

ẢNH HƯỞNG CỦA KHUYẾT TẬT ĐỐI VỚI CƠ TÍNH CỦA MÀNG ARSENE

EFFECTS OF DEFECTS ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF ARSENENE

Lê Minh Quý

Trường Cơ khí, Đại học Bách Khoa Hà Nội

Email: quy.leminh@hust.edu.vn

TÓM TẮT

Bài báo nghiên cứu ảnh hưởng của khuyết tật đến cơ tính của màng arsenene có cấu trúc hình lục giác bằng phương pháp mô phỏng động lực phân tử. Trong khi tỉ lệ khuyết tật thấp dường như không ảnh hưởng tới mô đun đàn hồi, thì nó ảnh hưởng đáng kể tới ứng suất kéo lớn nhất và biến dạng tại ứng suất lớn nhất của vật liệu. Khi thiếu 1 nguyên tử ở giữa màng, ứng suất lớn nhất mà màng chịu được khi kéo giảm tới 11 % theo phương zigzag và 22 % theo phương armchair. Trong khi đó, biến dạng tại ứng suất lớn nhất giảm tới 32 % và 38,7 % khi kéo thử dọc theo các phương zigzag và armchair. Khuyết tật với tỉ lệ thiếu 0,1 % nguyên tử có thể gây ra sự sụt giảm ứng suất kéo lớn nhất tới 22 % khi kéo theo phương zigzag và 31 % khi kéo theo phương armchair.

Từ khóa: Màng arsenene; Khuyết tật; Cơ tính; Mô phỏng động lực phân tử.

ABSTRACT

The present work investigates the effects of defects on the mechanical properties of hexagonal buckled monolayer arsenene through molecular dynamics simulations. While low defect ratios does not affect the elastic modulus, they affect significantly the maximal tensile stresses and tensile strains at maximal stress of arsenene. One central vacancy could reduce 11 % and 22 % in maximal stress, and 32 % and 38.7 % in strain at maximal stress under tension along the zigzag and armchair, respectively. A defect ratio of 0.1 % could reduce 22 % and 31 % in maximal stress under tension along the zigzag and armchair, respectively.

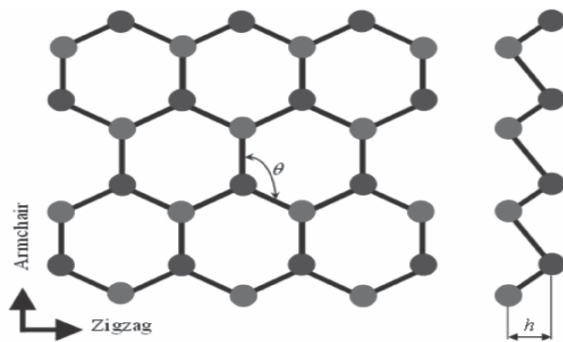
Keywords: Arsenene; Defect; Mechanical properties; Molecular dynamics simulations.



1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Arsenene là vật liệu 2 chiều, có cấu trúc hình lục giác như minh họa trên hình 1. Ở đỉnh của mỗi hình lục giác là nguyên tử asen, sắp xếp nằm trên 2 mặt phẳng song song với nhau và cách nhau một khoảng $h = 1,35 \text{ \AA}$ [1]. Các màng arsenene (màng asen) đã được tổng hợp trong thực tế [2, 3]. Màng arsenene là vật liệu bán dẫn [1] có tiềm năng ứng dụng trong các linh kiện điện tử, vi cơ điện tử, quang điện tử, sensors... [3, 4]. Tính chất bán dẫn và quang điện tử của màng arsenene có thể được điều chỉnh nhờ biến dạng cơ học mà nó chịu tác dụng [3, 5]. Do đó, việc nghiên cứu tính chất cơ học của màng arsenene có ý nghĩa quan trọng. Yang và cộng sự [6] đã nghiên cứu ảnh hưởng của nhiệt độ đến cơ tính của màng arsenene bằng phương pháp mô phỏng động lực phân tử. Thực tế, màng arsenene luôn có khuyết tật [7] và có thể ảnh hưởng đến tính chất của nó.

