

KHẢO SÁT CÁC TÍNH CHẤT CẤU TRÚC, ĐIỆN TỬ CỦA VẬT LIỆU ARMCHAIR STANENE NANORIBBONS HẤP PHỤ MỘT SỐ CHẤT

Nguyễn Thanh Tùng⁽¹⁾, Ngô Thị Ngọc Diệu⁽¹⁾, Mai Thị Hảo⁽¹⁾

(1) Trường Đại học Thủ Dầu Một

Ngày nhận bài 20/12/2024; Chấp nhận đăng 15/01/2025

Liên hệ email: haomt@tdmu.edu.vn

Tóm tắt

Trong báo cáo này, mối liên hệ giữa chỉ số dimer (N) và năng lượng vùng cấm của vật liệu Stanene được nghiên cứu, khảo sát bằng cách áp dụng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). Kết quả khảo sát sự thay đổi của chỉ số N từ 6, 7, 8, 9, và 10 cho thấy rằng năng lượng vùng cấm thay đổi theo đúng quy luật phù hợp với các nghiên cứu trước đây đối với các vật liệu như silicene, graphene, germanene, cụ thể là độ rộng vùng cấm có độ lớn 0,36eV; 0,42eV; 0,24eV; 0,25eV và 0,28eV. Qua đó, vật liệu stanene được xác định là vật liệu bán dẫn, không có từ tính. Tuy nhiên, nếu cho stanene hấp phụ các nguyên tố nhóm halogen thì vật liệu mới thu được là vật liệu từ. Vật liệu tiềm năng này phù hợp cho việc chế tạo các thiết bị thế hệ mới như cảm biến dò tìm nguyên tố nhóm halogen, động cơ spin, transistor hiệu ứng trường trong tương lai.

Từ khóa: cảm biến halogen, halogen hấp phụ stanene, thiết bị spin, vật liệu spin

Abstract

INVESTIGATION OF THE STRUCTURAL AND ELECTROMAGNETIC PROPERTIES OF ARMCHAIR STANENE NANORIBBONS MATERIAL THAT ADSORBS SOME SUBSTANCES

In this report, the relationship between the dimer index (N) and the prohibition level of Stanene material is studied and investigated by applying the density functional theory (DFT) method. The results of investigating the change in the N index from 6, 7, 8, 9 and 10 show that the ability to prohibit the zone from changing according to regulations is consistent with previous studies on materials such as silicene and graphene. , germanene, specifically prohibits the extended band with a magnitude of 0.36eV; 0.42eV; 0.24eV; 0.25eV and 0.28eV. Thereby, stanene material is determined to be a semiconductor material, without magnetic properties. However, if stanene adsorbs halogen elements, the new material obtained is a magnetic material. This potential material is suitable for manufacturing new generation devices such as halogen element search sensors, spin motors, and field-effect transistors in the future.

1. Giới thiệu

Vài thập kỷ gần đây các nhà khoa học đã bắt đầu chú ý đến các vật liệu hai chiều (2D) dựa trên các nguyên tố nhóm-IV như silicene (Cahangirov và cộng sự., 2009), germanene (Cahangirov và cộng sự., 2014; Li và cộng sự., 2014; Singh và cộng sự., 2014) và stanene (Xu, 2013; Fang, 2015; Zhang, 2014; Gao, 2016; Zhou, 2016; Zhang, 2016; Lyu, 2019) do các tính chất tương tự với graphene và khả năng ứng dụng trong các thiết

