

# MÔ PHỎNG KÉO MÀNG VẬT LIỆU HAI CHIỀU ĐƠN NGUYÊN TỬ CẤU TRÚC NẾP GẤP

Lê Minh Quý<sup>a</sup>, Nguyễn Hữu Tú<sup>b,\*</sup>, Đỗ Thị Kim Liên<sup>c</sup>, Bùi Thanh Lâm<sup>d</sup>

<sup>a</sup>Khoa Cơ điện tử, Trường Cơ khí, Đại học Bách Khoa Hà Nội,  
1 đường Đại Cồ Việt, quận Hai Bà Trưng, Hà Nội, Việt Nam

<sup>b</sup>Khoa Khoa học Cơ bản, Học viện Hậu cần, Ngọc Thụy, Long Biên, Hà Nội, Việt Nam

<sup>c</sup>Khoa Cơ Khí-Xây dựng, Trường Đại Học Công Nghiệp Việt Hưng, Sơn Tây, Hà Nội, Việt Nam

<sup>d</sup>Khoa Cơ Khí, Đại Học Công Nghiệp Hà Nội, Việt Nam

Nhận ngày 30/12/2021, Sửa xong 06/3/2022, Chấp nhận đăng 04/5/2022

## Tóm tắt

Cơ tính (mô đun đàn hồi, hệ số Poisson, ứng suất kéo đứt và biến dạng kéo đứt) của 4 vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp (two-dimensional puckered hexagonal materials) gồm black phosphorus (p-P), p-arsenene (p-As), p-antimonene (p-Sb), p-bismuthene (p-Bi) được xác định bằng phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử với hàm thế Stillinger-Weber. Mô đun đàn hồi hai chiều của 4 vật liệu trên khi kéo theo phương armchair có giá trị trong khoảng 10,2 - 23,6 N/m và 26,2 - 89,3 N/m khi kéo theo phương zigzag. Hệ số Poisson có giá trị trong khoảng từ 0,003 đến 0,58 khi kéo theo cả hai phương. Ứng suất hai chiều lớn nhất trong khoảng 2,35 - 4,11 N/m khi kéo theo phương armchair, trong khoảng 4,24 - 7,0 N/m khi kéo theo phương zigzag. Kết quả đó là cơ sở để sử dụng các vật liệu này trong thực tế.

*Từ khóa:* vật liệu hai chiều; mô phỏng nguyên tử; cơ tính; Stillinger-Weber; nếp gấp.

ATOMISTIC SIMULATION OF TENSILE TESTS OF TWO-DIMENSIONAL PUCKERED HEXAGONAL MATERIALS WITH MONO-ELEMENTS

## Abstract

Mechanical properties of 4 two-dimensional (2D) puckered hexagonal materials including black phosphorus (p-P), p-arsenene (p-As), p-antimonene (p-Sb), p-bismuthene (p-Bi) are estimated by atomic-scale finite element method with Stillinger-Weber potentials. Their 2D Young's moduli appear in the range from 10,2 to 23,6 N/m (26,2 - 89,3 N/m) under tension along the armchair (zigzag direction). Poisson's ratio is between 0,003 and 0,58. Maximum 2D stresses are in the range from 2,35 through 4,11 N/m and 4,24 - 7,0 N/m under tension along the armchair and zigzag directions, respectively. Results are useful for the design and application of these materials.

*Keywords:* 2D materials; atomic simulation; mechanical properties; Stillinger-Weber; puckered.

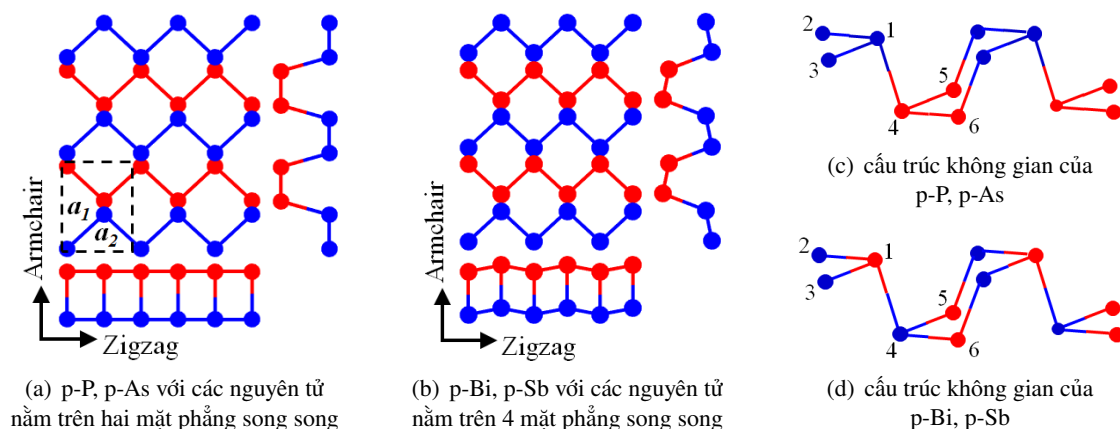
[https://doi.org/10.31814/stce.huce\(nuce\)2022-16\(2V\)-04](https://doi.org/10.31814/stce.huce(nuce)2022-16(2V)-04) © 2022 Trường Đại học Xây dựng Hà Nội (ĐHXDHN)