Bài báo này nghiên cứu tính chất cơ học của màng arsenene bằng phương pháp mô phỏng động lực phân tử. Các mô hình của màng arsenene nghiên cứu trong bài báo gồm: màng nguyên (không có khuyết tật), khuyết tật mất 1 nguyên tử ở giữa màng, khuyết tật với tỉ lệ thiếu 0,1 % nguyên tử phân bố ngẫu nhiên. Kết quả nghiên cứu cung cấp thông tin quan trọng về tính chất cơ học của màng arsenene.



Hình 1. Cấu tạo màng arsenene (đỉnh của mỗi hình lục giác là nguyên tử asen).

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Hàm thế Stillinger-Weber [8] được sử dụng để mô phỏng sự tương tác của các nguyên tử asen. Thế năng E của màng asen gồm tổng năng lượng của kéo dẫn các liên kết E_r và uốn E_θ :

$$E = E_r + E_\theta, \quad (1a)$$

$$E_r = \sum_{e=1}^M V_2, \quad E_\theta = \sum_{e=1}^N V_3, \quad (1b)$$

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

$$V_3 = K e^{\left[\rho_{ij} / (r_{ij} - r_{\max ij}) + \rho_{ik} / (r_{ik} - r_{\max ik}) \right]} \left(\cos \theta_{ijk} - \cos \theta_0 \right)^2 \quad (1d)$$

Ở đây, V_2 là năng lượng kéo dẫn liên kết giữa 2 nguyên tử i và j (liên kết giữa 2 nguyên tử gần nhất). V_3 là năng lượng làm thay đổi góc θ giữa 2 liên kết, xem hình 1. Các thông số của phương trình (1) được lấy từ tài liệu [9] cho các nguyên tử asen và liệt kê ở bảng 1. Màng nguyên arsenene (không có khuyết tật) gồm 16.128 nguyên tử, kích thước $303,4 \times 300,3 \text{ (\AA)}$. Phương pháp mô phỏng động lực phân tử được sử dụng để mô phỏng thí nghiệm kéo màng arsenene nhờ phần mềm miễn phí LAMMPS [10].

Bảng 1. Thông số của hàm thế Stillinger-Weber cho màng asen [9].

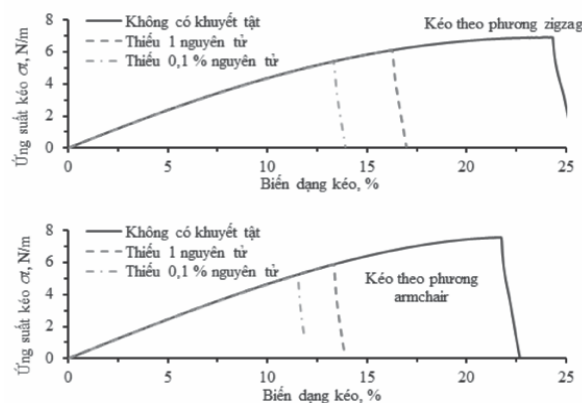
A, eV	B, $\text{\AA}^4$	K, eV	ρ , $\text{\AA}$	$r_{\max}$, $\text{\AA}$	$\cos \theta_0$
6,418	19,846	14,845	0,482	3,06	-0,034

Bảng 2. Mô đun đàn hồi của màng asen.

Tỉ lệ khuyết tật	Mô đun đàn hồi Yt, N/m (kéo theo phương zigzag)	Mô đun đàn hồi Yt, N/m (kéo theo phương armchair)
Không khuyết tật (màng nguyên)	49,7	50,0
Không khuyết tật (màng nguyên). Mô phỏng động lực phân tử ở 1 độ K [9]	49,9	50,8
Không khuyết tật (màng nguyên). Tính toán theo lý thuyết phiếm hàm mật độ [11]	51,4	51,4
Không khuyết tật (màng nguyên). Tính toán theo lý thuyết phiếm hàm mật độ [12]	52,8	52,8
Thiếu 1 nguyên tử	49,7	50,0
Thiếu 0,1 % nguyên tử (tất cả 5 mẫu)	49,4	49,7