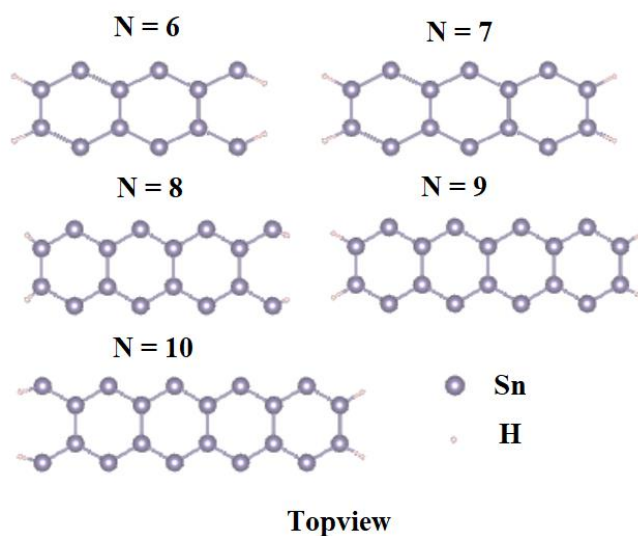
bị điện tử nano (Ferrari, 2015). Trong số này, stanene đã thu hút được sự quan tâm đặc biệt do nó có thể ứng dụng làm chất cách điện lượng tử Hall (Ezawa, 2015), chất cách điện tô pô (Rachel, 2014) và chất siêu dẫn tô pô (Li, 2009). Một trong những tính chất quan trọng của stanene là nó duy trì tính đối xứng nghịch đảo và nghịch đảo thời gian ngay cả sau khi đưa vào quỹ đạo quay (SOC). Tuy nhiên, khi đối xứng nghịch đảo bị phá vỡ, nó thể hiện sự phân tách trong cấu trúc vùng năng lượng của nó. Một số nghiên cứu cho thấy việc tổng hợp cấu trúc stanene 2D (Zhu, 2015), đã chế tạo thành công màng Sn siêu mỏng có cấu trúc stanene 2D trên đế Bi_2Te_3 bằng phương pháp epitaxy chùm phân tử.

Bằng cách sử dụng phương pháp DFT trước đây các tác giả đã có những nghiên cứu về đặc tính đàn hồi của stanene, độ biến dạng, hiệu ứng với phản ứng cơ học, năng lượng biến dạng, ứng suất, độ vênh, mật độ điện tử của các trạng thái. Trong đề tài này chúng tôi khảo sát sự thay đổi độ rộng vùng cấm, độ vênh, từ tính của stanene khi thay đổi chỉ số dimer (N) khác nhau. Bên cạnh đó chúng tôi tiến hành cho hấp phụ các nguyên tử nhóm halogen với chất nền stanene để khảo sát đặc tính và ứng dụng của vật liệu mới này.