## 1. Giới thiệu

Vật liệu hai chiều có cấu trúc hình lục giác có thể do một nguyên tố (ví dụ graphene [1, 2], black phosphorus [3–5]) hay 2 nguyên tố (BN [6], AlN [7–9], ...) tạo thành. Mạng vật liệu hai chiều có thể ở dạng lục giác phẳng như graphene [1, 2], BN [6], AlN [7–9]; màng lục giác low - buckled như silicene [10–12], blue phosphorus [13]; và màng nếp gấp như p-P [3–5], p-As [14], p-Sb [14] hay

\*Tác giả đại diện. Địa chỉ e-mail: [huutu123456@gmail.com](mailto:huutu123456@gmail.com) (Tú, N. H.)

p-Bi [15]. Với màng lục giác nếp gấp, các nguyên tử có thể nằm trên 2 mặt phẳng như p-P, p-As (Hình 1(a)); hoặc trên 4 mặt phẳng như p-Sb và p-Bi (Hình 1(b)) [16]. Cấu trúc không gian của các vật liệu này được thể hiện trên Hình 1(c) và 1(d) [16], Hình 1(c) biểu diễn cấu tạo màng lục giác của vật liệu đơn nguyên tử nằm trên hai mặt phẳng song song, Hình 1d biểu diễn màng lục giác của vật liệu đơn nguyên tử phân bố trên 4 mặt phẳng song song. Thông số mạng theo ba phương của 4 vật liệu trong Bảng 1.



Hình 1. Cấu trúc vật liệu hai chiều dạng nếp gấp

Bảng 1. Thông số hình học của 4 vật liệu hai chiều có cấu trúc nếp gấp

| STT | Vật liệu | $a_1, \text{Å}$ | $a_2, \text{Å}$ | $a_3, \text{Å}$ | Tài liệu tham khảo |
|-----|----------|-----------------|-----------------|-----------------|--------------------|
| 1   | p-P      | 4,422           | 3,348           | 10,587          | [16]               |
| 2   | p-As     | 4,77            | 3,68            | 11,11           | [16]               |
| 3   | p-Sb     | 4,73            | 4,36            | 11,11           | [16]               |
| 4   | p-Bi     | 4,94            | 4,55            | 11,81           | [16]               |

Hiện tại, màng vật liệu hai chiều được ứng dụng trong nhiều lĩnh vực khác nhau như: y học [17], thiết bị năng lượng [18], thiết bị điện tử [19], ... Do đó, việc tính toán, mô phỏng xác định thông số cơ học của chúng sẽ là cơ sở để ứng dụng chúng trong thực tế. Phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử cho kết quả đáng tin cậy, đảm bảo độ chính xác (nghiên cứu [20–23]). Phương pháp này sử dụng nhiều dạng hàm thể khác nhau: hàm thể Stillinger-Weber [24], hàm thể Tersoff [25], hàm thể điều hòa [26], ...

## 2. Phương pháp mô phỏng số

### 2.1. Hàm thể

Với 4 vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp (p-P, p-As, p-Sb, p-Bi), thông số hàm thể Stillinger-Weber đã được xác định, chỉ ra sự đúng đắn và phù hợp trong [16]. Do đó, Nghiên cứu này sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử với hàm thể Stillinger-Weber [24] để tiến hành mô phỏng kéo màng nguyên của 4 vật liệu nêu trên.

Hàm thế Stillinger-Weber để xác định thế năng tương tác nguyên tử được tính như sau:

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

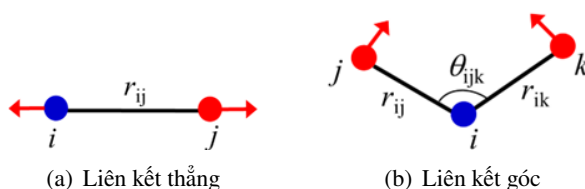
$$E_r = \sum_{i=1}^m V_2 \quad (2)$$

$$E_\theta = \sum_{i=1}^n V_3 \quad (3)$$

$$V_2 = Ae^{\rho/(r_{ij}-r_{\max})} (B/r_{ij}^4 - 1) \quad (4)$$

$$V_3 = Ke^{\rho_{ij}/(r_{ij}-r_{\max ij})+\rho_{ik}/(r_{ik}-r_{\max ik})} (\cos(\theta_{ijk}) - \cos(\theta_0))^2 \quad (5)$$

trong đó,  $E$  là tổng năng lượng liên kết nguyên tử;  $E_r$  (eV) là tổng năng lượng liên kết thẳng giữa hai nguyên tử của màng;  $E_\theta$  (eV) là tổng năng lượng liên kết góc của 3 nguyên tử trên toàn bộ màng;  $V_2$  (eV) là năng lượng liên kết thẳng của hai nguyên tử liền kề;  $V_3$  (eV) là năng lượng liên kết của 3 nguyên tử liền kề;  $m, n$  là số liên kết thẳng và liên kết góc trong mô hình tính;  $A$  (eV),  $K$  (eV) là hệ số vật liệu, phụ thuộc vào từng loại vật liệu;  $\rho$ (Å),  $B$ (Å<sup>4</sup>),  $\rho_{ij}$ (Å),  $\rho_{ik}$ (Å),  $\theta_0$ (độ) là những thông số hình học của vật liệu;  $r_{ij}$ (Å),  $r_{ik}$ (Å) là chiều dài liên kết giữa hai nguyên tử  $i$  và  $j$ ; giữa nguyên tử  $i$  và  $k$ ;  $\theta_{ijk}$  (độ) là góc liên kết giữa ba nguyên tử  $i, j, k$  (trong đó  $i$  là nguyên tử ở giữa) (Hình 2). Các thông số này được tổng hợp trong Bảng 2 và Bảng 3.



