BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO

TRƯỜNG ĐẠI HỌC NAM CẦN THƠ

BÁO CÁO TỔNG KẾT

ĐỀ TÀI NGHIÊN CỨU KHOA HỌC CẤP CƠ SỞ

KHẢO SÁT SỰ ỔN ĐỊNH CẤU TRÚC VÀ ĐẶC TÍNH ĐIỆN TỬ CỦA VẬT LIỆU 2D-$PdSe_2$ ĐỊNH HƯỚNG ỨNG DỤNG QUANG ĐIỆN TỬ

Mã số: C23.15

Chủ nhiệm đề tài: Thạc sĩ Nguyễn Hải Đăng

Cần Thơ, tháng 07 năm 2024

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO

TRƯỜNG ĐẠI HỌC NAM CẦN THƠ

BÁO CÁO TỔNG KẾT

ĐỀ TÀI NGHIÊN CỨU KHOA HỌC CẤP CƠ SỞ

KHẢO SÁT SỰ ỔN ĐỊNH CẤU TRÚC VÀ ĐẶC TÍNH ĐIỆN TỬ CỦA VẬT LIỆU 2D-$PdSe_2$ ĐỊNH HƯỚNG ỨNG DỤNG QUANG ĐIỆN TỬ

Mã số: C23.15

Chủ nhiệm đề tài: Thạc sĩ Nguyễn Hải Đăng

Cần Thơ, tháng 07 năm 2024

LỜI CẢM ƠN

Chân thành cảm ơn Trường Đại học Nam Cần Thơ là đơn vị tài trợ hoàn thành đề tài "Khảo sát sự ổn định cấu trúc và đặc tính điện tử của vật liệu 2D-$PdSe_2$ định hướng ứng dụng quang điện tử" mã số: **C23.15.**

Xin cảm ơn Ban chủ nhiệm, cán bộ và giảng viên Khoa Cơ bản, Phòng nghiên cứu khoa học và hợp tác quốc tế, Trường Đại học Nam Cần Thơ đã hỗ trợ, động viên tôi hoàn thành đề tài này.

Ngoài ra, tôi xin cảm ơn quý Thầy/Cô Khoa Khoa học Tự nhiên, phòng Lab Moma mô phỏng phân tử và vật liệu, Trường Đại học Cần Thơ đã giúp tôi hoàn thành các số liệu tính toán cho đề tài.

Cần Thơ, ngày … tháng 07 năm 2024

Tác giả thực hiện

NGUYỄN HẢI ĐĂNG

DANH SÁCH CÁC THÀNH VIÊN THAM GIA ĐỀ TÀI VÀ ĐƠN VỊ PHỐI HỢP CHÍNH

- Chủ nhiệm: Th.S Nguyễn Hải Đăng, đơn vị: Khoa Cơ bản, Trường Đại học Nam Cần Thơ.
- Đơn vị phối hợp: Phòng Lab Moma mô phỏng phân tử và vật liệu, tòa nhà công nghệ cao ATL, Trường Đại học Cần Thơ.

