

PHÂN TÍCH NGUYÊN LÝ ĐẦU VỀ TÍNH CHẤT CƠ HỌC, ĐIỆN TỬ VÀ NHIỆT ĐIỆN CỦA VẬT LIỆU ZnGeS_2 ĐƠN LỚP

A FIRST-PRINCIPLES ANALYSIS OF MECHANICAL, ELECTRONIC, AND THERMOELECTRIC PROPERTIES OF MONOLAYER ZnGeS_2

Nguyễn Văn Tuấn¹, Tô Toàn Thắng², Nguyễn Hoàng Linh^{1,*},
Đinh Thế Hưng³, Đỗ Văn Trường^{2,*}

¹Đại học Quốc gia Changwon (Changwon, Hàn Quốc)

²Đại học Bách Khoa Hà Nội (Hà Nội, Việt Nam)

³Đại học Phenikaa (Hà Nội, Việt Nam)

*Email: linhnh.pt@gmail.com; truong.dovan@hust.edu.vn

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, các tính chất cơ học, điện tử và nhiệt điện của đơn lớp ZnGeS_2 được khảo sát bằng phương pháp nguyên lý đầu dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ. Kết quả cho thấy vật liệu có độ ổn định cao và khả năng chịu biến dạng lớn với giới hạn khoảng 0,18 và ứng suất tới hạn ~9,3 N/m. Cấu trúc vùng năng lượng tính bằng PBE và HSE cho kết quả tương đồng, xác nhận ZnGeS_2 là bán dẫn gián tiếp với vùng trống 1,20–1,83 eV. Sự phân bố không đồng nhất của các điểm cực trị cho thấy tính linh hoạt trong điều chỉnh tính chất điện tử. Ngoài ra, vật liệu thể hiện hiệu suất nhiệt điện đáng chú ý với hệ số Seebeck lớn (~2 mV/K tại 300 K) và hệ số công suất cao, đặc biệt đối với bán dẫn loại n. Những kết quả này cho thấy ZnGeS_2 là vật liệu tiềm năng cho các ứng dụng nhiệt điện và quang điện tử.

Từ khóa: Tính chất cơ học; Cấu trúc vùng năng lượng; Tính chất nhiệt điện; Đơn lớp ZnGeS_2 ; Nguyên lý đầu.

ABSTRACT

In this study, the mechanical, electronic, and thermoelectric properties of the ZnGeS_2 monolayer were investigated using first-principles density functional theory. The material exhibits high stability and excellent mechanical flexibility, with an ultimate strain of ~0.18 and a corresponding ultimate stress of ~9.3 N/m. Energy band structures from PBE and HSE calculations consistently confirm an indirect band gap of 1.20–1.83 eV. The non-uniform distribution of band extrema suggests strong sensitivity to external influences, enabling tunable electronic properties. Furthermore, ZnGeS_2 shows promising thermoelectric performance, with a large Seebeck coefficient (~2 mV/K at 300 K) and a high power factor, especially for n-type. These results highlight its potential for thermoelectric and optoelectronic applications.

Keywords: Mechanical properties; Energy band structure; Thermoelectric properties; ZnGeS_2 monolayer; First-principles theory.

1. GIỚI THIỆU

Vật liệu hai chiều (2D) đang nổi lên như những ứng cử viên đầy tiềm năng cho các thiết bị tiên tiến và thông minh nhờ sở hữu nhiều ưu điểm vượt trội về tính chất bề mặt và đặc trưng vật lý [1, 2]. Kể từ khi graphene được phát hiện [3], một cuộc cách mạng trong khoa học vật liệu đã được khởi xướng, mở ra hướng nghiên cứu mới cho nhiều lĩnh vực công nghiệp hiện đại. Đến nay, vật liệu 2D đã chứng minh vai trò quan trọng trong các lĩnh vực như năng lượng, nhiệt điện, bán dẫn, quang điện tử và cảm biến [4, 5]. Nhờ những đặc tính ưu việt, việc nghiên cứu và phát triển các hệ vật liệu này vẫn đang tiếp tục được đẩy mạnh nhằm đáp ứng các yêu cầu ngày càng cao về hiệu suất và khả năng tích hợp trong các thiết bị thế hệ mới.

