

NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ VÀ ĐỘ LINH ĐỘNG CỦA HẠT TÀI TRONG VẬT LIỆU HAI CHIỀU JANUS SMoGeZ_2 ($Z = \text{N, P, As}$) BẰNG LÝ THUYẾT PHIẾM HÀM MẬT ĐỘ

Võ Quang Nhã¹, Lê Thị Ngọc Bảo², Đỗ Thị Minh Anh², Nguyễn Quang Cường³, Võ Thị Tuyết Vi^{4*}

¹Khoa Kỹ Thuật và Công nghệ, Đại học Huế, Huế, Việt Nam

²Khoa Điện, Điện tử và Công nghệ Vật liệu, Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế, Huế, Việt Nam

³Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam

⁴Khoa Cơ bản, Trường Đại học Y – Dược, Đại học Huế, Huế, Việt Nam

* Tác giả liên hệ Võ Thị Tuyết Vi <vothituyetvi@hueuni.edu.vn>

(Ngày nhận bài: 24-06-2025; Hoàn thành phản biện: 29-12-2025; Ngày chấp nhận đăng: 07-02-2026)

Tóm tắt. Việc chế tạo thành công đơn lớp hai chiều bất đối xứng Janus đã mở ra một hướng nghiên cứu mới đầy tiềm năng. Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ để nghiên cứu các đặc tính của đơn lớp Janus SMoGeZ_2 ($Z = \text{N, P, As}$), bao gồm độ ổn định, tính chất điện tử, tính chất cơ học và độ linh động của hạt tải. Các kết quả về năng lượng cố kết và phổ phonon đã khẳng định đơn lớp SMoGeZ_2 có cấu trúc ổn định. Các tính toán PBE và HSE06 đều cho thấy SMoGeZ_2 là chất bán dẫn với vùng cấm xiên. Bên cạnh đó, vật liệu này có tính chất cơ học đẳng hướng và độ bền cơ học cao. Kết quả tính toán chứng tỏ rằng độ linh động của hạt tải có đặc tính dị hướng. Điện tử có độ linh động trong khoảng từ 196,38 đến 333,29 $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, còn lỗ trống có độ linh động từ 82,39 đến 312,78 $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

Từ khoá: vật liệu hai chiều Janus, tính chất điện tử, độ linh động của hạt tải, lý thuyết phiếm hàm mật độ

Study on the electronic properties and carrier mobility in two-dimensional Janus material SMoGeZ_2 ($Z = \text{N, P, As}$) by using density functional theory

Vo Quang Nha¹, Le Thi Ngoc Bao², Do Thi Minh Anh², Nguyen Quang Cuong³, Vo Thi Tuyet Vi^{4*}

¹School of Engineering and Technology, Hue University, Hue, Viet Nam

²Faculty of Electrical, Electronics and Materials Engineering, University of Sciences, Hue University, Hue, Vietnam

³Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, Viet Nam

⁴Faculty of Basic Sciences, University of Medicine and Pharmacy, Hue University, Hue, Viet Nam

* Correspondence to Vo Thi Tuyet Vi <vothituyetvi@hueuni.edu.vn>

(Received: 24 June 2025; Revised: 29 December 2025; Accepted: 07 February 2026)

Abstract. The successful fabrication of asymmetric two-dimensional Janus monolayers has opened up a new potential research direction. In this paper, we use density functional theory to study the properties of Janus monolayer SMoGeZ_2 ($Z = \text{N, P, As}$), including stability, electronic properties, mechanical properties, and carrier mobility. The results of the cohesive energy and phonon spectrum

confirm that the SMoGeZ_2 monolayer has a stable structure. Both PBE and HSE06 calculations show that SMoGeZ_2 is a semiconductor with an indirect band gap. Additionally, this material exhibits isotropic mechanical properties and high mechanical strength. The calculation results demonstrate that the carrier mobility is anisotropic. Electron mobility ranges from 196.38 to $333.29 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, while hole mobility ranges from 82.39 to $312.78 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

Keywords: two-dimensional Janus materials, electronic properties, carrier mobility, density functional theory

1 Mở đầu

Vật liệu bất đối xứng Janus đã trở thành tâm điểm chú ý của giới nghiên cứu bởi vì chúng sở hữu những đặc tính hấp dẫn, rất phù hợp cho việc phát triển các thiết bị điện tử và quang điện tử với hiệu suất cao. Một cột mốc quan trọng đã đạt được vào năm 2017, khi đơn lớp hai chiều (2D) Janus đầu tiên là MoSSe được tổng hợp thành công bằng thực nghiệm, thông qua việc thay thế các nguyên tử S ở một mặt của đơn lớp MoS_2 bằng các nguyên tử Se [1, 2]. Khác với đơn lớp đối xứng, vật liệu Janus chứa một điện trường nội tại do tính đối xứng gương bị phá vỡ [3]. Bên cạnh sự phân tách spin Rashba, nhiều tính chất mới lạ khác được phát hiện trong cấu trúc Janus khiến chúng có tiềm năng to lớn cho các ứng dụng trong điện tử spin, từ tính, quang xúc tác [4–6]. Bên cạnh các đơn lớp Janus dichalcogenide, các nhà khoa học cũng đã công bố nhiều công trình nghiên cứu về vật liệu Janus monochalcogenide. Chẳng hạn, Yang và cộng sự đã nghiên cứu vật liệu Janus monochalcogenide nhóm III dựa trên phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ [7]. Tính ổn định của các đơn lớp này được xác nhận bằng cách tính toán phổ tán sắc phonon và mô phỏng động lực học phân tử nguyên lý đầu. So với đơn lớp GaX và InX ($X = \text{S}$ và Se), các cấu trúc Janus này có thể mở rộng phạm vi hấp thụ ánh sáng khả kiến do năng lượng vùng cấm nhỏ hơn. Hơn nữa, vị trí biên vùng phù hợp cho phép chúng trở thành vật liệu triển vọng trong ứng dụng quang xúc tác [7]. Ngoài ra, do cấu trúc không đối xứng, chúng ta có thể quan sát thấy sự khác biệt rõ rệt về mức chân không giữa hai bề

mặt của các cấu trúc Janus. Đặc biệt, đơn lớp Ga_2SSe có độ linh động điện tử vượt trội, lên đến $3,22 \times 10^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, khiến vật liệu này có tiềm năng lớn trong các ứng dụng điện tử và quang điện tử [8].

Trong thời gian gần đây, vật liệu 2D MoSi_2N_4 đã được chế tạo thành công bằng thực nghiệm [9]. Đơn lớp này bao gồm một lớp MoN_2 nằm xen giữa hai lớp Si-N, có độ bền cao ở điều kiện thường. MoSi_2N_4 là một vật liệu bán dẫn 2D có độ linh động của điện tử và lỗ trống vượt trội so với MoS_2 . Tiếp nối thành công này, họ vật liệu gồm bảy lớp có công thức hoá học MA_2Z_4 (M là kim loại chuyển tiếp, $A = \text{Si}$ và Ge và $Z = \text{N}$, P và As) đã được dự đoán bằng lý thuyết. Các vật liệu này có tính chất điện tử phong phú, bao gồm bán dẫn, kim loại và từ tính [10].

