

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

NGHIÊN CỨU ỔN ĐỊNH CẤU TRÚC VÀ CÁC ĐẶC TÍNH
ĐIỆN TỬ CỦA VẬT LIỆU PdPSe DẠNG NGŨ GIÁC
THẤP CHIỀU ĐỊNH HƯỚNG ỨNG DỤNG QUANG ĐIỆN TỬ

Mã số: C24.30

Chủ nhiệm đề tài: Thạc sĩ Nguyễn Hải Đăng

Cần Thơ, tháng 07 năm 2025

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

**NGHIÊN CỨU ỔN ĐỊNH CẤU TRÚC VÀ CÁC ĐẶC TÍNH
ĐIỆN TỬ CỦA VẬT LIỆU PdPSe DẠNG NGŨ GIÁC
THẤP CHIỀU ĐỊNH HƯỚNG ỨNG DỤNG QUANG ĐIỆN TỬ**

Mã số: C24.30

Chủ nhiệm đề tài: Thạc sĩ Nguyễn Hải Đăng

Cần Thơ, tháng 07 năm 2025

LỜI CẢM ƠN

Chân thành cảm ơn Trường Đại học Nam Cần Thơ là đơn vị tài trợ hoàn thành đề tài “Nghiên cứu ổn định cấu trúc và các đặc tính điện tử của vật liệu PdPSe dạng ngũ giác thấp chiều định hướng ứng dụng quang điện tử” mã số: **C24.30**.

Xin cảm ơn Ban chủ nhiệm, cán bộ và giảng viên Khoa Cơ bản, Phòng quản lý nghiên cứu khoa học, 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 2025

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.
- Thành viên: Th.S Phạm Thị Bích, 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.....	v
DANH SÁCH HÌNH.....	vi
DANH MỤC NHỮNG TỪ VIẾT TẮT.....	viii
TÓM LƯỢC.....	ix
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.....	5
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.....	13
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
2.10. 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
2.13.1. Hàm điện môi.....	25
2.13.2. Hệ số hấp thụ quang.....	26
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	28
2.15. Tổng quan về vật liệu Penta-graphene.....	29
2.16. Sơ lược về vật liệu 2D PdPSe.....	31
PHẦN 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN	34
3.1. Đặc tính cấu trúc, tính chất điện tử, tính chất quang và tính chất vận chuyển điện tử của 2D p-PdPSe đơn và đa lớp.....	34
3.2. Ứng dụng mô hình máy học vào mô phỏng và tính toán vật liệu.....	42
PHẦN 4. KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ.....	50
4.1. Kết luận.....	50
4.2. Kiến nghị.....	52
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....	53
PHỤ LỤC.....	56

DANH SÁCH BẢNG

Bảng 3.1 Độ dài liên kết trước và sau tối ưu của các mẫu 2D p-PdPSe ở các vị trí Hình 3.1.....	37
Bảng 3.2 So sánh hiệu suất huấn luyện của các mô hình.....	47
Bảng 3.3 Thống kê so sánh hệ số xác định và hiệu suất các mô hình	49

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 và tính chất vật lý ở áp suất môi trường. (a) Sơ đồ cấu trúc tinh thể của p-PdPSe. Các kết quả của đơn tinh thể PdPSe: (b) phổ tán sắc năng lượng tia X (EDXS), (c) nhiễu xạ tia X (XRD), (d) phổ Raman và (e) đồ thị điện trở theo nhiệt độ	32
Hình 2.5 (a) Cấu trúc vùng năng lượng, (b) Mật độ trạng thái riêng (PDOS) và (c) mật độ electron địa phương (ELF) của đơn lớp PdPSe.....	33
Hình 2.6 Phổ DOS hấp phụ các phân tử khí trên 2D p-PdPSe đơn lớp. (a) CO, (b) CO ₂ , (c) NH ₃ , (d) NO và (e) NO ₂	34
Hình 3.1 Cấu trúc 2D của p-PdPSe với các góc nhìn khác nhau và vị trí các độ dài liên kết có sự thay đổi đáng kể sau tối ưu.....	35
Hình 3.2 Khoảng cách các lớp sau tối ưu và phân bố mật độ electron của (a) PdPSe-1L, (b) PdPSe-2L và (c) PdPSe-3L	38
Hình 3.3 Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái (a) PdPSe-1L, (b) PdPSe-2L và (c) PdPSe-3L.....	40
Hình 3.4 Phổ hấp thụ quang và các hằng số hấp thụ của các mẫu (a) PdPSe-1L, (b) PdPSe-2L và (c) PdPSe-3L.....	40
Hình 3.5 Mô hình thiết bị đơn giản được tạo ra từ đơn lớp 2D p-PdPSe bao gồm điện cực trái, điện cực phải và vùng tán xạ trung tâm.....	41
Hình 3.6 Phổ I-V của PdPSe-1L và PdPSe-2L tại các điện áp từ 0-2 V và từ 0-0.4 V.....	43