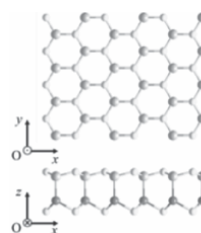
Trong số các vật liệu hai chiều, nhóm dichalcogenides kim loại chuyển tiếp (TMDs) là một trong những hệ được nghiên cứu sớm và rộng rãi, với các đại diện tiêu biểu như MoS_2 , MoSe_2 , WS_2 và SiTe_2 [6, 7]. Những vật liệu này không chỉ thể hiện độ bền cơ học tốt mà còn sở hữu các tính chất điện tử và quang học nổi bật, mở ra nhiều hướng ứng dụng tiềm năng. Trên nền tảng đó, các nghiên cứu gần đây đã mở rộng sang các cấu trúc phức tạp hơn, đặc biệt là vật liệu đơn lớp dạng Janus [8]. Với cấu trúc bất đối xứng nội tại, các vật liệu Janus cho phép điều chỉnh linh hoạt các tính chất vật lý và mang lại nhiều hiệu ứng mới [8, 9]. Nhiều công trình đã chứng minh tiềm năng của các hệ Janus trong các lĩnh vực như nhiệt điện, quang học và áp điện, từ đó thu hút sự quan tâm đáng kể trong cộng đồng nghiên cứu [9, 10].

Trong bối cảnh đó, vật liệu đơn lớp ZnGeS_2 nổi lên như một hệ vật liệu đầy triển vọng [11, 12]. Các nghiên cứu hiện có cho thấy ZnGeS_2 sở hữu hệ số áp điện cao cùng khả năng điều chỉnh linh hoạt các tính chất điện tử, tạo

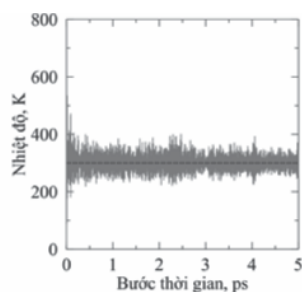
điều kiện thuận lợi cho các ứng dụng trong thiết bị cơ điện tử nano. Tuy nhiên, các nghiên cứu chuyên sâu về tiềm năng ứng dụng của vật liệu này vẫn còn hạn chế, đặc biệt trong lĩnh vực nhiệt điện. Nghiên cứu này tiến hành khảo sát các tính chất cơ học, điện tử và nhiệt điện của đơn lớp ZnGeS_2 , trong đó các phân tích cơ học và điện tử đóng vai trò nền tảng để đánh giá độ ổn định và khả năng điều chỉnh tính chất, còn các thông số nhiệt điện làm rõ hiệu suất chuyển đổi năng lượng. Những kết quả thu được không chỉ góp phần làm sáng tỏ bản chất vật lý của ZnGeS_2 mà còn cho thấy tiềm năng ứng dụng trong các lĩnh vực năng lượng và thiết bị điện tử tiên tiến.

2. PHƯƠNG PHÁP LUẬN

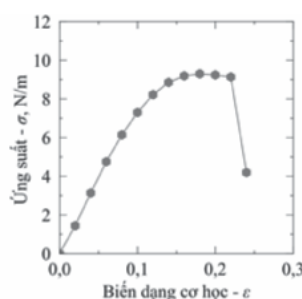
Các tính chất được mô phỏng bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) sử dụng phần mềm Quantum ESPRESSO [6]. Tương tác điện tử-ion được mô tả bằng hàm trao đổi-tương quan PBE trong xấp xỉ GGA [2, 13]. Hàm sóng phẳng với năng lượng cắt 60 Ry được sử dụng cùng điều kiện biên tuần hoàn theo ba phương [14]. Để mô phỏng hệ đơn lớp, vùng chân không 30 Å được thiết lập nhằm loại bỏ tương tác giữa các lớp. Vùng Brillouin được lấy mẫu bằng lưới k $15 \times 15 \times 1$ theo sơ đồ Monkhorst-Pack [15]. Cấu trúc được tối ưu hóa đến khi lực trên mỗi nguyên tử nhỏ hơn 10^{-5} Ry/Bohr trong điều kiện 0 K. Tính chất nhiệt điện được tính toán bằng BoltzTraP [14], tập trung vào hệ số Seebeck và hệ số công suất nhằm đánh giá hiệu suất chuyển đổi năng lượng của vật liệu.