Hình 2. Mô hình phân tử khi sử dụng hàm thế Stillinger-Weber

Bảng 2. Thông số hàm thế Stillinger-Weber cho liên kết thẳng của 4 vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp.  
Công thức tính thế năng tương tác  $V_2 = Ae^{\rho/(r_{ij}-r_{\max})} (B/r_{ij}^4 - 1)$  [16]

| STT | Vật liệu |          | A, eV  | $\rho$ , Å | B, Å <sup>4</sup> | $r_{\min}$ , Å | $r_{\max}$ , Å | Tài liệu tham khảo |
|-----|----------|----------|--------|------------|-------------------|----------------|----------------|--------------------|
| 1   | p-P      | $r_{12}$ | 4,172  | 0,551      | 12,543            | 0              | 2,793          | [16]               |
|     |          | $r_{14}$ | 4,976  | 0,685      | 13,044            | 0              | 2,882          | [16]               |
| 2   | p-As     | $r_{12}$ | 3,180  | 0,455      | 19,782            | 0              | 3,042          | [16]               |
|     |          | $r_{14}$ | 4,477  | 0,737      | 19,375            | 0              | 3,173          | [16]               |
| 3   | p-Sb     | $r_{12}$ | 1,750  | 0,122      | 37,867            | 0              | 3,250          | [16]               |
|     |          | $r_{14}$ | 11,221 | 1,843      | 33,923            | 0              | 4,020          | [16]               |
| 4   | p-Bi     | $r_{12}$ | 1,777  | 0,109      | 46,775            | 0              | 3,401          | [16]               |
|     |          | $r_{14}$ | 12,322 | 1,872      | 45,998            | 0              | 4,301          | [16]               |

Bảng 3. Thông số hàm thế Stillinger–Weber cho liên kết góc của 4 vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp với công thức tính thế năng tương tác  $V_3 = Ke^{[\rho_1/(r_{12}-r_{max\ 12})+\rho_1/(r_{13}-r_{max\ 13})]}(\cos(\theta) - \cos(\theta_0))^2$  [16] (thứ tự các nguyên tử như trên Hình 1(c), 1(d))

| STT | Vật liệu |                | $K$ , eV | $\theta_0$ , độ | $\rho_1$ , Å | $\rho_2$ , 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 | Tài liệu tham khảo |
|-----|----------|----------------|----------|-----------------|--------------|--------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|--------------------|
| 1   | p-P      | $\theta_{123}$ | 25,965   | 96,581          | 0,551        | 0,551        | 0                 | 2,793             | 0                 | 2,793             | 2,793             | 3,365             | [16]               |
|     |          | $\theta_{134}$ | 29,932   | 102,307         | 0,551        | 0,685        | 0                 | 2,793             | 0                 | 2,882             | 2,882             | 3,772             |                    |
| 2   | p-As     | $\theta_{123}$ | 20,597   | 94,400          | 0,455        | 0,455        | 0                 | 3,042             | 0                 | 3,042             | 3,628             | 4,225             | [16]               |
|     |          | $\theta_{134}$ | 26,831   | 100,692         | 0,455        | 0,737        | 0                 | 3,042             | 0                 | 3,173             | 3,173             | 4,149             |                    |
| 3   | p-Sb     | $\theta_{123}$ | 7,435    | 95,380          | 0,122        | 0,122        | 0                 | 3,250             | 0                 | 3,250             | 0                 | 4,545             | [16]               |
|     |          | $\theta_{134}$ | 45,054   | 88,380          | 1,843        | 0,122        | 0                 | 4,020             | 0                 | 3,250             | 0                 | 5,715             |                    |
|     |          | $\theta_{415}$ | 47,338   | 102,800         | 1,843        | 0,122        | 0                 | 4,020             | 0                 | 3,250             | 0                 | 6,105             |                    |
| 4   | p-Bi     | $\theta_{123}$ | 2,408    | 94,018          | 0,109        | 0,109        | 0                 | 3,401             | 0                 | 3,401             | 0                 | 4,745             | [16]               |
|     |          | $\theta_{134}$ | 28,842   | 86,486          | 1,872        | 0,109        | 0                 | 4,301             | 0                 | 3,401             | 0                 | 5,982             |                    |
|     |          | $\theta_{415}$ | 30,388   | 103,491         | 1,872        | 0,109        | 0                 | 4,301             | 0                 | 3,401             | 0                 | 6,473             |                    |

## 2.2. Phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử

Với mỗi màng vật liệu hai chiều, nếu gọi  $\mathbf{X}_i$  và  $\mathbf{u}_i$  là tọa độ ban đầu và chuyển vị của nguyên tử thứ  $i$ ; khi đó, tọa độ của nguyên tử sau khi có biến dạng là:  $\mathbf{x}_i = \mathbf{X}_i + \mathbf{u}_i$ . Thế năng tương tác nguyên tử của toàn bộ màng được xác định là một hàm phụ thuộc vào tọa độ của mỗi nguyên tử trên màng:

$$E = E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \tag{6}$$

trong đó  $N$  là tổng số nguyên tử có trong màng.