Dựa vào đơn lớp MoSi_2N_4 , Yu và cộng sự đã đề xuất hai cấu trúc Janus MoSiGeN_4 và WSiGeN_4 [11]. Các tính toán lý thuyết cho thấy hai đơn lớp này có độ ổn định tốt, có đặc tính bán dẫn với độ rộng vùng cấm thích hợp và khả năng hấp thụ quang mạnh trong quang phổ khả kiến. Kết quả cho thấy rằng việc xây dựng các cấu trúc Janus không chỉ thúc đẩy quá trình tách các cặp điện tử – lỗ trống quang sinh mà còn tạo ra cho chúng các đặc tính dị hướng. Một đặc điểm quan trọng là cả MoSiGeN_4 và WSiGeN_4 đều có hoạt động quang xúc tác vượt trội so với MoSi_2N_4 . Ngoài ra, Sibatov và đồng nghiệp đã đề xuất cấu trúc 2D bất đối xứng XMoSiN_2 ($X = \text{S}$, Se và Te) bằng cách loại bỏ SiN ra khỏi một mặt của MoSi_2N_4 và thay thế các nguyên tử N còn lại ở mặt đó bằng các nguyên tử chalcogen X [12]. Bằng

phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ, nhóm nghiên cứu đã khẳng định vật liệu XMoSiN_2 là các chất bán dẫn với độ bền cơ học cao. Điện trường nội tại trong các đơn lớp XMoSiN_2 có cường độ cao, phù hợp cho việc phân tách các hạt tải một cách hiệu quả dưới tác dụng của ánh sáng. Bên cạnh đó, đơn lớp Janus XMoSiN_2 còn có độ linh động hạt tải cực cao và hiệu suất nhiệt điện vượt trội [13].

Với xu hướng phát triển mạnh mẽ của vật liệu 2D và cấu trúc bất đối xứng Janus, trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu các đơn lớp Janus SMoGeZ_2 ($Z = \text{N, P}$ và As) bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Trước tiên, chúng tôi mô hình hoá cấu trúc, xác định các thông số mạng và kiểm tra độ ổn định của đơn lớp SMoGeZ_2 . Tiếp theo, chúng tôi nghiên cứu tính chất cơ học và tính chất điện tử của vật liệu Janus. Trong phần cuối cùng, độ linh động của hạt tải cũng được chúng tôi khảo sát và thảo luận một cách chi tiết.

2 Phương pháp

Toàn bộ tính toán trong bài báo này được thực hiện bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) với việc sử dụng gói mô phỏng Vienna *ab initio* simulation package (VASP) [14, 15]. Năng lượng trao đổi tương quan được mô tả theo phương pháp gần đúng gradient suy rộng (GGA) với phiếm hàm Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [16]. Năng lượng cắt của sóng phẳng được thiết lập là 500 eV. Ngưỡng hội tụ của năng lượng và lực trong quá trình tối ưu lần lượt là 10^{-6} eV và 10^{-3} eV/Å. Vùng Brillouin được chia lưới $12 \times 12 \times 1$ k -mesh theo sơ đồ Monkhorst-Pack [17]. Một miền chân không 20 Å được thiết lập dọc theo trục z để tránh tương tác giữa các lớp lân cận. Chúng tôi còn sử dụng phiếm hàm lai Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06) để khảo sát cấu trúc vùng năng lượng một cách chính xác hơn [18]. Mô phỏng động học phân tử nguyên lý đầu (AIMD)

với tập hợp chính tắc được thực hiện tại 300 K trong 7 ps với mỗi bước là 1 fs để khảo sát độ bền nhiệt. Lý thuyết nhiễu loạn phiếm hàm mật độ được sử dụng để tính toán phổ phonon. Chúng tôi sử dụng phương pháp thể biến dạng để nghiên cứu độ linh động của hạt tải [19].

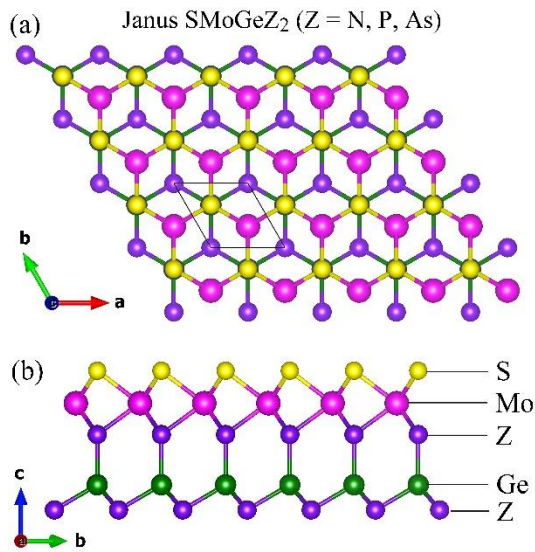
3 Kết quả và thảo luận

3.1 Mô hình hoá cấu trúc và độ ổn định

Trước tiên, chúng tôi xây dựng cấu trúc mạng tinh thể đã được tối ưu hóa của đơn lớp 2D Janus SMoGeZ_2 (Hình 1). Mạng tinh thể của đơn lớp SMoGeZ_2 có cấu trúc lục giác với ô đơn vị hình thoi khi nhìn từ trên xuống (Hình 1a). Khi nhìn từ phía bên, đơn lớp này hình thành bằng cách xếp chồng năm lớp con lên nhau theo thứ tự $Z\text{-Ge-Z-Mo-S}$ (Hình 1b). Vì hai bề mặt của đơn lớp hình thành từ các nguyên tử khác nhau nên cấu trúc của nó có sự bất đối xứng theo phương thẳng đứng. Sau khi tối ưu hóa cấu trúc, chúng tôi tính hằng số mạng và độ dài liên kết giữa các nguyên tử (Bảng 1). Chúng tôi nhận ra rằng hằng số mạng a có giá trị tăng dần khi nguyên tử pnictogen Z thay đổi từ N đến As. Cụ thể, hằng số mạng a của đơn lớp SMoGeN_2 là 3,05 Å, của SMoGeP_2 là 3,39 Å và của SMoGeAs_2 là 3,49 Å. Kết quả này có thể là do sự tăng dần bán kính nguyên tử từ N đến As. Đồng thời, chúng tôi nhận thấy rằng độ dài liên kết d giữa các nguyên tử cũng tăng theo quy luật này.