2. Phương pháp nghiên cứu

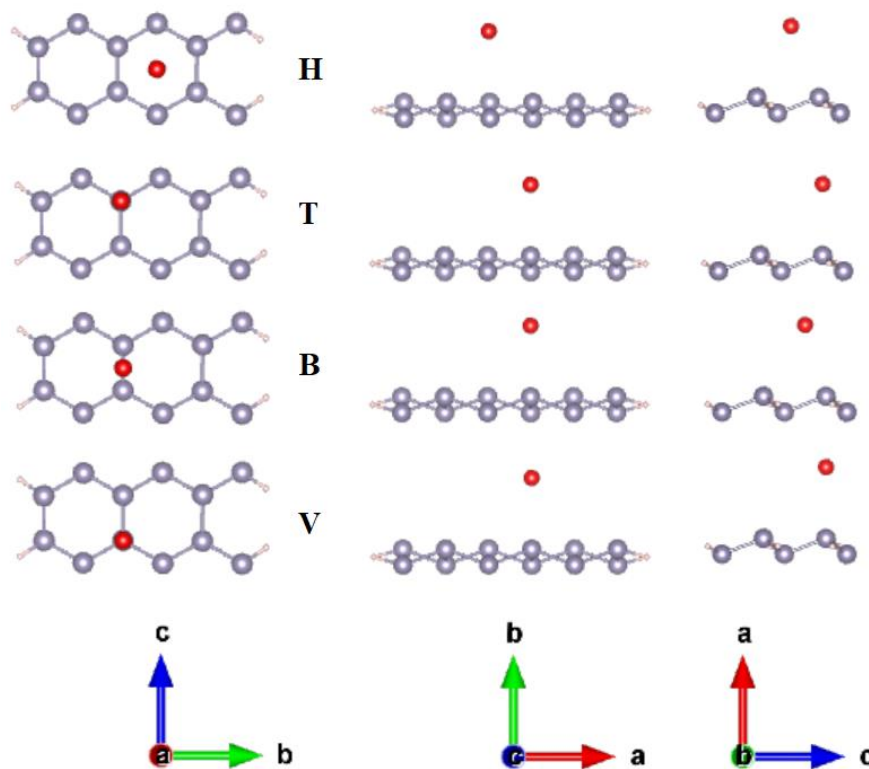
Đề tài sử dụng gói mô phỏng Vienna ab initio (VASP) kết hợp lý thuyết Phiếm hàm mật độ (DFT), VASP được tính toán có tính đến sự phân bố và nồng độ của các nguyên tử. Sự tương quan trao đổi và năng lượng, thu được từ các tương tác Coulomb, được tính toán bằng hàm Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) theo phép tính gần đúng. Trên cơ sở sóng phẳng với mức cắt năng lượng tối đa 400eV hàm sóng và trạng thái năng lượng được thiết lập. Các điểm lưới k của sơ đồ Monkhorst-Pack gồm $12 \times 1 \times 1$ và $100 \times 1 \times 1$ được sử dụng để tính toán các cấu trúc điện tử và tối ưu hóa cấu trúc tương ứng. Giới hạn trên của lực Hellmann-Feynman nhỏ hơn $0,01\text{eV}^{-1}$. Sự hội tụ năng lượng trạng thái cơ bản giữa hai chu kỳ gần nhất được đặt ở mức 10^{-5}eV .

Trong đề tài này, chúng tôi dùng một mô hình đơn lớp 1D của ASnNRs (Armchair stanene nanoribbons) gọi là pristine với hệ số dimer $N = 6$, có cấu trúc gồm có 12 nguyên tử Sn và 4 nguyên tử H, ở đây các nguyên tử H hầu như không tham gia nhiều vào sự hình thành cấu trúc mới mà nó có chức năng tạo sự cân bằng cho cấu trúc. Ở đây chúng tôi khảo sát sự thay đổi các tính chất của vật liệu, cấu trúc vùng năng lượng khi N thay đổi (xem hình 1).



Hình 1. Mô hình stanene với các N khác nhau

Bên cạnh đó chúng tôi cho hấp phụ các nguyên tử thuộc nhóm halogen, tạo ra sự hấp phụ trên bề mặt với các vị trí cơ bản như hollow, bridge, top, valley (xem hình 2) và xem xét sự thay đổi của các tính chất vật liệu mới sau khi pha tạp.



Hình 2. Mô hình ASnNRs pha tạp halogen với các vị trí hollow (H), top (T), bridge (B) và valley (V)

