng kéo màng coi gần đúng là hình vuông với kích thước các cạnh xấp xỉ bằng nhau. Trong 4 màng, màng p-GeO

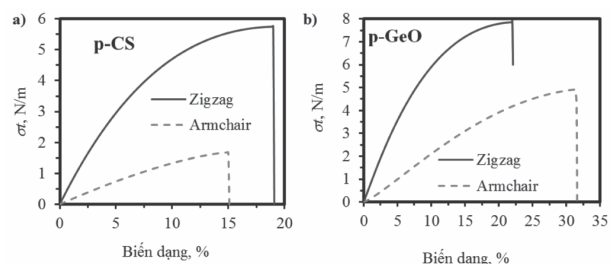
có số nguyên tử ít nhất là 4730, màng p-SnS có nguyên tử nhiều nhất 6552; số nguyên tử ở các màng khác nhau là do thông số mạng của từng loại [5].



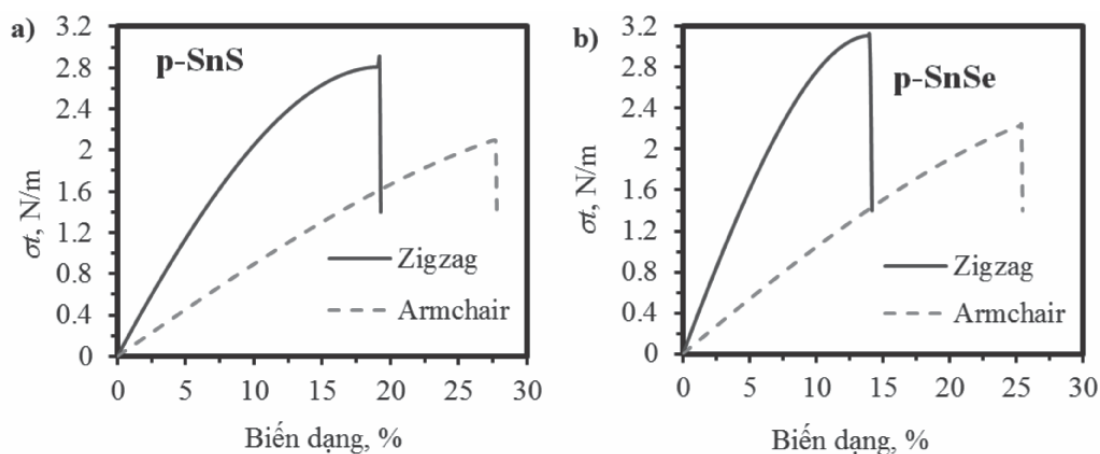
Hình 4. Mô hình kéo màng: a) Kéo màng theo phương zigzag; b) Kéo màng theo phương armchair.

3.2. Kết quả mô phỏng thí nghiệm kéo 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 $0 \div 0.1$; Hệ số Poisson được xác định dựa vào tỷ số biến dạng ngang và biến dạng dọc trục; $\nu = -\epsilon_y/\epsilon_x$; 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 4 vật liệu được thể hiện trên các hình 5 và 6.



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



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.

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 4).

Bảng 4. Kết quả mô phỏng thí nghiệm kéo màng của các vật liệu p-CS, p-GeO, p-SnS và p-SnSe. Trong đó, t là chiều dày của màng.

STT	Vật liệu	Phương kéo	Mô đun đàn hồi hai chiều $E.t$ (N/m)	Hệ số Poisson	Ứng suất hai chiều lớn nhất $\sigma.t$ (N/m)	Biến dạng khi ứng suất hai chiều lớn nhất	So sánh với kết quả của tác giả Jiang
1	p-CS	Armchair	15.7	-0.05	1.68	0.15	Kết quả tính
			16.2	-0.06	4.3	0.38	[5]
			-3.1	-16.7	-	-	Sai số %, so với [5]
		Zigzag	70.4	-0.26	5,76	0.19	Kết quả tính
			70.5	-0.27	5,22	0.22	[5]
			-0.1	-3.7	10.3	13.6	Sai số %, so với [5]
2	p-GeO	Armchair	15.2	0.09	4.87	0.306	Kết quả tính
			14.5	0.09	4.8	0.32	[5]
			4.83	0.00	1.46	-4.38	Sai số %, so với [5]
		Zigzag	75.6	0.56	7.75	0.225	Kết quả tính

			78.9	0.65	8.2	0.23	[5]
			-4.18	-13.85	-5.49	-2.17	Sai số %, so với [5]
3	p-SnS	Armchair	9.13	0.16	2.09	0.277	Kết quả tính
			9.6	0.18	2.3	0.36	[5]
			-4.90	-11.11	-9.13	-23.06	Sai số %, so với [5]
		Zigzag	24.28	0.44	2.91	0.192	Kết quả tính
			24.5	0.47	3.1	0.20	[5]
			-0.90	-6.38	-6.13	-4.00	Sai số %, so với [5]
4	p-SnSe	Armchair	10.85	0.1	2.24	0.254	Kết quả tính
			11.4	0.11	2.3	0.32	[5]
			-4.82	-9.09	-2.61	-20.63	Sai số %, so với [5]
		Zigzag	34.28	0.32	3.13	0.14	Kết quả tính
			34.1	0.33	3.3	0.15	[5]
			0.53	-3.03	-5.15	-6.67	Sai số %, so với [5]