Bảng 1. Hằng số mạng a (Å), độ dài liên kết d (Å) và năng lượng cố kết E_c (eV/nguyên tử) của đơn lớp SMoGeZ_2

	a	$d_{\text{S-Mo}}$	$d_{\text{Mo-Z1}}$	$d_{\text{Z1-Ge}}$	$d_{\text{Ge-Z2}}$	E_c
SMoGeN_2	3,05	2,38	2,12	1,87	1,86	6,60
SMoGeP_2	3,39	2,46	2,43	2,29	2,27	7,80
SMoGeAs_2	3,49	2,48	2,53	2,41	2,37	6,20



Hình 1. Cấu trúc tinh thể của đơn lớp SMOGeZ₂ khi nhìn từ trên xuống (a) và khi nhìn từ phía bên (b)

Tiếp theo, chúng tôi đánh giá khả năng có thể tổng hợp được bằng thực nghiệm của các đơn lớp SMOGeZ₂ thông qua việc kiểm tra độ ổn định của chúng. Hình 2 trình bày phổ phonon tính toán trong vùng Brillouin thứ nhất của các vật liệu này. Kết quả thu được cho thấy rằng tổng cộng có 15 nhánh phonon bao gồm ba nhánh phonon âm và 12 nhánh phonon quang do ô đơn vị chứa năm nguyên tử (một nguyên tử S, một nguyên tử Mo, một nguyên tử Ge và hai nguyên tử pnictogen Z). Từ hình vẽ có thể thấy rằng các nhánh phonon âm nằm ở miền tần số thấp và các nhánh phonon quang nằm ở miền tần số cao hơn. Đồng thời, giữa phonon quang và phonon âm có sự xen phủ lên nhau, do đó có thể dẫn đến sự tán xạ quang – âm, làm ảnh hưởng đến độ dẫn nhiệt của đơn lớp SMOGeZ₂. Ngoài ra, chúng tôi quan sát thấy tất cả tần số trong vùng Brillouin đều có giá trị dương; điều này xác nhận các đơn lớp SMOGeZ₂ có độ ổn định động học cao. Bởi vì một khi phổ phonon chứa các tần số ảo ($\omega^2 < 0$) thì các lực phục hồi chống lại sự dịch chuyển của các nguyên tử sẽ bị triệt tiêu. Do đó, các tinh thể với phổ phonon chứa các tần số ảo sẽ có cấu trúc không bền vững về mặt động học.

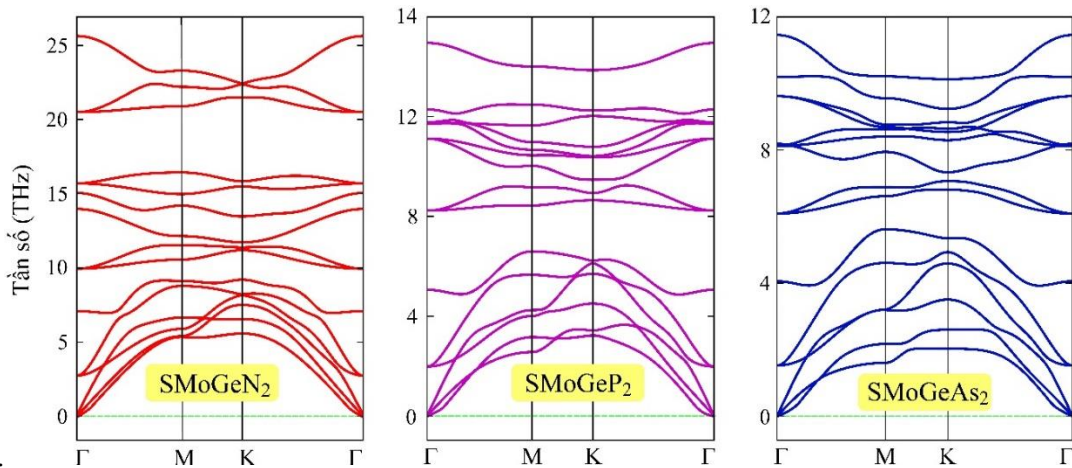
Ngoài ra, chúng tôi cũng kiểm tra độ ổn định nhiệt của các vật liệu này bằng cách thực hiện mô phỏng động học phân tử ở 300 K trong vòng 7 ps với mỗi bước là 1 fs. Hình 3 trình bày sự phụ thuộc của năng lượng toàn phần của tinh thể theo thời gian. Kết quả mô phỏng cho thấy rằng năng lượng toàn phần chỉ biến thiên trong một khoảng rất nhỏ. Ngoài ra, kết quả cũng cho thấy rằng cấu trúc tinh thể của các vật liệu vẫn bền vững sau thời gian mô phỏng. Chúng tôi nhận ra rằng các đơn lớp không bị biến dạng cũng như không xảy ra bất kỳ sự phá vỡ liên kết nào. Các kết quả này chứng tỏ Janus SMOGeZ₂ có độ bền nhiệt cao ở nhiệt độ phòng và do đó chúng có thể được tổng hợp bằng thực nghiệm ở các điều kiện thích hợp.

Bên cạnh độ ổn định nhiệt học và động học, chúng tôi còn xem xét độ bền liên kết giữa các nguyên tử bằng cách tính năng lượng cố kết của vật liệu. Năng lượng cố kết của đơn lớp SMOGeZ₂ được tính theo biểu thức (1) [12]:

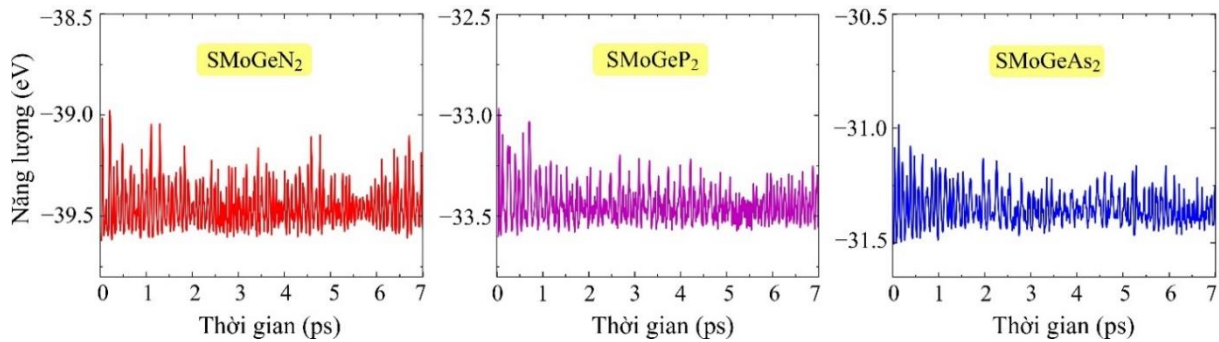
$$E_c = \frac{E_S + E_{Mo} + E_{Ge} + 2E_Z - E_{tot}}{5}, \quad (1)$$

trong đó E_{tot} là năng lượng toàn phần của tinh thể SMOGeZ₂; E_S , E_{Mo} , E_{Ge} và E_Z lần lượt là năng lượng đơn nguyên tử của nguyên tố S, Mo, Ge và pnictogen Z; 5 là tổng số nguyên tử trong một ô đơn vị.

Chúng tôi thu được năng lượng cố kết của hợp chất SMOGeN₂, SMOGeP₂ và SMOGeAs₂ lần lượt là 6,60, 7,80 và 6,20 eV/nguyên tử. Các giá trị này có thể so sánh với giá trị năng lượng cố kết của đơn lớp Janus có cấu trúc tương tự là XMoSiN₂ (X = S, Se và Te) [12] đã được công bố trước đây. Các kết quả thu được của chúng tôi chứng tỏ rằng vật liệu Janus SMOGeZ₂ có độ ổn định năng lượng cao, phù hợp với việc chế tạo thực nghiệm.



