

NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT CƠ HỌC CỦA VẬT LIỆU ĐƠN LỚP SiS_x ($x=1,2$)
STUDY ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF MONOLAYER SiS_x ($x = 1, 2$)TRẦN THẾ QUANG^{1*} NGUYỄN HOÀNG LINH^{2,3}, ĐINH THẾ HÙNG⁴,
ĐỖ VĂN TRƯỜNG⁵¹Khoa Công nghệ và Kỹ thuật, Trường Đại học Thái Bình, Hưng Yên, Việt Nam²Trường Đại học Quốc Gia Changwon, Changwon, Hàn Quốc³Viện Kỹ thuật và Công nghệ Ceramic Hàn Quốc, Jinju, Hàn Quốc⁴Trường Kỹ thuật Phenikaa, Đại học Phenikaa, Hà Nội, Việt Nam⁵Trường Cơ khí, Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội, Việt Nam

*Email liên hệ: tranthequang12@gmail.com

DOI: <https://doi.org/10.65154/jmst.2025.i84.862>**Tóm tắt**

Trong nghiên cứu này, đã khảo sát các tính chất cơ học của cấu trúc đơn lớp SiS_x ($x = 1, 2$) bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). Kết quả phân tích quan hệ ứng suất - biến dạng cho thấy cả SiS và SiS_2 có độ bền cơ học tốt, với biến dạng phá hủy lý tưởng theo phương xy đạt $\epsilon_{xy}=18\%$ với ứng suất tới hạn khoảng 9,8N/m. Đáng chú ý, SiS_2 thể hiện độ bền vượt trội hơn SiS , với mức biến dạng phá hủy lớn nhất đạt $\epsilon_{yy}=26\%$ theo phương y và ứng suất tới hạn 9,48N/m, trong khi giá trị thấp nhất ở cả hai vật liệu xuất hiện theo phương x, với $\epsilon_{xx}=14\%$. Ở mức biến dạng nhỏ ($\epsilon < 4\%$), SiS duy trì tính đàn hồi tốt hơn, cho thấy độ cứng cao hơn trong giai đoạn đầu của quá trình kéo giãn. Những đặc tính cơ học này khẳng định tiềm năng của SiS và SiS_2 cho các ứng dụng trong môi trường làm việc khắc nghiệt, đòi hỏi vật liệu có khả năng chịu tải cao và ổn định dưới ứng suất lớn. Đặc biệt, sự kết hợp giữa độ bền cơ học và tính linh hoạt khi biến dạng giúp hai vật liệu này trở thành ứng viên đầy hứa hẹn cho các thiết bị điện tử, quang điện và cơ điện tử thế hệ mới. Kết quả nghiên cứu không chỉ làm sáng tỏ đặc tính cơ học của SiS_x mà còn cung cấp cơ sở quan trọng cho việc định hướng phát triển và ứng dụng vật liệu này trong công nghệ bán dẫn tiên tiến.

Từ khóa: Cấu trúc đơn lớp, DFT, tính chất cơ học, biến dạng phá hủy.

Abstract

In this study, the mechanical properties of monolayer SiS_x ($x = 1, 2$) were investigated using density functional theory (DFT). The stress-strain analysis reveals that both SiS and SiS_2 exhibit

good mechanical strength, with an ideal failure strain of $\epsilon_{xy} \approx 18\%$ under biaxial strain and a corresponding critical stress of approximately 9.8 N/m. Notably, SiS_2 demonstrates superior mechanical resilience compared to SiS , with a maximum failure strain of $\epsilon_{yy} = 26\%$ and a critical stress of 9.48 N/m along the y-direction, whereas the lowest failure strain for both materials occurs along the x-direction ($\epsilon_{xx} = 14\%$). At small strain levels ($\epsilon < 4\%$), SiS retains better elastic behavior, indicating higher stiffness during the initial stage of stretching. These mechanical characteristics highlight the potential of SiS and SiS_2 for applications in harsh environments requiring high load-bearing capacity and structural stability under significant stress. In particular, the combination of mechanical robustness and strain flexibility makes these materials promising candidates for next-generation electronic, optoelectronic, and nanoelectromechanical (NEMS) devices. Overall, this study not only elucidates the intrinsic mechanical behavior of SiS_x monolayers but also provides a valuable foundation for their development and application in advanced semiconductor technologies.