Thế năng của ngoại lực tác dụng được tính:

$$E_{ext} = \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i \mathbf{u}_i \tag{7}$$

trong đó  $\mathbf{f}_i$  là ngoại lực tác dụng lên nguyên tử thứ  $i$ ,  $\mathbf{u}_i$  là chuyển vị của nguyên tử thứ  $i$  tương ứng. Khi đó, thế năng toàn phần của hệ là:

$$\Pi = E - E_{ext} \tag{8}$$

Từ nguyên lý cực tiểu thế năng, hệ cân bằng khi thế năng toàn phần của hệ đạt giá trị nhỏ nhất. Theo đó, đạo hàm bậc nhất của thế năng toàn phần sẽ bằng không.

$$\frac{\partial \Pi}{\partial \mathbf{u}_i} = 0; \quad i = 1 \div N \tag{9}$$

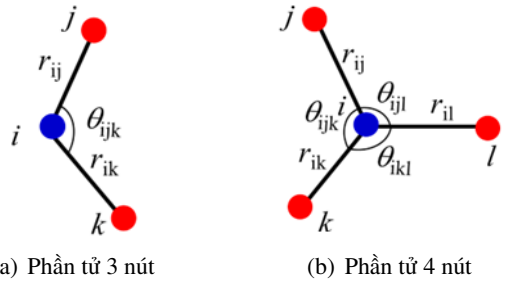
Chuyển vị của nguyên tử được tính toán khi chúng ta giải hệ phương trình (9). Ở đây, sử dụng phương pháp lặp Newton–Raphson để giải hệ phương trình (9), cách sử dụng phương pháp này đã thể hiện rõ trong [20–23], khi đó phương trình có dạng:

$$\mathbf{K}^{(k)} \cdot \mathbf{u}^{(k)} = \mathbf{F}^{(k)} \tag{10}$$

với

$$\mathbf{K}_{ij}^k = \frac{\partial^2 \Pi^{(k)}}{\partial \mathbf{u}_i \partial \mathbf{u}_j}; \quad \mathbf{F}_i^{(k)} = -\frac{\partial \Pi^{(k)}}{\partial \mathbf{u}_i} = \mathbf{f}_i - \frac{\partial E^{(k)}}{\partial \mathbf{u}_i} \tag{11}$$

Các phương trình (10) và (11) là phương trình cơ bản của phần tử hữu hạn. Với  $\mathbf{K}^{(k)}$  là ma trận độ cứng tổng thể,  $\mathbf{u}^{(k)}$  là véc tơ chuyển vị nút và  $\mathbf{F}^{(k)}$  là véc tơ lực nút. Nếu coi mỗi nguyên tử như một nút thì chuyển vị của nguyên tử là chuyển vị của nút. Do cấu tạo của màng lục giác nếp gấp (Hình 1), trên màng hình thành hai dạng phần tử: phần tử 3 nút và phần tử 4 nút (Hình 3). Do mỗi nguyên tử có thể di chuyển theo 3 phương nên sử dụng công thức (11) để tính ma trận độ cứng của mỗi phần tử có kích thước  $[\mathbf{K}_{Val}]_{9 \times 9}^{(e)}$ ;  $[\mathbf{K}_{Imp}]_{12 \times 12}^{(e)}$ , tương ứng với phần tử 3 và 4 nút. Từ đó, tính ma trận độ cứng tổng thể  $[\mathbf{K}]_{3N \times 3N}^{(k)}$  là ma trận hợp khối của các ma trận độ cứng phần tử. 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

### 3. Kết quả mô phỏng kéo màng nguyên

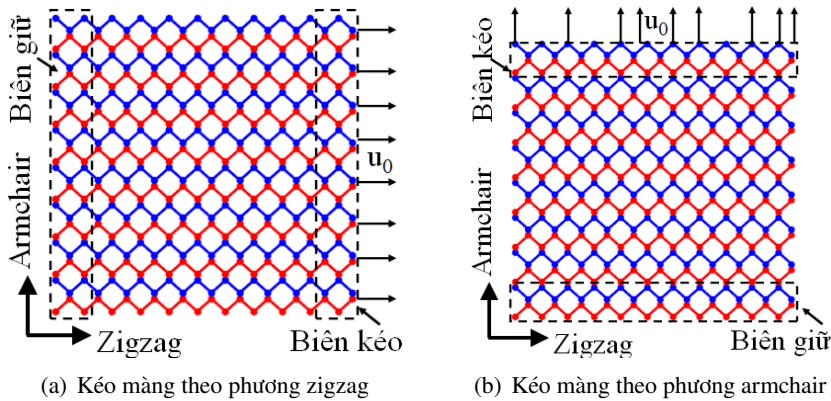
#### 3.1. Mô hình mô phỏng kéo màng nguyên