Hình 2. Phổ phonon của đơn lớp SMoGeZ₂



Hình 3. Kết quả mô phỏng AIMD đối với đơn lớp Janus SMoGeZ₂ ở nhiệt độ phòng

3.2 Tính chất cơ học

Chúng tôi tiếp tục nghiên cứu tính chất cơ học của các đơn lớp Janus SMoGeZ₂ bao gồm mô đun Young và tỉ số Poisson. Để xác định các đại lượng này, trước tiên chúng tôi tính các hệ số đàn hồi, cụ thể là C_{11} , C_{12} , C_{22} và C_{66} . Vì đơn lớp SMoGeZ₂ có cấu trúc lục giác nên $C_{11} = C_{22}$ và $C_{66} = (C_{11} - C_{22})/2$. Các giá trị thu được của C_{ij} được trình bày chi tiết ở Bảng 2.

Đối chiếu với tiêu chuẩn Born về độ bền cơ học ($C_{11}C_{22} - C_{12}^2 > 0$ và $C_{11} > 0$), chúng tôi nhận thấy rằng các hệ số đàn hồi C_{ij} của đơn lớp SMoGeZ₂ thỏa mãn các điều kiện trên. Kết quả này chứng tỏ các vật liệu có độ ổn định cơ học tốt. Sau đó, chúng tôi tính mô đun Young Y_{2D} và tỉ số Poisson P_{2D} thông qua các hệ số đàn hồi C_{ij} theo biểu thức (2)

$$Y_{2D} = \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2}{C_{11}}, \quad (2)$$

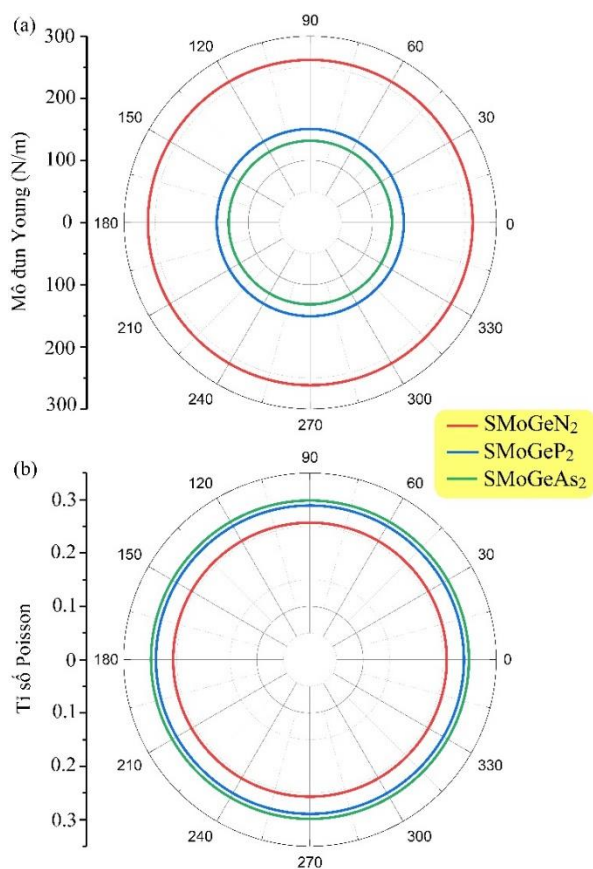
$$P_{2D} = \frac{C_{12}}{C_{11}}. \quad (3)$$

Bảng 2. Hệ số đàn hồi C_{ij} (N/m), mô đun Young Y_{2D} (N/m) và tỉ số Poisson P_{2D} của SMoGeZ₂

	C_{11}	C_{12}	C_{66}	Y_{2D}	P_{2D}
MoGeN ₂	280,08	71,95	104,07	261,60	0,26
SMoGeP ₂	164,40	47,55	58,42	150,64	0,29
SMoGeAs ₂	144,43	43,11	50,66	131,56	0,30

Hình 4 mô tả mô đun Young Y_{2D} và tỉ số Poisson P_{2D} của vật liệu Janus SMoGeZ₂ vẽ trong toạ độ cực. Dễ dàng thấy rằng đồ thị là những đường tròn hoàn hảo; điều này có nghĩa là mô đun Young và tỉ số Poisson là những đại lượng đẳng hướng. Kết quả tính toán cho thấy giá trị của Y_{2D} lần lượt là 261,60, 150,64 và 131,56 N/m đối với SMoGeN₂, SMoGeP₂ và SMoGeAs₂. Có thể thấy

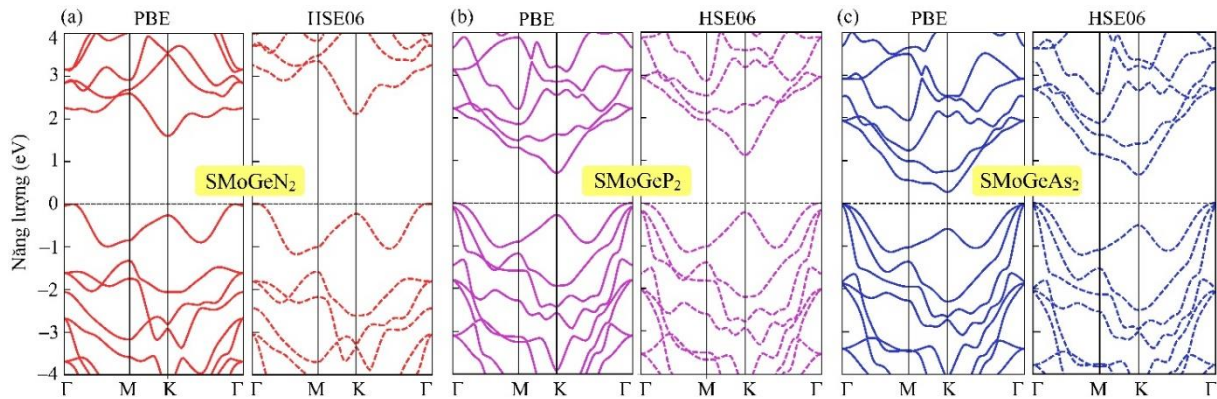
rằng mô đun Young có giá trị lớn nhất đối với đơn lớp SMOGeN₂ tương ứng với kích thước nhỏ hơn của nguyên tử N so với P và As. Ngoài ra, Y_{2D} của SMOGeZ₂ nhỏ hơn Y_{2D} của graphene (342 N/m) [20] nên các đơn lớp Janus này có độ linh hoạt cơ học cao hơn. Bên cạnh đó, tỉ số Poisson P_{2D} có giá trị lần lượt bằng 0,26, 0,29 và 0,30 đối với đơn lớp SMOGeN₂, SMOGeP₂ và SMOGeAs₂. Các giá trị này của P_{2D} tương đương với P_{2D} của cấu trúc 2D khác như MoSi₂P₄ (0,26) [21].