MỤC LỤC

DANH SÁCH BẢNG…….iii

DANH SÁCH HÌNH……...iv

DANH MỤC NHỮNG TỪ VIẾT TẮT……..vi

TÓM LƯỢC……...vii

PHẦN 1. MỞ ĐẦU 1

1.1. Nhu cầu thực tiễn……...1

1.2. Tổng quan tình hình nghiên cứu trong và ngoài nước……...1

1.3. Mục tiêu đề tài……...4

1.4. Nội dung nghiên cứu…….....4

1.5. Đối tượng và phạm vi nghiên cứu…….5

PHẦN 2. PHƯƠNG PHÁP VÀ PHƯƠNG TIỆN NGHIÊN CỨU..... 5

2.1. Lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT)…….....5

2.1.1. Định lý Hosenberg-Kohn.……....8

2.1.2. Phương trình Kohn-Sham……..9

2.2. Phiếm hàm năng lượng tương quan trao đổi theo gần đúng gradient tổng quát (GGA)……..10

2.3. Hiệu chỉnh tương tác Van der Waals……...……11

2.4. Bộ hàm cơ sở……...12

2.4.1. Bộ hàm cơ sở địa phương (localized basic set) ……....12

2.4.2. Bộ hàm cơ sở sóng phẳng……..12

2.5. Giả thế……..13

2.5.1. Giả thế Norn-Conserving……..14

2.5.2. Giả thế Ultra-soft……..14

2.5.3. Giả thế PAW……..14

2.6. Lưới k-point…….15

2.7. Vận hành chương trình mô phỏng DFT……...…15

2.8. Ưu và khuyết điểm của phương pháp mô phỏng DFT……....18

2.8.1. Ưu điểm ……....18

2.8.2. Khuyết điểm ……..18

2.9. Phương pháp mô phỏng NEGF-DFT……..19

2.9.1. Cách tiếp cận Landauer về vấn đề truyền dẫn điện tử……..…19
2.9.2. Ưu và khuyết điểm của cách tiếp cận Landauer……..19
2.10. Cấu trúc vùng năng lượng……...…22
2.11. Mật độ trạng thái……22
2.12. Phân bố Mulliken……23
2.13. Tính chất quang……...24
2.14. Sơ lược về phần mềm Materials Studio và phần mềm QuantumWise 27
2.14.1. Phần mềm Materials Studio ……..27
2.14.2. Phần mềm QuantumWise ……..29
2.15. Tổng quan về vật liệu Penta-graphene…….29
2.16. Sơ lược về vật liệu 2D $PdSe_2$……...31
PHẦN 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN 37
PHẦN 4. KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ 49
4.1. Kết luận……49
4.2. Kiến nghị……...49
TÀI LIỆU THAM KHẢO……51
PHỤ LỤC…….56

DANH SÁCH BẢNG

Bảng 3.1 Độ dài liên kết trước và sau tối ưu của mẫu 2D p-$PdSe_2$ của các vị trí ở Hình 3.2…….39
Bảng 3.2 Khoảng cách sau tối ưu và năng lượng hình thành của lớp ghép 2D p-$PdSe_2$……..44

DANH SÁCH HÌNH

Hình 2.1 Sơ đồ hoạt động đặc trưng của một chương trình mô phỏng dựa vào phương pháp mô phỏng DFT. 17

Hình 2.2 Cơ chế hình thành điện trở cục bộ và điện trường cục bộ. Tạm thời trong hình chỉ xét dòng hạt tải đi từ điện cực trái sang điện cực phải. Hiện tượng tương tự cũng xảy ra cho dòng điện đi theo chiều ngược lại. 20

Hình 2.3 (A) Cấu trúc tinh thể của T12-cacbon nhìn theo hướng [100] và [001] tương ứng. (B) Hình chiếu trên và bên của cấu hình nguyên tử của penta-graphene. Hình vuông được đánh dấu bằng các đường đứt nét màu đỏ biểu thị một ô đơn vị và các quả cầu màu vàng đại diện cho các nguyên tử C lai hóa sp^3 30

Hình 2.4 Cấu trúc $PdSe_2$ và và ứng dụng trong lĩnh vực điện tử, quang học và quang điện tử 31

Hình 2.5 Cấu trúc đơn lớp $PdSe_2$ 2D từ trên xuống và từ mặt bên. Nguyên tử Se màu xanh và nguyên tử Pd màu xám..... 33

Hình 2.6 (a) Cấu trúc nguyên tử của $PdSe_2$; góc nhìn từ trên xuống và góc nhìn bên của penta-$PdSe_2$ đơn lớp, trong đó một ô đơn vị được đánh dấu bằng đường màu đỏ. Các quả cầu màu xanh và màu vàng đại diện cho các nguyên tử Pd và Se, tương ứng. (b) Cấu trúc tinh thể học 3D tương ứng của $PdSe_2$ đơn lớp cấu trúc từ góc từ trên xuống và góc nhìn bên. (c) và (d) là STEM của $PdSe_2$ cấu trúc tinh thể với số lớp chẵn và lẻ. (e) và (f) ảnh mô phỏng mô hình nguyên tử tương ứng của tinh thể $PdSe_2$ với số lớp chẵn và lẻ. 34

Hình 2.7 (a) Cấu trúc vùng của $PdSe_2$ đơn lớp (không biến dạng). (b), (c) Thay đổi trong cấu trúc vùng của $PdSe_2$ đơn lớp tương ứng dưới các biến dạng nén và kéo. (d) Cấu trúc vùng của vật liệu khối $PdSe_2$. (e) Cấu trúc vùng của $PdSe_2$ đa lớp dưới ứng suất kéo. (f) Khoảng cách giữa các lớp và độ rộng vùng cấm của $PdSe_2$ đa lớp dưới ứng suất kéo đơn trục. 36

Hình 3.1 Cấu trúc 2D p-$PdSe_2$ và vị trí độ dài liên kết đơn lớp trước tối ưu (a) và sau tối ưu (b) (top view và side view)……....38