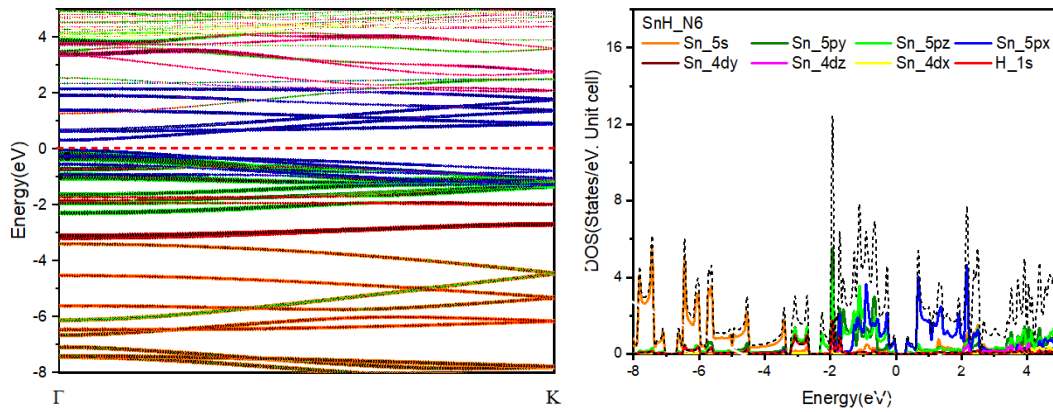
3. Kết quả và thảo luận

Sau khi tính toán đối với các mô hình có chỉ số N thay đổi từ 6 đến 10, kết quả thu được cho thấy vật liệu ASnNRs có năng lượng vùng cấm E_g , năng lượng hình thành E_p , độ cong vênh, độ dài liên kết Sn-Sn, momen từ, trạng thái cấu trúc có thay đổi nhiều tùy thuộc vào N, và được thống kê ở bảng 1.

Bảng 1 Kết quả tính toán ASnNRs khi thay đổi N khác nhau

N	6	7	8	9	10
E_g (eV)	0,36	0,42	0,24	0,25	0,28
E_p (eV)	-51,8	-58,6	-65,4	-72,1	-78,9
Mag (μ_B)	0	0	0	0	0
Buckl (Å)	0,89	0,86	0,87	0,86	0,85
Sn-Sn (Å)	2,82	2,82	2,82	2,84	2,84

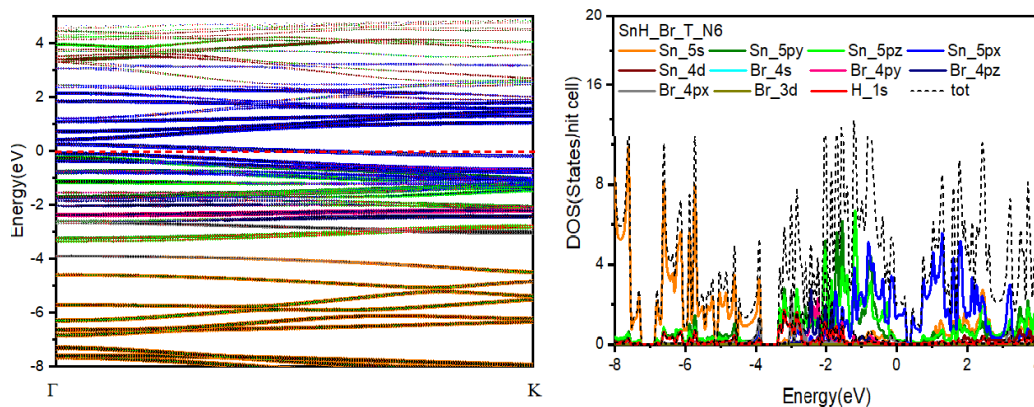
Cấu trúc vùng năng lượng của Sn đặc trưng bởi các e quỹ đạo điện tử Sn_5s, Sn_5p và Sn_4d và H_1s được biểu diễn thông qua giản đồ BAND và mật độ trạng thái điện tử PDOS (xem hình 3).



Hình 3. Cấu trúc vùng BAND và trạng thái PDOS của ASnNR với $N = 6$

Khi đó các e quỹ đạo Sn_5px chiếm nhiều ở đáy vùng dẫn và đỉnh vùng hoá trị xung quanh mức fermi (từ 3eV đến -2eV), các e quỹ đạo Sn_5py và Sn_5pz nằm ở đỉnh vùng hoá trị nhưng có năng lượng yếu, các e Sn_5s rất mạnh nhưng tập trung ở đáy vùng hoá trị, các e quỹ đạo Sn_4d và H_1s cũng có năng lượng yếu, lúc này E_g khoảng 0,36eV với chỉ số dimer $N = 6$.