Hình 4. Mô đun Young (a) và tỉ số Poisson (b) của đơn lớp SMOGeZ₂

3.3 Tính chất điện tử

Sau khi đã xác nhận độ ổn định về mặt cấu trúc của các đơn lớp 2D SMOGeZ₂, chúng tôi tập trung nghiên cứu các tính chất điện tử của vật liệu để đề xuất cho các ứng dụng điện tử và quang điện tử. Chúng tôi sử dụng phép hàm trao đổi tương quan PBE để khảo sát cấu trúc vùng năng lượng điện tử của vật liệu SMOGeZ₂. Kết quả thu được của cấu trúc điện tử đối với các đơn lớp Janus được minh họa trên Hình 5. Dễ dàng thấy rằng cực tiểu vùng dẫn (CBM) nằm ở điểm K, trong khi đó cực đại vùng hóa trị (VBM) nằm ở điểm Γ . Điều đó có nghĩa rằng các hợp chất 2D SMOGeZ₂ là các vật liệu bán dẫn có vùng cấm xiên. Độ rộng vùng cấm có giá trị từ 0,26 đến 1,60 eV như đã được liệt kê trong Bảng 3. Các giá trị E_g này của SMOGeZ₂ tương đương với năng lượng vùng cấm của đơn lớp Janus ZrGeZ₃H (Z = N, P và As) đã được công bố, với E_g dao động từ 0,35 đến 1,99 eV [22]. Ngoài ra, chúng tôi còn dùng thêm phép hàm lai HSE06 để tính toán cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu vì các công trình nghiên cứu trước đây đã chứng minh rằng độ rộng vùng cấm tính theo HSE06 có giá trị phù hợp với giá trị đo bằng thực nghiệm. Hình 5 trình bày kết quả thu được đối với cấu trúc điện tử của các đơn lớp, tính theo phương pháp HSE06. Từ hình vẽ có thể thấy rằng cấu trúc vùng năng lượng được tính toán theo hai phương pháp có hình dáng tương tự nhau. Vị trí của CBM và VBM tính bằng phương pháp HSE06 cũng nằm lần lượt tại điểm K và Γ như trong phương pháp PBE. Tuy nhiên, một đặc điểm khác biệt giữa hai phương pháp này là giá trị của năng lượng vùng cấm. Phương pháp HSE06 cho giá trị E_g lớn hơn và chính xác hơn so với phương pháp PBE. Độ rộng vùng cấm của vật liệu SMOGeZ₂ có giá trị trong khoảng 0,66 đến 2,11 eV khi sử dụng phép hàm lai HSE06. Các số liệu này cũng đã được liệt kê cụ thể trong Bảng 3.



Hình 5. Cấu trúc vùng năng lượng điện tử của đơn lớp SMoGeZ₂

Bảng 3. Độ rộng vùng cấm E_g tính bằng PBE và HSE06, độ chênh lệch mức chân không $\Delta\Phi$, công thoát ở mặt Z và mặt S của SMoGeZ₂

	E_g^{PBE} (eV)	E_g^{HSE06} (eV)	$\Delta\Phi$ (eV)	Φ_1 (eV)	Φ_2 (eV)
SMoGeN ₂	1,60	2,11	0,21	5,71	5,50
SMoGeP ₂	0,71	1,12	0,65	5,11	5,76
SMoGeAs ₂	0,26	0,66	1,22	4,31	5,53

Tiếp theo, chúng tôi xác định mật độ trạng thái riêng phần (PDOS) để xem xét các thành phần tham gia vào việc tạo thành cấu trúc vùng năng lượng điện tử của vật liệu. Kết quả thu được của PDOS đối với các cấu trúc Janus SMoGeZ₂ được trình bày trên Hình 6. Từ đồ thị có thể thấy rằng vùng dẫn của cả ba đơn lớp hình thành chủ yếu từ orbital d của nguyên tử Mo và một phần nhỏ từ orbital p của nguyên tử S và pnictogen. Bên cạnh đó, orbital d của nguyên tử Mo và orbital p của nguyên tử S tham gia chính vào việc hình thành vùng hoá trị, trong khi đó orbital d của pnictogen có sự đóng góp nhỏ hơn.

Ngoài ra, chúng tôi còn xem xét khả năng thoát khỏi bề mặt vật liệu của điện tử thông qua việc tính toán công thoát điện tử. Công thoát điện tử được xác định bằng sự chênh lệch giữa mức chân không và mức Fermi theo biểu thức $\Phi = E_{vac} - E_F$. Đối với vật liệu có cấu trúc đối xứng, không có sự chênh lệch mức chân không giữa hai bề mặt nên công thoát điện tử sẽ như nhau tại hai mặt của vật liệu. Tuy nhiên, đối với các cấu trúc bất đối xứng, mức chân không ở hai bề mặt sẽ

khác nhau dẫn đến sự chênh lệch công thoát điện tử tại hai bề mặt của nó. Sự chênh lệch này phụ thuộc nhiều vào giá trị độ âm điện của các nguyên tử thành phần cấu tạo nên vật liệu đó. Chính đặc điểm này đã tạo nên một điện trường nội tại trong cấu trúc Janus, vì vậy trong quá trình khảo sát thể tính điện cần sử dụng hiệu chỉnh lưỡng cực. Hình 7 biểu diễn thể tính điện của các đơn lớp Janus SMoGeZ₂. Kết quả cho thấy có sự chênh lệch mức chân không giữa hai mặt của cấu trúc Janus; điều này phù hợp với tính bất đối xứng theo phương thẳng đứng của vật liệu. Các giá trị của sự chênh lệch mức chân không $\Delta\Phi$ và công thoát điện tử ở mặt S và mặt Z được trình bày cụ thể trong Bảng 3. Số liệu tính toán cho thấy công thoát ở mặt S thay đổi từ 5,50 đến 5,53 eV và công thoát ở mặt Z dao động từ 4,31 đến 5,71 eV. So với cấu trúc Janus khác chứa pnictogen đã được công bố trước đây, đơn lớp Janus ZrGeZ₃H có công thoát ở mặt H với giá trị từ 4,27 đến 4,68 eV, còn công thoát ở mặt Z có giá trị từ 4,77 đến 6,86 eV [22].

3.4 Độ linh động của hạt tải

Trong phần này, chúng tôi nghiên cứu độ linh động của điện tử và lỗ trống trong các đơn lớp Janus SMoGeZ₂. Đây là một trong những tham số quan trọng nhất của vật liệu bán dẫn, quyết định khả năng ứng dụng của vật liệu trong nhiều loại thiết bị điện tử. Bardeen và Shockley đã đưa ra phương pháp thể biến dạng để tính độ linh

động của hạt tải trong vật liệu 2D theo biểu thức (4) [19]:

$$\mu_{2D} = \frac{e\hbar^3 C_{2D}}{k_B T m^* \bar{m} E_d^2}, \quad (4)$$

trong đó e là điện tích của điện tử; \hbar là hằng số Planck rút gọn và k_B là hằng số Boltzmann; C_{2D} và E_d lần lượt là mô đun đàn hồi và hằng số thế biến dạng; m^* và $\bar{m} = \sqrt{m_x m_y}$ là khối lượng hiệu dụng và khối lượng hiệu dụng trung bình của hạt tải; T là nhiệt độ; trong các tính toán này, chúng tôi chọn $T = 300$ K.