Giải hệ phương trình (10) sử dụng phương pháp lặp Newton–Raphson với điều kiện biên về chuyển vị như sau: các nguyên tử trên biên giữ cố chuyển vị bằng không; các nguyên tử trên biên kéo có chuyển vị ban đầu  $u_{(0)}$  (Hình 4); thay giá trị đó vào và giải phương trình (10) xác định chuyển vị, lực nút của toàn bộ nguyên tử trong hệ ở bước này. Trong các bước tiếp theo, vị trí nguyên tử được xác định như sau:

$$x_{(k+1)} = x_{(k)} + u_{(k)} \tag{12}$$

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

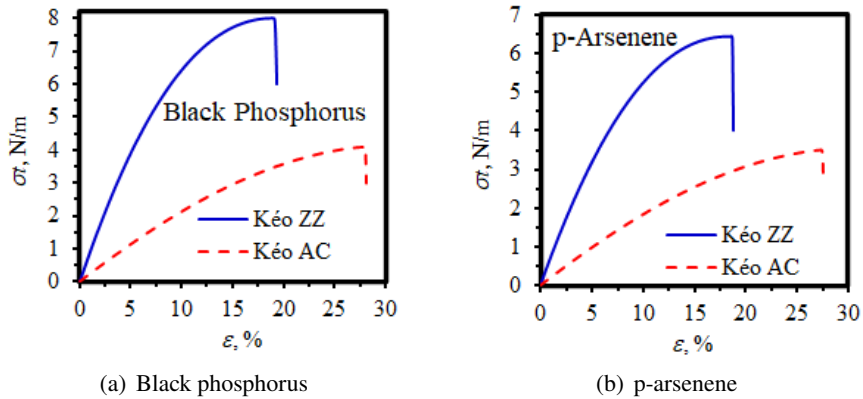
Tiến hành mô phỏng kéo màng nguyên hình chữ nhật với kích thước các cạnh xấp xỉ bằng nhau (hình chữ nhật coi gần đúng là hình vuông); mỗi màng có khoảng từ 4332 (p-As) đến 6552 (p-GeSe) nguyên tử tùy thuộc thông số mạng từng loại [16].



Hình 4. Kéo màng với điều kiện biên chuyển vị

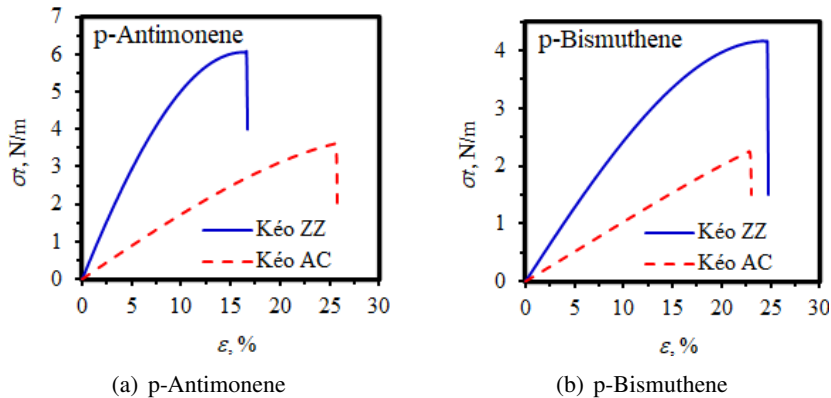
### 3.2. Kết quả

Kết quả kéo màng của các vật liệu này thể hiện thông qua đồ thị quan hệ ứng suất hai chiều - biến dạng; mô đun đàn hồi hai chiều được xác định khi làm tuyến tính hóa quan hệ ứng suất hai chiều - biến dạng với biến dạng trong khoảng từ 0 đến 1%. Hệ số Poisson được xác định dựa vào tỷ số biến dạng ngang và biến dạng dọc trục,  $\nu = -\varepsilon_y/\varepsilon_x$ , ứng suất hai chiều kéo đứt và biến dạng kéo đứt xảy ra khi kết thúc chương trình kéo. Quan hệ ứng suất hai chiều và biến dạng khi kéo các màng nguyên của 4 vật liệu được thể hiện trên Hình 5 và 6.



Hình 5. Quan hệ ứng suất hai chiều và biến dạng khi kéo màng (các đường màu xanh khi kéo màng theo phương zigzag, các đường màu đỏ nét đứt khi kéo màng theo phương armchair)

Các đồ thị trên Hình 5 và Hình 6 cho thấy khả năng chịu kéo của 4 màng vật liệu này theo hai phương armchair và zigzag khác nhau khá nhiều. Khi kéo theo phương zigzag, độ dốc đường cong lớn hơn rất nhiều khi kéo theo phương armchair. Về trị số, mô đun đàn hồi hai chiều khi kéo theo phương zigzag lớn hơn nhiều khi kéo theo phương armchair (Bảng 4).



Hình 6. Quan hệ ứng suất hai chiều và biến dạng khi kéo màng (các đường màu xanh khi kéo màng theo phương zigzag, các đường màu đỏ nét đứt khi kéo màng theo phương armchair)

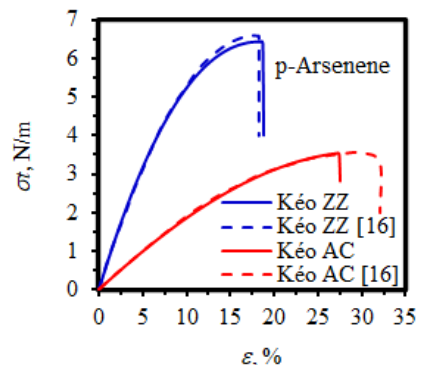
Giá trị cụ thể của mô đun đàn hồi hai chiều, hệ số Poisson, ứng suất hai chiều lớn nhất, biến dạng khi ứng suất hai chiều lớn nhất thể hiện trong Bảng 4.