Khi hấp phụ, các điện tử quỹ đạo của nguyên tử halogen, như trường hợp Br gồm có Br_4s, Br_4p và Br_3d (xem hình 4), các e quỹ đạo này đóng góp vào mật độ các e quỹ đạo Sn_s và Sn_p sau khi chúng có sự tương tác, trao đổi điện tích giữa các orbital. Kết quả từ OUTCAR file cho thấy mật độ điện tích của Sn_p thay đổi lớn từ $1,64 \text{ e}/\text{\AA}^3$ thành $1,74 \text{ e}/\text{\AA}^3$ và Sn_d có thay đổi nhỏ từ $0,09 \text{ e}/\text{\AA}^3$ thành $0,1 \text{ e}/\text{\AA}^3$ và Sn_s không thay đổi nhiều. Đó là lý do các mức năng lượng Sn_px dâng cao từ đỉnh vùng hoá trị chiếm mức fermi, làm cho vật liệu pha tạp SnH_Br trở thành vật liệu bán kim loại.



Hình 4. Cấu trúc vùng BAND và trạng thái DOS của ASnNR pha tạp Br(T), $N = 6$

Trong bài viết này chúng tôi áp dụng công thức tính toán năng lượng hấp phụ theo công thức cụ thể (1) sau đây. Nếu gọi E_p là năng lượng hình thành của chất nền ASnNR và E_x là năng lượng hình thành của chất hấp phụ, khi đó E_{x+p} là năng lượng hình thành của hệ gồm có chất nền và chất hấp phụ, với ΔE là năng lượng hấp phụ, ta có công thức:

$$\Delta E = E_{x+p} - E_x - E_p. \quad (1)$$

Kết quả tính toán trên các nguyên tố nhóm halogen cho thấy, tất cả các trường hợp đều có năng lượng hấp phụ vật lý ΔE sau khi pha tạp thấp nhất, kết hợp với trạng thái cấu trúc bền nhất (H) với ba trạng thái được quy ước (L là trạng thái mà cấu trúc pha tạp bị vỡ

so với ban đầu; M cấu trúc tạm ổn định, vẫn có biến dạng; H là trạng thái bền vững, ổn định so với ban đầu) so với các vị trí hollow (H), bridge (B), valley (V), top (T) vẫn là vị trí có năng lượng thấp nhất, cấu trúc bền vững tối ưu nhất trong các trường hợp. Mặt khác, chỉ có F (Flo) là đại diện cho nhóm halogen, sau khi pha tạp với ASnNR có momen mạnh từ rõ rệt, mạnh nhất tại top còn các nguyên tố khác như Cl, Br, I có từ tính nhưng tương đối yếu.

Bảng 2. Kết quả tính toán khi halogen hấp phụ bề mặt ASnNR tại vị trí top (T), valley (V), bridge (B) và hollow (H)

	Top_F	Valley_F	Brigde_F	Hollow_F
SnH (eV)	-52,25	-52,25	-52,25	-52,25
F (eV)	-0,67	-0,65	-0,63	-0,66
SnH_F (eV)	-47,96	-50,11	-56,56	-54,00
ΔE (eV)	4,96	2,79	-3,67	-1,08
Mag (μ_B)	2,45	1,73	1,81	-0,49
Structure states	H	H	L	H
	Top_Cl	Valley_Cl	Brigde_Cl	Hollow_Cl
SnH (eV)	-52,25	-52,25	-52,25	-52,25
Cl (eV)	-0,30	-0,29	-0,29	-0,29
SnH_Cl (eV)	-57,70	-55,34	-55,29	-55,25
ΔE (eV)	-5,15	-2,79	-2,74	-2,70
Mag (μ_B)	0, 1	0, 1	0, 1	0, 1
Structure states	H	M	L	L
	Top_Br	Valley_Br	Brigde_Br	Hollow_Br
SnH (eV)	-52,25	-52,25	-52,25	-52,25
Br (eV)	-0,32	-0,32	-0,32	-0,32
SnH_Br (eV)	-61,18	-61,29	-61,16	-61,34
ΔE (eV)	-8,60	-8,72	-8,59	-8,77
Mag (μ_B)	0, 1	0, 1	0, 1	0, 1
Structure states	H	L	L	L
	Top_I	Valley_I	Brigde_I	Hollow_I
SnH (eV)	-52,25	-52,25	-52,25	-52,25
I (eV)	-0,54	-0,54	-0,54	-0,54
SnH_I (eV)	-54,43	-54,55	-54,42	-54,57
ΔE (eV)	-1,64	-1,76	-1,63	-1,78
Mag (μ_B)	0,2	0, 1	0, 1	0,1
Structure states	H	L	L	L