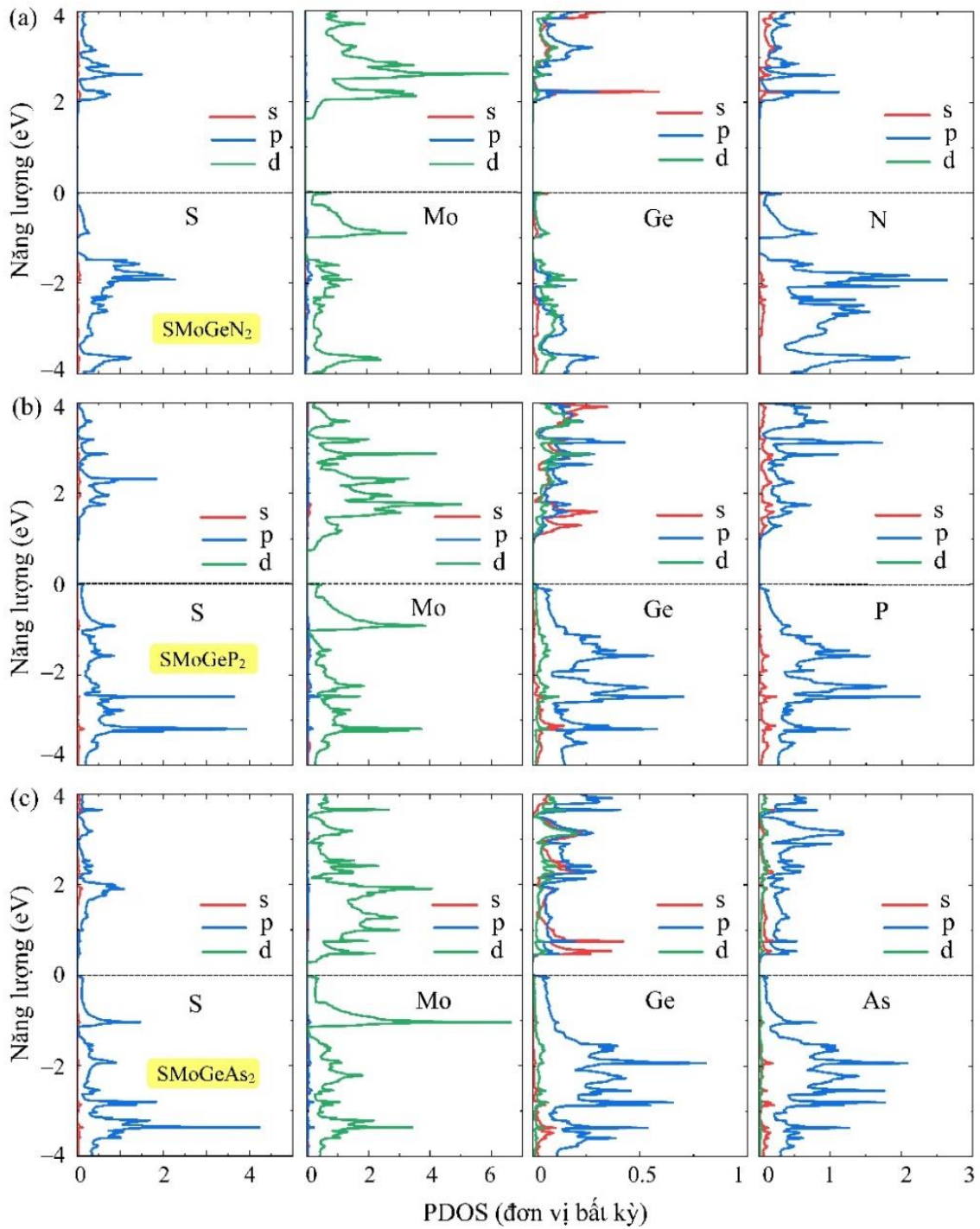
Mô đun đàn hồi C_{2D} được tính bằng cách khớp sự phụ thuộc của năng lượng toàn phần của tinh thể vào độ biến dạng theo hàm parabol $C_{2D} = \frac{1}{S_0} \frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon_{uni}^2}$, trong đó S_0 là diện tích ô đơn vị; E là năng lượng toàn phần của hệ; ϵ_{uni} là độ biến dạng dọc theo trục x hoặc trục y . Hình 8a trình bày sự phụ thuộc vào độ biến dạng trục của năng lượng toàn phần của đơn lớp SMOGeZ₂. Kết quả tính toán đối với mô đun đàn hồi của SMOGeZ₂ được trình bày trong Bảng 4. Chúng tôi thấy rằng C_{2D} có giá trị như nhau theo hai hướng x và y và nằm trong khoảng từ 206,28 đến 397,52 N/m.

Hằng số thế biến dạng E_d được tính theo công thức $E_d = \frac{\Delta E}{\epsilon_{uni}}$, trong đó ΔE là độ dịch chuyển của vị trí điểm cực trị (CBM đối với điện tử và VBM đối với lỗ trống) so với mức chân không dưới tác dụng của biến dạng. E_d được xác định bằng cách khớp các giá trị năng lượng phụ thuộc biến dạng của các vị trí cực trị theo hàm tuyến tính như biểu diễn trên Hình 8b. Kết quả tính toán đối với hằng số thế biến dạng E_d được liệt kê trong Bảng 4.