(a)



(b)



(c)

Hình 1. (a) Cấu trúc nguyên tử ở trạng thái cân bằng của vật liệu đơn lớp ZnGeS_2 (Zn: màu tím, Ge: màu xám và S: màu vàng); (b) Sự biến thiên của nhiệt độ khi gia nhiệt 300 K lên cấu trúc vật liệu. (c) Đường cong ứng suất - biến dạng khi thực hiện biến dạng kéo hai trục.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

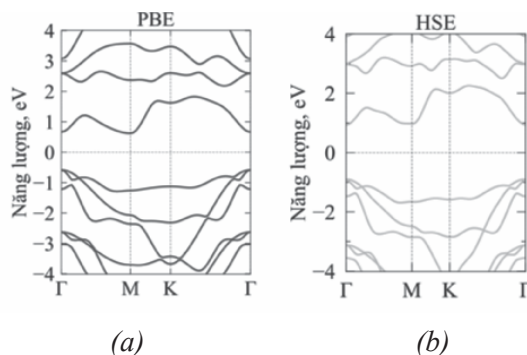
3.1. Tối ưu hóa cấu trúc và tính ổn định của vật liệu

Cấu trúc đơn lớp ZnGeS_2 được tối ưu hóa bằng giải thuật cực tiểu năng lượng BFGS, xác định trạng thái cân bằng của các nguyên tử như Hình 1(a). Vật liệu gồm bốn lớp nguyên tử sắp xếp theo thứ tự S–Ge–Zn–S, hình thành mạng lưới lục giác dạng tổ ong trong mặt phẳng xy. Hằng số mạng ($a = b = 3.78 \text{ \AA}$) [11, 12] được tìm thấy phù hợp với các báo cáo trước, cho thấy độ tin cậy của mô hình. Độ ổn định của vật liệu được đánh giá thông qua hai tiêu chuẩn nhiệt động học và cơ học. Hình 1(b) mô phỏng dao động nhiệt, cho thấy cấu trúc duy trì ổn định ở 300 K, không xuất hiện biến dạng

đáng kể, chứng tỏ tính bền nhiệt tốt. Về mặt cơ học, tiêu chuẩn Born ($C_{11} > |C_{12}| > 0$ và $C_{66} > 0$) [1, 2] đều được thỏa mãn với các hằng số đàn hồi của vật liệu ($C_{11} = C_{22} = 65,45 \text{ N/m}$; $C_{12} = 31,22 \text{ N/m}$; và $C_{66} = 17,12 \text{ N/m}$). Từ các hằng số đàn hồi, module đàn hồi ($E = 50,56 \text{ N/m}$) và module cắt ($G = 17,12 \text{ N/m}$) được xác định, cho thấy ZnGeS_2 có độ cứng thấp hơn một số vật liệu 2D khác [2, 13, 14], phản ánh tính linh hoạt cơ học cao và khả năng chịu biến dạng tốt.