Hình 3.7 (a) Cấu trúc graphene nanoribbon dạng biên armchair và (b) cấu trúc khuyết một nguyên tử carbon. Quả cầu màu cam và màu xanh lần lượt đại diện cho nguyên tử carbon và hydrogen.....	44
Hình 3.8 Biểu đồ thể hiện đường cong học của các mô hình huấn luyện, tỉ lệ phân chia tập huấn luyện-tập kiểm tra. a) 60%-40%, b) 70%-30%, c) 80%-20% và d) 90%-10%.....	46
Hình 3.9 Mối quan hệ giữa năng lượng dự đoán (Pred_e) và năng lượng thực tế (Data_e) với bốn tỷ lệ phân chia dữ liệu huấn luyện và kiểm tra. a) 60%-40%, b) 70%-30%, c) 80%-20%, d) 90%-10%.	48
Hình 3.10 Độ lệch giữa năng lượng dự đoán (Pred_e) và năng lượng thực tế (Data_e) với bốn tỷ lệ phân chia dữ liệu huấn luyện và kiểm tra. a) 60%-40%, b) 70%-30%, c) 80%-20%, d) 90%-10%.....	49

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-PdSe₂	Penta- Palladium diselenide	Palladium diselenide dạng ngũ giác
p-PdPSe	Penta- Palladium phosphoselenide	Palladium phosphoselenide dạng ngũ giác
PG	Penta Graphene	Penta Graphene
PW	Plane wave	Sóng phẳng
QD	Quantum dots	Chấm lượng tử

TÓM LƯỢC

Đề tài sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT), tiến hành tối ưu cấu trúc của các tấm dạng β -PdPSe (Palladium phosphoselenide) hai chiều (2D p-PdPSe) 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-PdPSe năng lượng liên kết là -4.58 eV, năng lượng hình thành sau tối ưu của hai lớp ổn định ở mức -11.40 eV và năng lượng hình thành của ba lớp là -17.95 eV. Các khoảng cách của đa lớp cũng cho thấy sự ổn định sau tối ưu là 3.366 Å, kết quả này phù hợp với khoảng cách các lớp 2D p-PdPSe đã được tổng hợp từ thực nghiệm. Điều này chỉ ra rằng, hoàn toàn có thể tạo được các vật liệu khối p-PdPSe từ các tấm 2D xếp chồng lên nhau, tiến tới thiết kế các linh kiện điện tử dựa trên các tấm 2D p-PdPSe. Về đặc tính điện tử đề tài đã khảo sát cấu trúc vùng và mật độ trạng thái của các tấm 2D p-PdPSe. Kết quả khảo sát cho thấy tất cả các lớp đơn và đa lớp đều thể hiện đặc tính kim loại. Đề tài khảo sát phổ hấp thụ quang với kết quả ở cả đơn và đa lớp đều hấp thụ ánh sáng mạnh nhất ở vùng hồng ngoại gần, hứa hẹn tiềm năng cho các ứng dụng quang điện tử. Về tính chất vận chuyển điện tử ghi nhận hiệu ứng điện trở vi phân âm trong khoảng điện áp từ 0.15 V đến 0.8 V cho cấu trúc p-PdPSe đơn lớp, ngoài ra có sự tăng cường đáng kể cường độ dòng (10^9 lần) của mô hình thiết bị dựa trên hai lớp so với cấu trúc đơn lớp p-PdPSe. Ngoài ra, đề tài còn nghiên cứu bổ sung về ứng dụng của mô hình máy học trong mô phỏng và tính toán vật liệu.

ABSTRACT

This study utilizes Density Functional Theory (DFT) to perform structural optimization of two-dimensional (2D) pentagonal Palladium Phosphoselenide (p-PdPSe) in monolayer and multilayer configurations. The binding energy of the monolayer and the formation energies of the multilayers were calculated in detail, indicating their high stability. The binding energy for the p-PdPSe monolayer is -4.58 eV. The formation energy for the optimized bilayer is -11.40 eV, and for the trilayer, it is -17.95 eV. The optimized interlayer distance of the multilayer structure is 3.366 Å, which agrees well with experimental data for synthesized 2D p-PdPSe layers. This suggests the feasibility of fabricating bulk p-PdPSe materials by stacking these 2D sheets, paving the way for the design of electronic devices based on 2D p-PdPSe. Regarding electronic properties, the study investigated the band structure and density of states (DOS) of the 2D p-PdPSe sheets. The results show that all monolayer and multilayer configurations exhibit metallic characteristics. The investigation of the optical absorption spectrum reveals that both monolayer and multilayers strongly absorb light, primarily in the near-infrared (NIR) region, showing promise for optoelectronic applications. In terms of electronic transport properties, a negative differential resistance (NDR) effect was observed in the monolayer p-PdPSe structure within the voltage range of 0.15 V to 0.8 V. Furthermore, a significant current enhancement (10^9 times) was noted in the bilayer-based device model compared to its monolayer counterpart. Additionally, the study includes a supplementary investigation into the application of machine learning models for materials simulation and calculation.