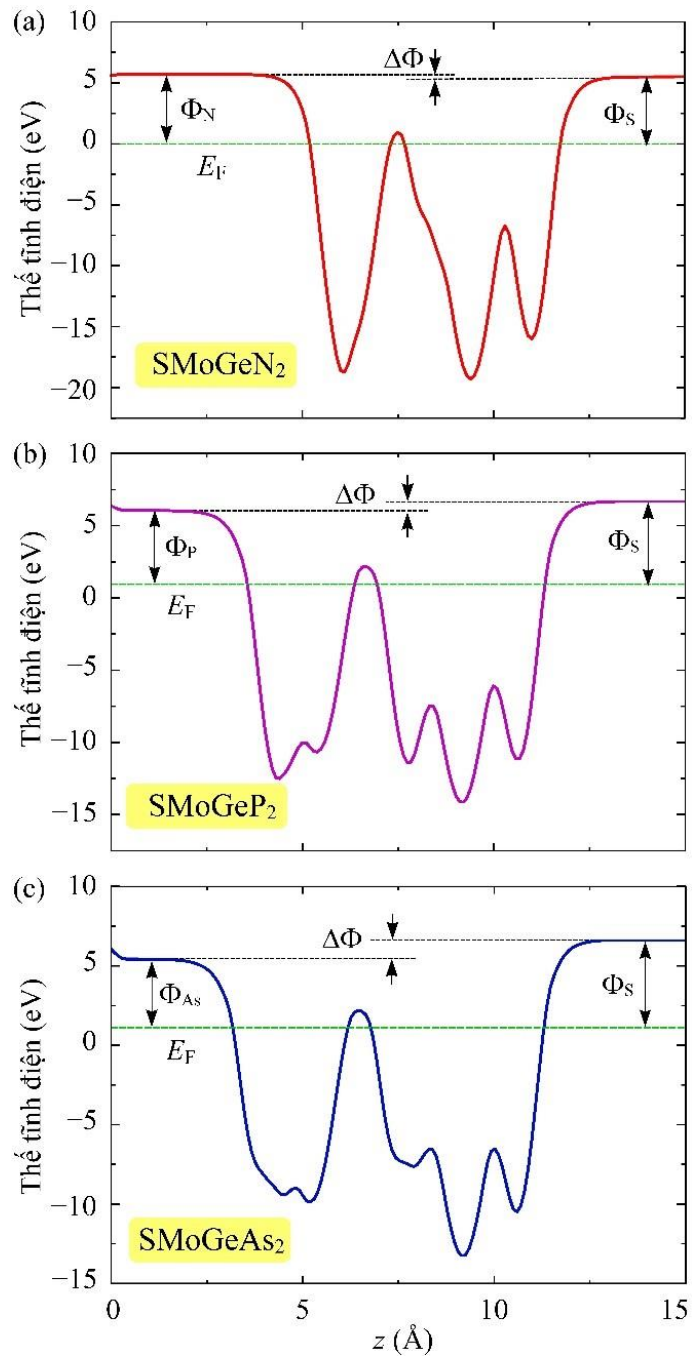
Khối lượng hiệu dụng của hạt tải được xác định bằng cách khớp các giá trị năng lượng gần điểm cực trị theo hàm parabol $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right|$,

trong đó $E(k)$ là năng lượng tại vectơ sóng k . Các giá trị thu được đối với khối lượng hiệu dụng của hạt tải trong SMOGeZ₂ được trình bày trong Bảng 4. Dễ dàng thấy rằng khối lượng hiệu dụng của điện tử hầu như bằng nhau theo hai hướng truyền dẫn x và y , còn khối lượng hiệu dụng của lỗ trống trong SMOGeN₂ và SMOGeAs₂ theo hướng y lớn hơn theo hướng x . Bên cạnh đó, khối lượng của điện tử nhỏ hơn khối lượng của lỗ trống; điều này có thể khiến cho điện tử phản ứng nhanh hơn với trường ngoài.

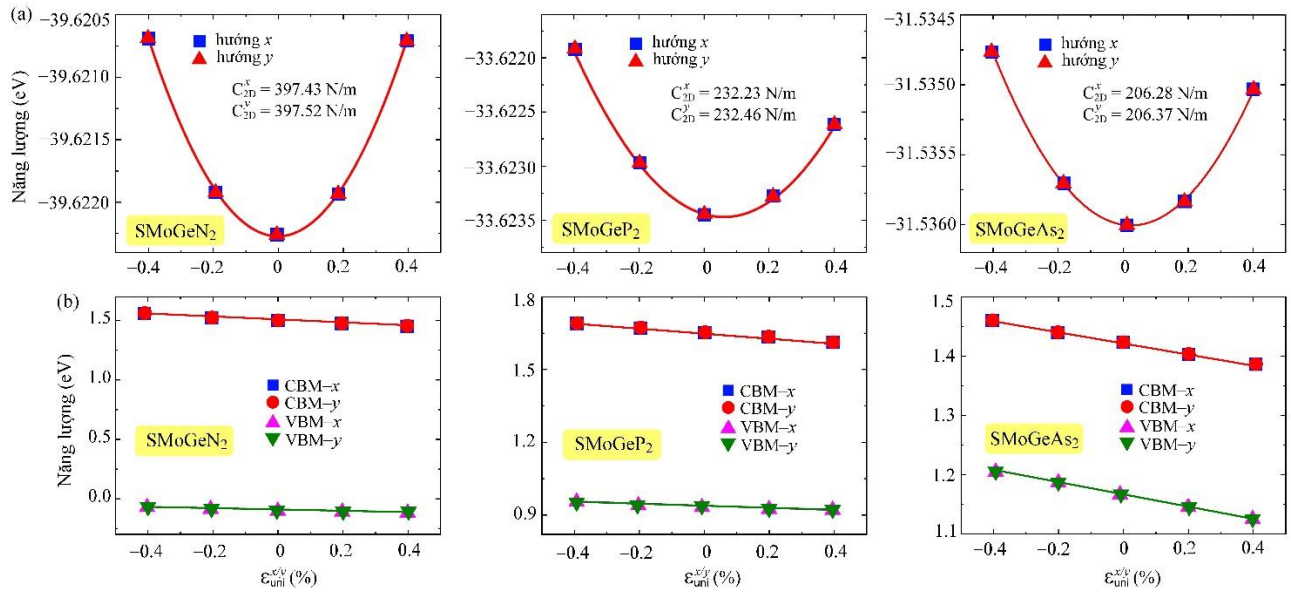
Sau cùng, dựa vào các tham số đã tính ở trên, chúng tôi đã xác định độ linh động của hạt tải trong SMOGeZ₂ (Bảng 4). Số liệu cho thấy điện tử có độ linh động trong khoảng từ 196,38 đến 333,29 cm²·V⁻¹·s⁻¹, còn lỗ trống có độ linh động từ 82,39 đến 312,78 cm²·V⁻¹·s⁻¹. Các giá trị này chứng tỏ rằng độ linh động của hạt tải trong SMOGeZ₂ khá cao, gần bằng với độ linh động hạt tải trong đơn lớp Janus tương tự như XWGeN₂ (X = O, S, Se và Te) [23]. Cụ thể, độ linh động của điện tử và lỗ trống trong Janus TeWGeN₂ lần lượt 192,89 và 300,29 cm²·V⁻¹·s⁻¹, trong khi đó Janus OWGeN₂ có độ linh động của điện tử và lỗ trống tương ứng là 311,70 và 52,74 cm²·V⁻¹·s⁻¹ [23]. Hơn nữa, giá trị độ linh động của hạt tải theo hướng x khác với theo hướng y , nghĩa là độ linh động của hạt tải có đặc tính dị hướng. Các kết quả thu được cho thấy rằng đơn lớp Janus SMOGeZ₂ có triển vọng ứng dụng trong các thiết bị điện tử nano



Hình 6. PDOS của các đơn lớp SMOGeZ₂



Hình 7. Thế tĩnh điện của đơn lớp SMOGeZ₂



Hình 8. Sự phụ thuộc của năng lượng toàn phần (a) và vị trí CBM/VBM (b) vào độ biến dạng dọc theo trục $x(y)$ trong đơn lớp SMoGeZ_2