3.2. Tính chất cơ học

Để làm rõ tính chất cơ học của đơn lớp ZnGeS_2 , biến dạng kéo được áp dụng thông qua việc điều chỉnh hằng số mạng nhằm khảo sát mối quan hệ ứng suất–biến dạng dưới biến dạng hai trục. Hình 1(c) cho thấy ở giai đoạn đầu, ứng suất tăng gần như tuyến tính theo biến dạng, tuân theo định luật Hooke và phản ánh miền đàn hồi. Khi biến dạng tiếp tục tăng, ứng xử cơ học chuyển sang phi tuyến. Ứng suất đạt giá trị cực đại khoảng 9,3 N/m tại biến dạng xấp xỉ 0,18. Sau ngưỡng này, ứng suất giảm dần, cho thấy sự mất ổn định cơ học của cấu trúc. Do đó, biến dạng 0,18 được xem là giới hạn bền của vật liệu. So với nhiều vật liệu hai chiều khác [2, 6, 14], ZnGeS_2 thể hiện độ bền cơ học đáng kể. Điều này cho thấy tiềm năng ứng dụng của vật liệu trong các thiết bị yêu cầu độ ổn định cơ học cao.

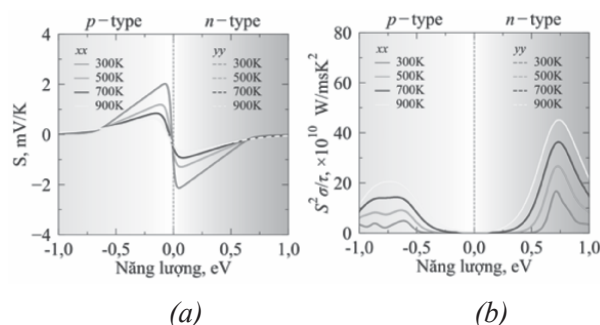


Hình 2. Cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu đơn lớp ZnGeS_2 với các hàm thế năng PBE và HSE.

3.3. Tính chất điện tử

Cấu trúc vùng năng lượng của đơn lớp ZnGeS_2 được tính toán bằng hai hàm trao đổi–tương quan PBE và HSE. Hình 2 mô tả biên dạng của cấu trúc vùng năng lượng, cho thấy sự tương đồng giữa hai phương pháp. Điều này khẳng định độ tin cậy và tính ổn định của mô hình tính toán. Đỉnh vùng hóa trị (VBM) nằm tại điểm M; trong khi đáy vùng dẫn (CBM) định vị tại điểm Γ , cho thấy vật liệu có bản chất bán dẫn gián tiếp, tương tự như kết quả đã được báo cáo [11]. Giá trị vùng trống năng lượng lần lượt là 1,20 eV (PBE) và 1,83 eV (HSE). Sự phân bố không đồng nhất của các điểm cực trị trong không gian đối xứng cho thấy các trạng thái điện tử nhạy với các tác động bên ngoài như biến dạng hoặc điện trường. Nhờ đó, vật liệu có khả năng điều chỉnh linh hoạt tính chất điện tử, đồng thời với vùng trống nằm trong vùng khả kiến, cho phép hấp thụ photon hiệu quả và phù hợp cho các ứng dụng quang điện tử [1, 2, 14].

3.4. Tính chất nhiệt điện



Hình 3. (a) Hệ số Seebeck và (b) hệ số công suất của vật liệu đơn lớp ZnGeS_2 ở các mức nhiệt độ khác nhau.

Tính chất nhiệt điện của đơn lớp ZnGeS_2 được đánh giá qua hệ số Seebeck và hệ số công suất trong mặt phẳng như Hình 3. Hệ số Seebeck có tính đẳng hướng, đạt $\sim 2 \text{ mV/K}$ tại 300 K và giảm còn $\sim 0,64 \text{ mV/K}$ ở 900 K. Sự

suy giảm này có liên quan đến sự linh động của các hạt mang điện, khiến phân bố năng lượng quanh mức Fermi trở nên đồng đều hơn và làm giảm hiệu ứng khuếch tán năng lượng. Hệ số công suất cũng đẳng hướng nhưng cao hơn rõ rệt đối với bán dẫn loại n, đạt $\sim 4,5 \times 10^{11} \text{ W/msK}^2$ tại 900 K, được gây ra bởi sự khác biệt về hình thái của vùng dẫn và vùng hóa trị. Vì thế, đơn lớp ZnGeS_2 đã cho thấy tiềm năng tốt trong các ứng dụng chuyển đổi năng lượng [14].