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Đường cong ứng suất biến dạng kéo của các màng arsenene được biểu diễn trên hình 2. Hình 3 trình bày mô hình màng có khuyết tật mất 1 nguyên tử ở giữa màng. 5 mẫu màng khuyết tật với tỉ lệ thiếu 0,1 % nguyên tử (thiếu 16 nguyên tử) phân bố ngẫu nhiên được tính toán. Hình 4 trình bày 1 mẫu màng khuyết tật với tỉ lệ thiếu 0,1 % nguyên tử phân bố ngẫu nhiên.



Hình 2. Đường cong ứng suất biến dạng kéo của các màng arsenene.

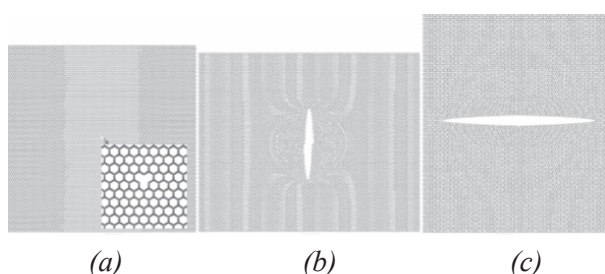
Bảng 3. Biến dạng kéo tại ứng suất lớn nhất khi kéo theo phương zigzag.

Tỉ lệ khuyết tật	Biến dạng kéo tại ứng suất lớn nhất, %	Tỉ lệ sụt giảm do khuyết tật, %	Ứng suất lớn nhất σ, N/m	Tỉ lệ sụt giảm do khuyết tật, %
Không khuyết tật (màng nguyên)	23,88	—	6,9	—
Không khuyết tật (màng nguyên). Mô phỏng động lực phân tử ở 1 độ K [9]	28	—	7,2	—
Thiếu 1 nguyên tử	16,24	-32,0	6,1	-11,4
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 1	14,62	-38,8	5,70	-17,4
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 2	14,82	-37,9	5,75	-16,7
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 3	15,92	-33,3	6,0	-13,1
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 4	13,3	-44,3	5,4	-22,2
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 5	15,82	-33,8	6,0	-13,4

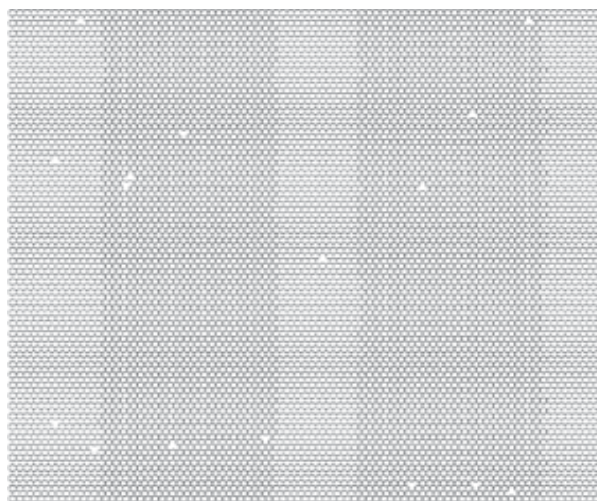
Bảng 4. Biến dạng kéo tại ứng suất lớn nhất khi kéo theo phương armchair.