Bảng 4. Khối lượng hiệu dụng của hạt tải m^* (m_0), mô đun đàn hồi C_{2D} (N/m), hằng số thế biến dạng E_d (eV) và độ linh động hạt tải μ ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) dọc theo hướng $x(y)$ của SMoGeZ_2 . m_0 là khối lượng của điện tử tự do

		m_x^*	m_y^*	C_{2D}^x	C_{2D}^y	E_d^x	E_d^y	μ_x	μ_y
Điện tử	SMoGeN_2	0,52	0,53	397,43	397,52	-12,44	-12,44	200,11	196,38
	SMoGeP_2	0,37	0,37	232,23	232,46	-10,41	-10,41	332,96	333,29
	SMoGeAs_2	0,44	0,46	206,28	206,37	-9,37	-9,37	252,47	241,59
Lỗ trống	SMoGeN_2	0,73	1,83	397,43	397,52	-5,58	-5,58	312,78	128,39
	SMoGeP_2	1,74	1,74	232,23	232,46	-4,45	-4,13	82,39	95,74
	SMoGeAs_2	0,48	0,51	206,28	206,37	-10,37	-10,37	171,81	161,77

4 Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã mô hình hoá và nghiên cứu độ ổn định, tính chất điện tử, tính chất cơ học và độ linh động của hạt tải trong đơn lớp hai chiều Janus SMoGeZ_2 ($Z = \text{N, P}$ và As) bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Các kết quả về năng lượng cố kết, mô phỏng động học phân tử và phổ phonon cho thấy đơn lớp SMoGeZ_2 có cấu trúc ổn định. Bên cạnh đó, SMoGeZ_2 có tính chất cơ học đẳng hướng và độ bền cơ học cao. Ở trạng thái cơ bản, cả hai phương pháp PBE và HSE06 đều cho thấy đơn lớp SMoGeZ_2 là vật liệu bán dẫn có vùng cấm gián. Ngoài ra, độ linh động của hạt tải trong SMoGeZ_2 có đặc tính dị hướng. Kết quả tính toán của chúng

tôi cho thấy rằng điện tử và lỗ trống có độ linh động khá lớn. Với các kết quả nghiên cứu này, đơn lớp SMoGeZ_2 có tiềm năng ứng dụng trong lĩnh vực điện tử.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được Đại học Huế tài trợ trong đề tài mã số DHH2024-18-03.

Tài liệu tham khảo

- Zhang J, Jia S, Kholmanov I, Dong L, Er D, Chen W, et al. Janus monolayer transition-metal dichalcogenides. *ACS nano*. 2017;11(8):8192-8198.
- Lu AY, Zhu H, Xiao J, Chuu CP, Han Y, Chiu MH, et al. Janus monolayers of transition metal

- dichalcogenides. *Nature nanotechnology*. 2017; 12(8):744-749.
3. Yao QF, Cai J, Tong WY, Gong SJ, Wang JQ, Wan X, et al. Manipulation of the large Rashba spin splitting in polar two-dimensional transition-metal dichalcogenides. *Physical review B*. 2017;95(16): 165401.
 4. Yuan S, Ding H, Wang J, Chen Z. Extraordinary Magnetoresistance in Janus Monolayer MoTeB₂: A Theoretical Prediction. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2018;122(49):28423-28430.
 5. Ju L, Bie M, Tang X, Shang J, Kou L. Janus WSSe monolayer: an excellent photocatalyst for overall water splitting. *ACS applied materials & interfaces*. 2020;12(26):29335-29343.
 6. Chakraborty S, Raj S. Anisotropic Rashba effect in two-dimensional non-Janus transition-metal dichalcogenide, MSSe (M= Mo, W) alloys. *Physical Review B*. 2023;107(3):035420.
 7. Yang H, Zhao P, Ma Y, Lv X, Huang B, Dai Y. Janus single-layer group-III monochalcogenides: a promising visible-light photocatalyst. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2019;52(45):455303.
 8. Tran TA, Hai LS, Vi VT, Nguyen CQ, Nghiem NT, Thao LT, et al. Janus structures of the C 2h polymorph of gallium monochalcogenides: first-principles examination of Ga₂XY (X/Y= S, Se, Te) monolayers. *RSC advances*. 2023;13(18):12153-12160.
 9. Hong YL, Liu Z, Wang L, Zhou T, Ma W, Xu C, et al. Chemical vapor deposition of layered two-dimensional MoSi₂N₄ materials. *Science*. 2020; 369(6504):670-674.
 10. Wang L, Shi Y, Liu M, Zhang A, Hong YL, Li R, et al. Intercalated architecture of MA₂Z₄ family layered van der Waals materials with emerging topological, magnetic and superconducting properties. *Nature communications*. 2021;12(1): 2361.
 11. Yu Y, Zhou J, Guo Z, Sun Z. Novel two-dimensional Janus MoSiGeN₄ and WSiGeN₄ as highly efficient photocatalysts for spontaneous overall water splitting. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2021;13(24):28090-28097.
 12. Sibatov RT, Meftakhutdinov RM, Kochaev AI. Asymmetric XMoSiN₂ (X= S, Se, Te) monolayers as novel promising 2D materials for nanoelectronics and photovoltaics. *Applied Surface Science*. 2022;585:152465.
 13. Ding CH, Duan ZF, Ding ZK, Pan H, Wang J, Xiao WH, et al. XMoSiN₂ (X= S, Se, Te): A novel 2D Janus semiconductor with ultra-high carrier mobility and excellent thermoelectric performance. *Europhysics Letters*. 2023;143(1): 16002.
 14. Kresse G, Furthmüller J. "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set". *Physical review B*. 1996;54(16):11169.
 15. Kresse G, Furthmüller J. "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set". *Computational materials science*. 1996; 6(1):15-50.
 16. Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*. 1996;77(18):3865.
 17. Monkhorst HJ, Pack JD. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*. 1976;13:5188-5192.
 18. Heyd J, Scuseria GE, Ernzerhof M. "Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential". *The Journal of chemical physics*. 2003;118(18):8207-8215.
 19. Bardeen J, Shockley W. Deformation Potentials and Mobilities in Non-Polar Crystals. *Physical Review*. 1950;80:72-80.
 20. Peng Q, Liang C, Ji W, De S. A theoretical analysis of the effect of the hydrogenation of graphene to graphane on its mechanical properties. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2013;15(6):2003-2011.
 21. Yao H, Zhang C, Wang Q, Li J, Yu Y, Xu F, et al. Novel two-dimensional layered MoSi₂Z₄ (Z= P, As): New promising optoelectronic materials. *Nanomaterials*. 2021;11(3):559.
 22. Vu TV, Vi VT, Hiep NT, Hoang KV, Kartamyshev AI, Phuc HV, et al. A first-principles prediction of novel Janus ZrGeZ₃H (Z= N, P, and As) monolayers: Raman active modes, piezoelectric responses, electronic properties, and carrier mobility. *RSC advances*. 2024;14(30):21982-21990.

23. Vu TV, Phuc HV, Nguyen CV, Vi VT, Kartamyshev AI, Hieu NN. Rashba-type spin splitting and transport properties of novel Janus $XWGeN_2$ ($X= O, S, Se, Te$) monolayers. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2022;24(27):16512-16521.