Trong bảng 4, cho thấy, khi kéo màng của các vật liệu trên, kết quả xác định được: Mô đun đàn hồi hai chiều khi kéo theo phương zigzag trong khoảng $24.28 \div 75.6$ N/m, theo phương armchair trong khoảng $9.13 \div 15.7$ N/m; ứng suất hai chiều lớn nhất trong khoảng $1.68 \div 7.75$ N/m, hệ số Poisson trong khoảng $-0.26 \div 0.56$, biến dạng nhỏ nhất và lớn nhất khi kéo đứt tương ứng là 14% và 30,6%. Khái niệm ứng suất hai chiều $\sigma.t$ là tích số giữa ứng suất khi kéo σ và chiều dày màng t , tương tự với mô đun đàn hồi hai chiều (E.t). Từ kết quả này, nếu lấy chiều dày của tấm là $t = 3.4$ Å, tham khảo chiều dày màng graphene [9,10] thì mô đun đàn hồi của p-GeO khi kéo theo phương zigzag là $22,24.10^{10}$ N/m, khi kéo theo phương armchair là $4,47.10^{10}$ N/m; tương đương độ cứng của thép CT3.

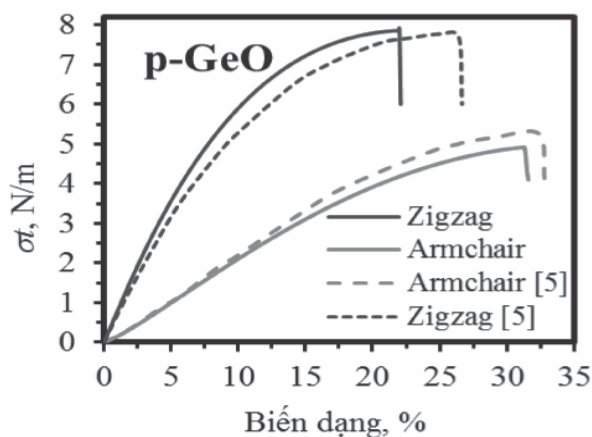
Kết quả tính toán đã được so sánh với nghiên cứu của Jiang [5], cho thấy sự tương

đồng cao, sai số không quá lớn. Cụ thể: Sai số của mô đun đàn hồi hai chiều từ -4,9% (p-SnSn khi kéo theo armchair) đến 4.83% (p-GeO khi kéo theo phương zigzag); Đối với hệ số Poisson -16.7% (p-CS khi kéo theo armchair) đến 0% (p-GeO khi kéo theo phương zigzag); Ứng suất hai chiều lớn nhất khi kéo đứt từ -9.13% (p-SnS khi kéo theo armchair) đến 10,3% (p-CS khi kéo theo phương zigzag); biến dạng khi đạt ứng suất lớn nhất có sai số trong khoảng -23,6% đến 13,6%, tương ứng khi kéo màng p-SnS theo phương armchair và p-CS theo phương zigzag.

Kết quả trong bảng 4 cho thấy, p-CS có hệ số Poisson nhỏ hơn 0, phù hợp với nghiên cứu của Jiang [5]. Kết quả này là do cấu tạo và thông số mạng của vật liệu p-CS gây ra, hệ số Poisson âm, chứng tỏ đã có một phương bị co lại khi kéo mặc dù màng này chưa đến giai đoạn thất. Đặc biệt, đối với màng p-CS khi kéo theo phương armchair đến biến dạng 15%, màng đã

bị phẳng hóa, giai đoạn tiếp theo không đáp ứng được mô phỏng thí nghiệm kéo, nên kết quả tính toán dừng lại, đây là nguyên nhân mà tác giả không so sánh ứng suất lớn nhất và biến dạng khi ứng suất lớn nhất của nó với nghiên cứu của Jiang.