Bảng 4. Thông số cơ học của 4 vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp ( $t$  là chiều dày của màng)

| TT | Vật liệu | Phương kéo | Mô đun đàn hồi $Y_t$ , N/m | Hệ số Poisson | Ứng suất lớn nhất $\sigma_t$ , N/m | Biến dạng khi ứng suất hai chiều lớn nhất | Ghi chú  |
|----|----------|------------|----------------------------|---------------|------------------------------------|---|--|
| 1  | p-P      | AC         | 23,61                      | 0,056         | 4,11                               | 0,277                                     | Kết quả tính bằng MD ở 1° K [16]<br>Sai số so với [16] |
|    |          |            | 24,3                       | 0,058         | 4,27                               | 0,33                                      |  |
|    |          | ZZ         | -2,84                      | -3,44         | -3,75                              | -16,06                                    |  |
|    |          |            | 89,33                      | 0,21          | 7,99                               | 0,192                                     |  |
| 2  | p-As     | AC         | 90,5                       | 0,22          | 8,00                               | 0,19                                      | Kết quả tính bằng MD ở 1° K [16]<br>Sai số so với [16] |
|    |          |            | -1,29                      | -4,54         | -0,12                              | 1,05                                      |  |
|    |          | ZZ         | 20,42                      | 0,003         | 3,53                               | 0,273                                     |  |
|    |          |            | 20,70                      | -             | 3,50                               | 0,31                                      |  |
| 3  | p-Sb     | AC         | -1,35                      | -             | 0,86                               | -11,94                                    | Kết quả tính bằng MD ở 1° K [16]<br>Sai số so với [16] |
|    |          |            | 72,44                      | 0,004         | 6,44                               | 0,186                                     |  |
|    |          | ZZ         | 73,00                      | -             | 6,50                               | 0,18                                      |  |
|    |          |            | -0,77                      | -             | -0,92                              | 3,33                                      |  |
| 4  | p-Bi     | AC         | 17,97                      | 0,08          | 3,61                               | 0,25                                      | Kết quả tính bằng MD ở 1° K [16]<br>Sai số so với [16] |
|    |          |            | 18,30                      | 0,08          | 3,70                               | 0,37                                      |  |
|    |          | ZZ         | -1,80                      | 0,00          | -2,43                              | -32,43                                    |  |
|    |          |            | 63,88                      | 0,29          | 6,07                               | 0,16                                      |  |
| 5  | p-Ar     | AC         | 65,20                      | 0,29          | 6,40                               | 0,17                                      | Kết quả tính bằng MD ở 1° K [16]<br>Sai số so với [16] |
|    |          |            | -2,02                      | 0,00          | -5,16                              | -5,88                                     |  |
|    |          | ZZ         | 10,18                      | 0,21          | 2,35                               | 0,232                                     |  |
|    |          |            | 10,20                      | 0,24          | 2,60                               | 0,38                                      |  |
| 6  | p-Te     | AC         | -0,20                      | -12,50        | -9,62                              | -38,95                                    | Kết quả tính bằng MD ở 1° K [16]<br>Sai số so với [16] |
|    |          |            | 26,19                      | 0,58          | 4,24                               | 0,25                                      |  |
|    |          | ZZ         | 26,20                      | 0,61          | 3,90                               | 0,29                                      |  |
|    |          |            | -0,04                      | -4,92         | 8,72                               | -13,79                                    |  |

Trong Bảng 4, kết quả kéo với 4 vật liệu theo hai phương zigzag và armchair có mô đun đàn hồi hai chiều trong khoảng 26,19 - 89,33 N/m và 10,18 - 23,61 N/m; hệ số Poisson có giá trị trong khoảng 0,004 - 0,58 và 0,003 - 0,21; ứng suất hai chiều lớn nhất trong khoảng 4,24 - 7,99 N/m và 2,35 - 4,11 N/m; biến dạng khi ứng suất hai chiều lớn nhất trong khoảng 0,16 - 0,25 và 0,232 - 0,277.

Đồ thị trên Hình 7 biểu diễn mối quan hệ giữa ứng suất hai chiều và biến dạng khi kéo màng p-As. Trong đó, đường nét liền là kết quả của nghiên cứu; đường nét đứt là kết quả nghiên cứu của Jiang [16] khi sử dụng MD để tính ở 1 K. Các đường này gần như trùng khớp nhau. Tuy vậy, khi sử dụng MD [16] để kéo màng theo phương armchair, màng có biến dạng dài hơn trước khi bị đứt khoảng



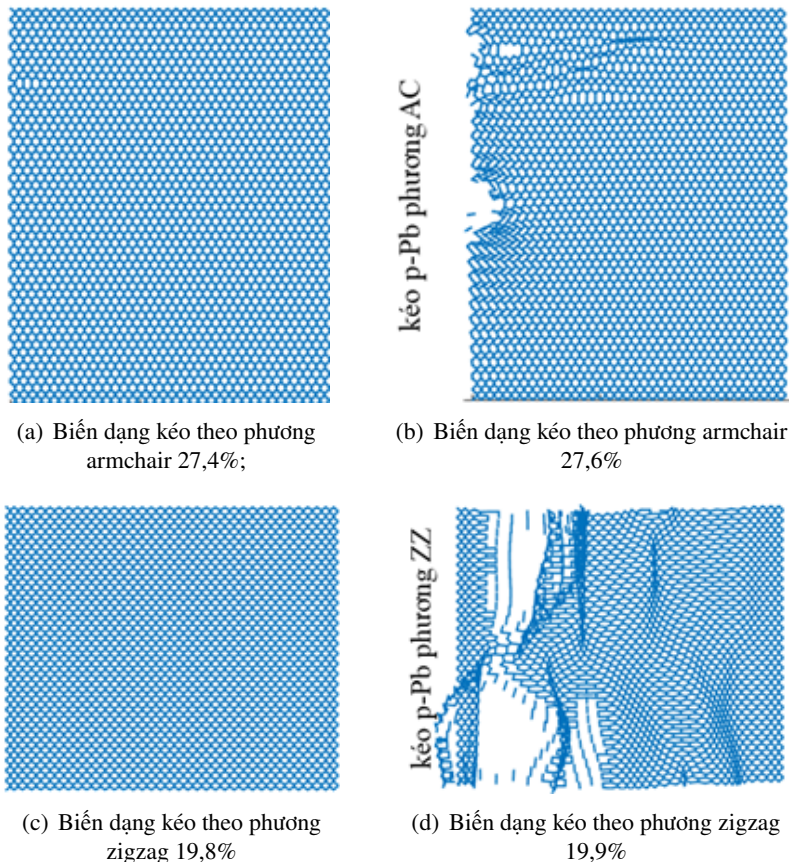
Hình 7. Đồ thị quan hệ ứng suất hai chiều và biến dạng khi kéo màng p-arsenene