4. KẾT LUẬN

Nghiên cứu này phân tích các tính chất cơ học, điện tử và nhiệt điện của đơn lớp ZnGeS_2 bằng phương pháp nguyên lý đầu. Kết quả cho thấy vật liệu có độ ổn định cao, khả năng chịu biến dạng tốt và tính linh hoạt cơ học đáng kể. ZnGeS_2 là bán dẫn gián tiếp với vùng trống nằm trong vùng khả kiến, phù hợp cho các ứng dụng quang điện tử. Vật liệu cũng thể hiện hiệu suất nhiệt điện tiềm năng với hệ số Seebeck lớn và hệ số công suất cao, đặc biệt đối với bán dẫn loại n. Những kết quả này cho thấy ZnGeS_2 là ứng cử viên triển vọng cho các ứng dụng năng lượng và thiết bị điện tử tiên tiến. ❖

Ngày nhận bài: 23/3/2026

Ngày phản biện: 06/4/2026

Tài liệu tham khảo:

- [1]. T.-H. Dinh et al., “Mechanical properties, optoelectronic response, and carrier transport in SnSb monolayer: A first-principles study”. Surface Science, 770, (2026): 122977.
- [2]. H. Dinh-The et al., “Comprehensive computational study of mechanical, electronic, optical, and transport properties of the $\alpha\text{-GeS}_2$ monolayer”. Physica B: Condensed Matter, 730, (2026): 418463.
- [3]. K. S. Novoselov et al., “Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films”. 306, 5696, (2004): 666-669.

- [4]. P. Kumbhakar et al., “*Prospective applications of two-dimensional materials beyond laboratory frontiers: A review*”. iScience, 26, 5, (2023): 106671.
- [5]. T. Dutta et al., “*Electronic properties of 2D materials and their junctions*”. Nano Materials Science, 6, 1, (2024): 1-23.
- [6]. N. H. Linh et al., “*Prediction of mechanical, electronic and optical properties of monolayer 1T Si-dichalcogenides via first-principles theory*”. Materials Today Communications, 36, (2023): 106553.
- [7]. D. T. Hung et al., “*Exploring WS₂ Monolayers: Stability, Tunability, and Future Applications*”. Journal of Physics: Conference Series, 3180, 1, (2026): 012024.
- [8]. X. Liu et al., “*Polar materials for photocatalytic applications: A critical review*”. 3, 4, (2024): 530-564.
- [9]. Y. Luo et al., “*Advancements in Janus two-dimensional materials: From basic theory to practical applications*”. Ceramics International, 51, 23, Part B, (2025): 39353-39372.
- [10]. Y. Duan et al., “*Research Advances in the Synthesis, Application, Assembly, and Calculation of Janus Materials*”. Industrial & Engineering Chemistry Research, 60, 3, (2021): 1071-1095.
- [11]. T. Zhang et al., “*The high piezoelectricity, flexibility and electronic properties of new Janus ZnXY₂ (X = Ge, Sn, Si and Y = S, Se, Te) monolayers: A first-principles research*”. Applied Surface Science, 579, (2022): 152017.
- [12]. B. P. Q. M et al., “*Tuning Excitonic Properties of Monochalcogenides via Design of Janus Structures*”. J Phys Chem C Nanomater Interfaces, 128, 29, (2024): 12164-12177.
- [13]. T. T. Thang et al., “*Superior transport in SiSb and GeSb monolayers: Promising 2D candidates for advanced logic devices*”, (2025): 114821.
- [14]. N. H. Linh et al., “*High-Efficiency Solar-To-Hydrogen Conversion and Complementary Thermoelectric Performance of GeSnS₂ Monolayer*”. Langmuir, 41, 42, (2025): 28646-28656.
- [15]. N. H. Linh et al., “*Revealing Photo-electrochemical, Piezoelectric, and Ferroelectric Properties of γ -SnTe Monolayer via Density Functional Theory*”. Computational Materials Science, 253, (2025): 113879.