Tỉ lệ khuyết tật	Biến dạng kéo tại ứng suất lớn nhất, %	Tỉ lệ sụt giảm do khuyết tật, %	Ứng suất lớn nhất σ , N/m	Tỉ lệ sụt giảm do khuyết tật, %
Không khuyết tật (màng nguyên)	21,72	–	7,6	–
Không khuyết tật (màng nguyên). Mô phỏng động lực phân tử ở 1 độ K [9]	24	–	7,6	–
Thiếu 1 nguyên tử	13,32	-38,7	5,9	-22,2
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 1	13,42	-38,2	5,85	-22,6
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 2	13,36	-38,5	5,83	-22,8
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 3	12,92	-40,5	5,69	-24,7
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 4	11,52	-47,0	5,19	-31,2
Thiếu 0,1 % nguyên tử, mẫu số 5	13,24	-39,0	5,79	-23,3

Đường cong ứng suất biến dạng kéo của màng nguyên (không có khuyết tật), màng có khuyết tật mất 1 nguyên tử ở giữa màng, màng khuyết tật với tỉ lệ thiếu 0,1 % nguyên tử phân bố ngẫu nhiên, gần như trùng nhau cho tới giá trị ứng suất lớn nhất của mỗi màng như ta thấy trên hình 2.



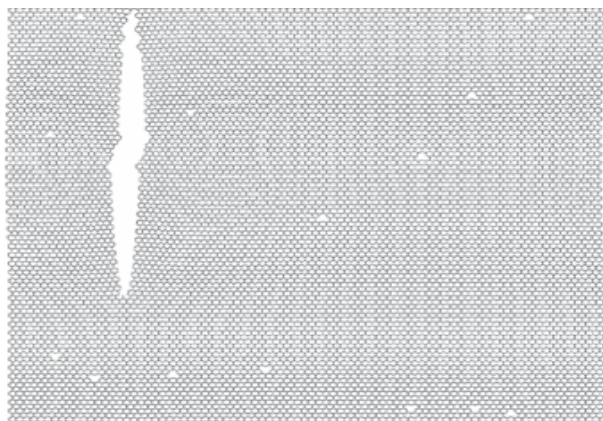
Hình 3. Màng arsenene có khuyết tật, thiếu 1 nguyên tử ở giữa: (a) ban đầu, trước khi kéo; (b) kéo theo phương zigzag (phương nằm ngang), tại thời điểm biến dạng kéo là 16,3 %, biến dạng tương ứng với ứng suất lớn nhất là 16,24 %; (c) kéo theo phương armchair (phương thẳng đứng), tại thời điểm biến dạng kéo là 13,4 %, biến dạng tương ứng với ứng suất lớn nhất là 13,32 %.



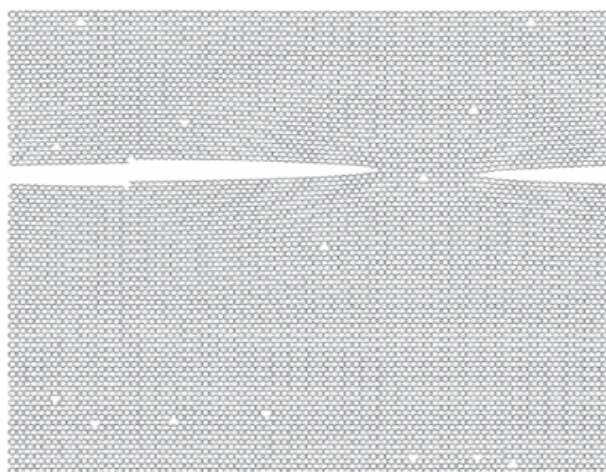
Hình 4. Màng arsenene có khuyết tật, thiếu 0,1 % nguyên tử (mẫu 4).

Mô đun đàn hồi được tính bằng cách xấp xỉ đường cong ứng suất biến dạng với đường thẳng với các giá trị của biến dạng kéo $\epsilon \leq 1$ %. Mô đun đàn hồi của các màng arsenene gần như nhau như thấy trên bảng 2. Tỉ lệ khuyết tật nhỏ gần như không ảnh hưởng tới mô đun

đàn hồi. Trên bảng 2, Y là mô đun đàn hồi, t là độ dày của màng. Yt sẽ có thứ nguyên là lực trên đơn vị chiều dài, ở đây là N/m. Với vật liệu 2 chiều như màng arsenene, Yt là mô đun đàn hồi 2 chiều, thường xuyên được dùng vì độ dày t của màng khó xác định trong thực tế, chẳng hạn xem [11, 12]. Tương tự, σ là ứng suất 2 chiều, với σ là ứng suất, chẳng hạn xem [9].