12%; đối với phương zigzag, biến dạng dài trước khi phá hủy sai lệch nhau 3%.

So sánh với nghiên cứu của Jiang [16] (Bảng 4), sai số tương ứng đối với mô đun đàn hồi hai chiều từ  $-2,84\%$  (black phosphorus khi kéo theo armchair) đến  $-0,04\%$  (p-Bi khi kéo theo phương zigzag); đối với hệ số Poisson từ  $-12,5\%$  (p-Bi khi kéo theo armchair) đến  $0\%$  (p-Sb khi kéo theo cả hai phương); đối với ứng suất hai chiều lớn nhất khi kéo từ  $-9,67\%$  (p-Bi khi kéo theo armchair) đến  $8,72\%$  (p-Bi khi kéo theo phương zigzag) và đối với biến dạng khi đạt ứng suất lớn nhất từ  $-38,95\%$  (p-Bi khi kéo theo armchair) đến  $1,05\%$  (black phosphorus khi kéo theo phương zigzag). Trong đó, hệ số Poisson của p-Sb là 0,08 và 0,29 tương ứng khi kéo theo phương armchair và zigzag, kết quả này giống với nghiên cứu của Jiang [16]. Ngoài ra, với màng p-As, hệ số Poisson rất nhỏ (0,003 và 0,004 tương ứng khi kéo theo hai phương armchair và zigzag), tương tự như kết quả của Jiang đã tính [16]. Thông qua sự so sánh với kết quả của Jiang [16] chứng tỏ rằng sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử với hàm thế Stillinger-Webber để tính toán thông số cơ học của 4 vật liệu hai chiều cấu trúc nếp gấp cho kết quả đáng tin cậy.

Hình 8 là hình ảnh phá hủy của màng p-P. Màng được coi là bị phá hủy khi một số nguyên tử mất liên kết với nhau do khoảng cách giữa các nguyên tử quá lớn. Lúc này, các nguyên tử không còn nằm ở đỉnh của hình lục giác ban đầu. Như trên Hình 8(b), màng p-P bị phá hủy kéo theo phương armchair với biến dạng 27,6%; Hình 8(d), màng p-P bị phá hủy khi kéo theo phương zigzag với biến dạng là 19,9%.



Hình 8. Phá hủy của màng p-P chịu kéo



#### 4. Kết luận

Trong nghiên cứu này, hàm thế Stillinger-Weber với phương pháp phần tử hữu hạn nguyên tử được sử dụng trong mô phỏng kéo màng nguyên để xác định cơ tính của 4 vật liệu hai chiều đơn nguyên tử cấu trúc nếp gấp. 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 10,18 - 89,33 N/m). 4 vật liệu hai chiều đơn nguyên tử cấu trúc nếp gấp có cơ tính theo hai phương chênh lệch nhau lớn, mô đun đàn hồi hai chiều khi kéo theo phương zigzag lớn hơn nhiều khi kéo theo phương armchair; do đó các vật liệu này có tính dị hướng. Các kết quả nghiên cứu có sự tương đồng cao với nghiên cứu trước đó của Jiang [16]. Kết quả nghiên cứu này đáng tin cậy, là cơ sở để tính toán, nghiên cứu những đặc trưng cơ học khác của vật liệu như đặc trưng phá hủy, dao động của màng, ảnh hưởng của khuyết tật đến nhóm vật liệu trên.

#### Lời cảm ơn

Công trình này do Quỹ phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia Việt Nam (NAFOSTED) tài trợ, mã đề tài 107.02-2020.09.