Hình 3.2 Các vị trí có sự thay đổi độ dài liên kết đáng kể của mẫu 2D p-$PdSe_2$ sau tối ưu……39

Hình 3.3 Ghép hai tấm 2D p-$PdSe_2$ với khoảng cách 2.5 Å. (top view và side view). 41

Hình 3.4 Ghép hai tấm 2D p-$PdSe_2$ với khoảng cách từ 2.8-4.6 Å..... 41

Hình 3.5 Các khoảng cách sau khi tối ưu của các lớp ghép 2D p-$PdSe_2$..... 42

Hình 3.6 Cấu trúc p-$PdSe_2$ được hình thành trên mặt đế graphene. Side view ô cơ sở gồm hai lớp p-$PdSe_2$ trong hình chủ nhật (a), top view ô cơ sở của lớp đơn (b), ảnh chụp trên đế SiC(0001) (c), bề dày biểu kiến cho hai lớp (d), quan sát thực nghiệm các nút mạng (e) và quan sát mô phỏng (f)..... 43

Hình 3.7 Cấu trúc 2D p-PdSe2 ba lớp trước tối ưu (a) và sau khi tối ưu (b).. 45

Hình 3.8 Cấu trúc vùng năng lượng của 2D p-PdSe2 đơn lớp và hai lớp. 46

Hình 3.9 Mật độ trạng thái của 2D p-PdSe2 đơn lớp và hai lớp..... 47

Hình 3.10 Phổ hấp thụ quang của 2D p-PdSe2 đơn lớp (Hình a) và hai lớp (Hình b)..... 48

DANH MỤC NHỮNG TỪ VIẾT TẮT

Viết tắt	Tên tiếng Anh	Tên tiếng Việt
2D	Two dimensional	Hai chiều
CB	Conduction Band	Vùng dẫn
DFT	Density Functional Theory	Phương pháp phiếm hàm mật độ
DFT-LCAO	Density Functional Theory - Linear Combination of Atomic Orbitals	Lý thuyết hàm mật độ - Kết hợp tuyến tính của quỹ đạo nguyên tử
DOS	Density of States	Mật độ trạng thái
GGA	Generalized Gradient Approximation	Xấp xỉ gradient tổng quát
LDA	Latent Dirichlet Allocation	Tương quan trao đổi địa phương
TMDC	Transition metal dichalcogenides	Kim loại chuyển tiếp chalcogen
p-$PdSe_2$	Penta- Palladium diselenide	Palladium diselenide dạng ngũ giác
PG	Penta Graphene	Penta Graphene
PW	Plane wave	Sóng phẳng
QD	Quantum dots	Chấm lượng tử
VdW	Van-der-Waals	Tương tác Van-der-Waals

TÓM LƯỢC

Đề tài sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT), tiến hành tối ưu cấu trúc của các tấm $PdSe_2$ (Palladium diselenide) hai chiều (2D p-$PdSe_2$) với đơn lớp và đa lớp dạng ngũ giác. Năng lượng liên kết của đơn lớp và năng lượng hình thành của đa lớp được tính toán chi tiết và cho thấy mức độ ổn định tốt. Với đơn lớp p-$PdSe_2$ năng lượng liên kết là -23.53 eV, năng lượng hình thành sau tối ưu của hai lớp ổn định ở mức -16.92 eV và năng lượng hình thành của ba lớp là -25.00 eV. Các khoảng cách của đa lớp cũng cho thấy sự ổn định sau tối ưu là 3.912 Å, kết quả này phù hợp với khoảng cách các lớp 2D p-$PdSe_2$ mà các nhóm thực nghiệm bóc tách được**.** Điều này chỉ ra rằng, hoàn toàn có thể tạo được các vật liệu khối p-$PdSe_2$ từ các tấm 2D xếp chồng lên nhau, tiến tới thiết kế các linh kiện điện tử dựa trên các tấm 2D p-$PdSe_2$. Về đặc tính điện tử đề tài đã khảo sát cấu trúc vùng và mật độ trạng thái của các tấm 2D p-$PdSe_2$. Kết quả khảo sát cho thấy với đơn lớp và hai lớp 2D p-$PdSe_2$ độ rộng vùng cấm trong khoảng 1.10 eV, thể hiện đặc tính bán dẫn cho lớp vật liệu này. Phổ hấp thụ quang với kết quả hấp thụ ánh sáng mạnh nhất ở vùng ánh sáng khả kiến, hứa hẹn tiềm năng cho các ứng dụng quang điện tử.