Hình 5. Kéo theo phương zigzag (phương nằm ngang), màng có khuyết tật ban đầu thiếu 0,1 % nguyên tử (mẫu số 4), tại thời điểm biến dạng kéo là 13,4 %. Biến dạng tương ứng với ứng suất lớn nhất là 13,3 %.



Hình 6. Kéo theo phương armchair (phương thẳng đứng), màng có khuyết tật ban đầu thiếu 0,1 % nguyên tử (mẫu số 4), tại thời điểm biến dạng kéo là 11,6 %. Biến dạng tương ứng với ứng suất lớn nhất là 11,52 %.

Kết quả tính mô đun đàn hồi 2 chiều của màng nguyên (không có khuyết tật) trong bài báo này là ~ 50 N/m (theo phương zigzag và armchair) có sai lệch thấp so với kết quả tính theo phương pháp mô phỏng động lực phân tử ở 1 độ K [9] là 50 N/m (theo phương zigzag) và 50,8 N/m (theo phương armchair) và tính toán theo lý thuyết phiếm hàm mật độ là 51,4 N/m [11] và 52,8 N/m [12] như thấy rõ trên bảng 2. Điều đó khẳng định sự tin cậy của phương pháp trong bài báo.

Ứng suất 2 chiều lớn nhất và biến dạng tại ứng suất lớn nhất là 6,9 N/m và 23,88 % khi kéo theo phương zigzag, và 7,6 N/m và 21,72 % khi kéo theo phương armchair. Kết quả đó rất sát so với kết quả tính theo phương pháp mô phỏng động lực phân tử ở 1 độ K [9] như thấy trên bảng 3 và 4. Lưu ý là tốc độ biến dạng khi mô phỏng thí nghiệm kéo trong [9] là 10^9 s^{-1} (1 trên giây) lớn hơn so với 10^8 s^{-1} trong nghiên cứu ở bài báo này. Mẫu thí nghiệm kéo trong [9] là màng vuông 100×100 (Å), khoảng 1790 nguyên tử nhỏ hơn so với mẫu thí nghiệm trong bài báo này với kích thước $303,4 \times 300,3$ (Å) và 16.128 nguyên tử. Hai lí do trên dẫn đến ứng suất lớn nhất và biến dạng tại ứng suất lớn nhất trong nghiên cứu ở đây nhỏ hơn một chút so với kết quả trong [9].

Dù tỉ lệ khuyết tật rất thấp, nó cũng làm giảm đáng kể khả năng chịu lực của màng như thấy trên hình 2 và bảng 3 và 4. Khi thiếu 1 nguyên tử ở giữa màng, ứng suất lớn nhất mà màng chịu được khi kéo giảm tới 11 % theo phương zigzag và 22 % theo phương armchair (xem bảng 3 và 4). Trong khi đó, biến dạng tại ứng suất lớn nhất giảm tới 32 % và 38,7 % khi kéo thứ tự theo các phương zigzag và armchair.

5 mẫu màng khuyết tật với tỉ lệ thiếu 0,1 % nguyên tử (thiếu 16 nguyên tử) phân bố ngẫu nhiên đều thể hiện khả năng chịu kéo sụt

giảm nghiêm trọng như thấy rõ trong bảng 3 và 4. Khi kéo theo phương zigzag, ứng suất lớn nhất giảm từ 13,1 % đến 22,2 %, biến dạng tại ứng suất lớn nhất giảm từ 33,3 % đến 44,3 %. Khi kéo theo phương armchair, ứng suất lớn nhất giảm từ 22,6 % đến 31,2 %, biến dạng tại ứng suất lớn nhất giảm từ 38,2 % đến 47 %.

Khi kéo, vết nứt hình thành từ khuyết tật gây ra phá hủy của màng arsenene như thấy trên các hình 3, 5, 6.