#### Tài liệu tham khảo

- [1] Geim, A. K., Novoselov, K. S. (2007). [The rise of graphene](#). *Nature Materials*, 6(3):183–191.
- [2] Geim, A. K. (2009). [Graphene: Status and Prospects](#). *Science*, 324(5934):1530–1534.
- [3] Kaneta, C., Katayama-Yoshida, H., Morita, A. (1982). [Lattice dynamics of black phosphorus](#). *Solid State Communications*, 44(5):613–617.
- [4] Du, Y., Ouyang, C., Shi, S., Lei, M. (2010). [Ab initio studies on atomic and electronic structures of black phosphorus](#). *Journal of Applied Physics*, 107(9):093718.
- [5] Castellanos-Gomez, A., Vicarelli, L., Prada, E., Island, J. O., Narasimha-Acharya, K. L., Blanter, S. I., Groenendijk, D. J., Buscema, M., Steele, G. A., Alvarez, J. V., Zandbergen, H. W., Palacios, J. J., van der Zant, H. S. J. (2014). [Isolation and characterization of few-layer black phosphorus](#). *2D Materials*, 1(2): 025001.
- [6] Pakdel, A., Zhi, C., Bando, Y., Golberg, D. (2012). [Low-dimensional boron nitride nanomaterials](#). *Materials Today*, 15(6):256–265.
- [7] Tspas, P., Kassavetis, S., Tsoutsou, D., Xenogiannopoulou, E., Golias, E., Giamini, S. A., Grazianetti, C., Chiappe, D., Molle, A., Fanciulli, M., Dimoulas, A. (2013). [Evidence for graphite-like hexagonal AlN nanosheets epitaxially grown on single crystal Ag\(111\)](#). *Applied Physics Letters*, 103(25):251605.
- [8] Mansurov, V., Malin, T., Galitsyn, Y., Zhuravlev, K. (2015). [Graphene-like AlN layer formation on \(111\)Si surface by ammonia molecular beam epitaxy](#). *Journal of Crystal Growth*, 428:93–97.
- [9] Malin, T., Mansurov, V., Galitsyn, Y., Zhuravlev, K. (2015). [2D AlN crystal phase formation on \(0001\) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> surface by ammonia MBE](#). *physica status solidi c*, 12(4-5):443–446.
- [10] Aufray, B., Kara, A., Vizzini, S., Oughaddou, H., Léandri, C., Ealet, B., Lay, G. L. (2010). [Graphene-like silicon nanoribbons on Ag\(110\): A possible formation of silicene](#). *Applied Physics Letters*, 96(18): 183102.
- [11] Padova, P. D., Quaresima, C., Ottaviani, C., Sheverdyeva, P. M., Moras, P., Carbone, C., Topwal, D., Olivieri, B., Kara, A., Oughaddou, H., Aufray, B., Lay, G. L. (2010). [Evidence of graphene-like electronic signature in silicene nanoribbons](#). *Applied Physics Letters*, 96(26):261905.
- [12] Meng, L., Wang, Y., Zhang, L., Du, S., Wu, R., Li, L., Zhang, Y., Li, G., Zhou, H., Hofer, W. A., Gao, H.-J. (2013). [Buckled Silicene Formation on Ir\(111\)](#). *Nano Letters*, 13(2):685–690.
- [13] Zhu, Z., Tománek, D. (2014). [Semiconducting Layered Blue Phosphorus: A Computational Study](#). *Physical Review Letters*, 112(17):176802.

- [14] Xu, Y., Peng, B., Zhang, H., Shao, H., Zhang, R., Lu, H., Zhang, D. W., Zhu, H. (2016). [First-principle calculations of phononic, electronic and optical properties of monolayer arsenene and antimonene allotropes.](#) *arXiv*.
- [15] Aktürk, E., Üzengi Aktürk, O., Ciraci, S. (2016). [Single and bilayer bismuthene: Stability at high temperature and mechanical and electronic properties.](#) *Physical Review B*, 94(1):014115.
- [16] Jiang, J.-W., Zhou, Y.-P. (2017). [Parameterization of Stillinger-Weber potential for two-dimensional atomic crystals.](#) *Handbook of Stillinger-Weber Potential Parameters for Two-Dimensional Atomic Crystals*, InTech.
- [17] Luo, M., Fan, T., Zhou, Y., Zhang, H., Mei, L. (2019). [2D Black Phosphorus–Based Biomedical Applications.](#) *Advanced Functional Materials*, 29(13):1808306.
- [18] Tahir, M. B., Fatima, N., Fatima, U., Sagir, M. (2021). [A review on the 2D black phosphorus materials for energy applications.](#) *Inorganic Chemistry Communications*, 124:108242.
- [19] Li, L., Yu, Y., Ye, G. J., Ge, Q., Ou, X., Wu, H., Feng, D., Chen, X. H., Zhang, Y. (2014). [Black phosphorus field-effect transistors.](#) *Nature Nanotechnology*, 9(5):372–377.
- [20] Liu, B., Huang, Y., Jiang, H., Qu, S., Hwang, K. C. (2004). [The atomic-scale finite element method.](#) *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(17-20):1849–1864.
- [21] Wang, Y., Zhang, C., Zhou, E., Sun, C., Hinkley, J., Gates, T. S., Su, J. (2006). [Atomistic finite elements applicable to solid polymers.](#) *Computational Materials Science*, 36(3):292–302.
- [22] Wackerfuß, J. (2009). [Molecular mechanics in the context of the finite element method.](#) *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 77(7):969–997.
- [23] Nasdala, L., Kempe, A., Rolfes, R. (2010). The molecular dynamic finite element method. *CMC*, 19(1): 57–104.
- [24] Stillinger, F. H., Weber, T. A. (1985). [Computer simulation of local order in condensed phases of silicon.](#) *Physical Review B*, 31(8):5262–5271.
- [25] Tersoff, J. (1989). [Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems.](#) *Physical Review B*, 39(8):5566–5568.
- [26] Nguyen, D.-T., Le, M.-Q., Bui, T.-L., Bui, H.-L. (2016). [Atomistic simulation of free transverse vibration of graphene, hexagonal SiC, and BN nanosheets.](#) *Acta Mechanica Sinica*, 33(1):132–147.