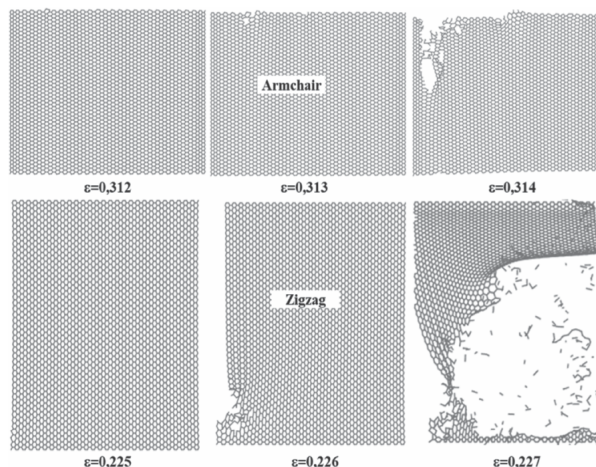
Đồ thị trên hình 7, biểu diễn mối quan hệ giữa ứng suất và biến dạng khi kéo màng p-GeO, để so sánh kết quả nghiên cứu của tác giả và của Jiang. Trong đó, đường nét liền là kết quả của nghiên cứu; đường nét đứt là kết quả nghiên cứu của Jiang khi sử dụng MD để tính ở 1 K. Các đường này gần như trùng khớp nhau. Tuy nhiên, khi sử dụng MD để kéo màng theo phương armchair, màng có biến dạng dài hơn trước khi bị phá hủy khoảng 4,4%; đối với phương zigzag, biến dạng dài trước khi phá hủy sai lệch nhau 2,2%. Như vậy, có sự phù hợp và tương đồng với kết quả nghiên cứu của Jiang.



Hình 7. Quan hệ ứng suất - biến dạng khi kéo màng p-GeO.

Quá trình mô phỏng kéo màng sẽ phá hủy khi liên kết giữa các nguyên tử liên kề bị phá vỡ. Trên hình 8 cho thấy sự phá hủy màng p-GeO, khi kéo theo phương armchair với biến dạng $\varepsilon = 0.313$ đã có một vài liên kết bị đứt, khi $\varepsilon = 0.314$ rất nhiều liên kết bị đứt, lúc này màng đã bị phá hủy. Tương tự, khi kéo theo phương

zigzag, với $\varepsilon = 0.226$ đã có một vài liên kết ở biên bị đứt trước khi màng bị phá hủy với biến dạng $\varepsilon = 0.227$.



Hình 8. Sự phá hủy của màng p-GeO 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 4 vật liệu hai chiều p-CS, p-GeO, p-SnS và p-SnSe 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 9,13 N/m đến 75,6 N/m). Các kết quả nghiên cứu có sự tương đồng cao với các nghiên cứu trước đó của Jiang. Từ kết quả cho thấy, cơ tính của các vật liệu này theo hai phương armchair và phương zigzag khác tương đối lớn, do đó các vật liệu này có tính dị hướng cao. Đặc biệt, vật liệu p-CS có hệ số Poisson âm, điều này khác xa so với vật liệu ở kích thước vĩ mô mà chúng ta đang nghiên cứu tính toán. Hiện tượng phẳng hóa xảy ra khi kéo màng p-CS theo phương armchair cũng là một trong những hiện tượng đặc biệt. Các thông số cơ học của 4 vật liệu p-CS, p-GeO, p-SnS và p-SnSe là cơ sở để

tính toán, nghiên cứu những đặc trưng cơ học khác của chúng, như: Ảnh hưởng của lỗi mạng của vật liệu, dao động và phá hủy màng, hệ số cường độ ứng suất. ❖

Ngày nhận bài: **18/10/2023**

Ngày phản biện: **28/11/2023**

Tài liệu tham khảo:

- [1]. Geim, A.K. and K.S. Novoselov (2007). *The rise of graphene*. Nature materials, 6 (3): pp. 183.
- [2]. Geim, A.K. (2009). *Graphene: status and prospects*. science, 324 (5934): pp. 1530-1534.
- [3]. H.-T. Nguyen, M.-Q. Le, and V.-T. Nguyen, *Mode-I stress intensity factors of silicene, AlN, and SiC hexagonal sheets*, Mater. Res. Express, vol. 5, no. 6, pp. 065025, 2018. DOI: 10.1088/2053-1591/aac807.
- [4]. Minh-Quy Le, Huu-Tu Nguyen & Thanh-Lam Bui (2021): *Fracture of 28 buckled two-dimensional hexagonal sheets*, Mechanics of Advanced Materials and Structures, DOI: 10.1080/15376494.2021.1945172.
- [5]. Jiang, J.-W. and Y.-P. Zhou (2017). *Parameterization of Stillinger-Weber potential for two-dimensional atomic crystals*. arXiv preprint arXiv:1704.03147.
- [6]. Miaomiao Luo, Taojian Fan, Yun Zhou, Han Zhang, Lin Mei, *2D Black Phosphorus-Based Biomedical Applications*, 04 February 2019, <https://doi.org/10.1002/adfm.201808306>.
- [7]. B. Liu, Y. Huang, H. Jiang, S. Qu, and K.C. Hwang, *The atomic-scale finite element method*, Comput Methods Appl Mech Eng., vol. 193, no. 17-20, pp. 1849–1864, 2004. DOI: 10.1016/j.cma.2003.12.037.
- [8]. Stillinger FH, Weber TA. *Computer simulation of local order in condensed phases of silicon*. Physical Review B. 1985.3:5262
- [9]. 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, 2016. 33.
- [10]. Sarkar, A. and E. Stratakis, *Recent Advances in 2D Metal Monochalcogenides*, Advanced Science, 2020: p. 2001655.