4. KẾT LUẬN

Bài báo sử dụng phương pháp mô phỏng động lực phân tử để nghiên cứu cơ tính của màng arsenene khi có khuyết tật. Kết quả tính toán được kiểm chứng và thảo luận với kết quả của các nghiên cứu trước. Tỷ lệ khuyết tật nhỏ gần như không ảnh hưởng tới mô đun đàn hồi của vật liệu. Trong khi đó, tỷ lệ khuyết tật nhỏ cũng gây sụt giảm nghiêm trọng ứng suất lớn nhất và biến dạng tại ứng suất lớn nhất khi chịu kéo của vật liệu. Khi thiếu 1 nguyên tử ở giữa màng, ứng suất lớn nhất mà màng chịu được khi kéo giảm tới 11 % theo phương zigzag và 22 % theo phương armchair. Trong khi đó, biến dạng tại ứng suất lớn nhất giảm tới 32 % và 38,7 % khi kéo thứ tự theo các phương zigzag và armchair. Khuyết tật với tỷ lệ thiếu 0,1 % nguyên tử phân bố ngẫu nhiên có thể gây ra sự sụt giảm ứng suất lớn nhất tới 22 % khi kéo theo phương zigzag và 31 % khi kéo theo phương armchair. ❖

Ngày nhận bài: 09/6/2026

Ngày phản biện: 17/6/2026

Tài liệu tham khảo:

[1]. S. Zhang, Z. Yan, Y. Li, Z. Chen, and H. Zeng, "Atomically thin arsenene and antimonene: semimetal-semiconductor and indirect-direct

band-gap transitions". *Angewandte Chemie International Edition* 54 (10) (2015) 3112-3115.

[2]. H.-S. Tsai, S.-W. Wang, C.-H. Hsiao, C.-W. Chen, H. Ouyang, Y.-L. Chueh, H.-C. Kuo, and J.-H. Liang, "Direct synthesis and practical bandgap estimation of multilayer arsenene nanoribbons". *Chemistry of Materials* 28 (2) (2016) 425-429.

[3]. K. K. Singh, V. H. Gaidhane, N. Sood, and N. Bhalla, "Exploring the potential of phosphorene and arsenene in plasmonic and 2D nanomaterial-based biosensing: from fundamentals to applications". *Nanoscale Horizons* (2026).

[4]. R. Bhuvaneswari, V. Nagarajan, and R. Chandiramouli, "Recent advances in arsenene nanostructures towards prediction, properties, synthesis and applications". *Surfaces and Interfaces* 28 (2022) 101610.

[5]. J. Yu, M. I. Katsnelson, and S. Yuan, "Tunable electronic and magneto-optical properties of monolayer arsenene: From GW 0 approximation to large-scale tight-binding propagation simulations". *Physical Review B* 98 (11) (2018) 115117.

[6]. B. Yang, M. Li, J. Wang, J. Zhang, D. Liao, and Y. Yue, "Critical fracture properties of puckered and buckled arsenenes by molecular dynamics simulations". *Physical Chemistry Chemical Physics* 21 (23) (2019) 12372-12379.

[7]. X. Sun, Y. Liu, Z. Song, Y. Li, W. Wang, H. Lin, L. Wang, and Y. Li, "Structures, mobility and electronic properties of point defects in arsenene, antimonene and an antimony arsenide alloy". *Journal of Materials Chemistry C* 5 (17) (2017) 4159-4166.

[8]. F. H. Stillinger and T. A. Weber, "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon". *Physical review B* 31 (8) (1985) 5262.

[9]. J.-W. J. a. Y.-P. Zhou, "Handbook of Stillinger-Weber Potential Parameters for Two-Dimensional Atomic Crystals". 2017: Intechopen.

[10]. S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics". *Journal of Computational Physics* 117 (1) (1995) 1-19.

[11]. F. Ersan, E. Aktürk, and S. Ciraci, "Stable single-layer structure of group-V elements". *Physical Review B* 94 (24) (2016) 245417.

[12]. G. Liu, Z. Gao, and J. Zhou, "Strain effects on the mechanical properties of Group-V monolayers with buckled honeycomb structures". *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 112 (2019) 59-65.