4. Kết luận

Bằng cách áp dụng phương pháp DFT các tính chất về cấu trúc, điện và từ của stanene được xác định khi điều chỉnh chỉ số Dimer. Khi hấp phụ các nguyên tố nhóm halogen, tất cả các vật liệu mới đều mang tính kim loại. Tính chất từ tính của vật liệu sau pha tạp cũng được xác định chính xác, hiệu quả nhất vẫn là F, định hướng cho nghiên cứu thực nghiệm về các loại cảm biến khí, thiết bị từ tính trong tương lai.

Lời cảm ơn

Chúng tôi chân thành cảm ơn sự hỗ trợ của Ban Chuyển đổi số, bộ phận quản lý hệ thống máy tính hiệu năng cao HPC, Trường Đại học Thủ Dầu Một.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Cahangirov S, Topsakal M, Aktürk E, Şahin H, Ciraci S. (2009). Two-and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium. *Phys Rev Lett*, 102, 236804.
- [2] Dávila ME, Xian L, Cahangirov S, Rubio A, Le Lay, G. (2014). Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene. *New J Phys*, 16(9), 095002.
- [3] Ezawa M, J. (2015). Supercond. *Nov Magn*, 28, 1249-53.
- [4] Fang Y, Huang ZQ, Hsu CH, Li X, Xu Y, Zhou Y et al (2015). Quantum spin Hall states in stanene/Ge (111). *Scientific reports*, 5, 14196.
- [5] Ferrari A C et al (2015). *Nanoscale*, 7, 4598.
- [6] Gao J, Zhang G, Zhang YW. (2016). Exploring Ag (111) substrate for epitaxially growing monolayer stanene: a first-principles study. *Sci Rep*, 6, 29107.
- [7] Li L, Lu SZ, Pan J, Qin Z, Wang YQ, Wang Y et al (2014). Buckled germanene formation on Pt (111). *Adv Mater*, 26(28), 4820-4824.
- [8] Li S, de la Cruz C, Huang Q, Chen G F, Xia T L, Luo J L, Wang N L and Dai P. (2009). *Phys. Rev. B*, 80, 020504.
- [9] Lyu J K, Zhang S F, Zhang C W and Wang P J. (2019). *Annalen der Physik*, 19, 00017.
- [10] Rachel S and Ezawa M. (2014). *Phys. Rev. B*, 89, 195303.
- [11] Singh N, Schwingenschlögl U. (2014). Topological phases of silicene and germanene in an external magnetic field: quantitative results, *Physica status solidi (RRL)-Rapid Research Letters*, 8(4), 353-356.
- [12] Xu Y, Yan B, Zhang HJ, Wang J, Xu G, Tang P, Zhang SC et al (2013). Large-gap quantum spin Hall insulators in tin films, *Phys Rev Lett*, 111(13), 136804.
- [13] Zhang GF, Li Y, Wu C. (2014). Honeycomb lattice with multi-orbital structure: topological and quantum anomalous Hall insulators with large gaps. *Physical Review B*, 90(7), 075114.
- [14] Zhang RW, Ji WX, Zhang CW, Li P, Wang PJ. (2016). Prediction of flatness-driven quantum spin Hall effect in functionalized germanene and stanene, *Phys Chem Chem Phys*, 18(40), 28134-28139.
- [15] Zhou H, Cai Y, Zhang G, Zhang YW. (2016). Quantum thermal transport in stanene. *Physical Review B*, 94(4), 045423.
- [16] Zhu F, Chen W, Xu Y, Gao C, Guan D, Liu C, Qian D, Zhang S and Jia J. (2015). *Nat. Mater*, 14, 1020 .