Keywords: Monolayer structure, DFT, mechanical properties, fracture strain.

1. Giới thiệu

Vật liệu đơn lớp đang trở thành một lĩnh vực quan trọng trong ngành điện tử và công nghệ nhờ các đặc tính vượt trội của chúng. Chúng được cấu tạo từ các lớp nguyên tử siêu mỏng, có độ dày từ một đến vài nguyên tử và được xem là nền tảng tiềm năng cho sự phát triển của công nghệ quang điện kể từ khi graphene được chế tạo thành công [1]. Hiện nay, vật

liệu 2D đã và đang được ứng dụng rộng rãi trong nhiều lĩnh vực như cảm biến quang học, cơ bắp nhân tạo và thiết bị điện tử nano [2, 3]. Không chỉ mở ra tiềm năng ứng dụng thực tiễn, chúng còn thúc đẩy sự phát triển trong nhiều lĩnh vực khoa học và kỹ thuật tiên tiến.

Ngoài graphene, nhiều vật liệu 2D khác như MoS₂, boron nitride (BN) và ZnO đã được phát hiện [4-6]. Trong số đó, SiS và SiS₂ đơn lớp nổi bật với tiềm năng ứng dụng cao trong công nghệ điện tử và quang điện. Trong nghiên cứu của Ullah và các cộng sự đã chỉ ra rằng SiS đơn lớp có độ lệch mạng khoảng 0,3%, độ rộng vùng cấm đạt 2,18eV và độ linh động của hạt mang điện tử cao hơn đáng kể so với hạt mang lỗ trống - yếu tố quan trọng trong việc tách electron và lỗ trống, góp phần nâng cao hiệu suất của các thiết bị điện tử và quang điện [7]. Bên cạnh đó, Elsalam báo cáo rằng hệ số Seebeck của SiS đơn lớp tăng theo nhiệt độ, trong khi độ dẫn điện và độ dẫn nhiệt electron có xu hướng giảm, cho thấy khả năng tối ưu hóa đồng thời cả hai yếu tố này nhờ tăng độ linh động hạt mang [8]. Với SiS₂ đơn lớp, nghiên cứu của Guan và cộng sự xác định đây là vật liệu bán dẫn gián tiếp với độ rộng vùng cấm khoảng 2,34eV [9]. Bera chỉ ra rằng đơn lớp SiS₂ có hệ số Seebeck cao, (2100 μ V/K loại *n*, 2281 μ V/K loại *p*) và hệ số công suất nhiệt điện (PF) lần lượt là 15,61W/K²m (loại *n*) và 7,7 W/K²m (loại *p*) ở 300K [10].

Nhìn chung, các nghiên cứu trước đây đã chỉ ra rằng SiS và SiS₂ đơn lớp sở hữu nhiều đặc tính ưu việt về điện tử, nhiệt điện và quang học. Tuy nhiên, để khai thác tối đa tiềm năng ứng dụng trong thực tế, vẫn cần thêm nhiều nghiên cứu chuyên sâu hơn. Trong đó, việc đánh giá tính chất cơ học đóng vai trò quan trọng, không chỉ giúp xác định độ bền ở quy mô đơn lớp mà còn tạo nền tảng tối ưu hóa hiệu suất thiết bị sử dụng SiS và SiS₂.

Vì vậy, nghiên cứu này tập trung xác định hằng số mạng tinh thể, các đặc tính cơ học và ứng xử của vật liệu đơn lớp SiS và SiS₂ dưới tác động của biến dạng bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). Kết quả thu được không chỉ góp phần làm rõ đặc tính vật liệu mà còn mở ra triển vọng ứng dụng trong các thiết bị điện tử, quang điện tử và cảm biến thế hệ mới.

2. Phương pháp mô phỏng và tính toán

Các tính toán và mô phỏng được thực hiện bằng phương pháp nguyên lý đầu thông qua phần mềm Quantum Espresso (QE). Để đảm bảo độ chính xác, ngưỡng năng lượng cắt cho sóng phẳng và mật độ điện tích được thiết lập lần lượt là 60 Ry và 720 Ry, với lưới điểm *k* là 15 $\times$ 15 $\times$ 1 theo phương pháp Monkhorst-Pack. Quá trình tính toán sử dụng hàm tương quan

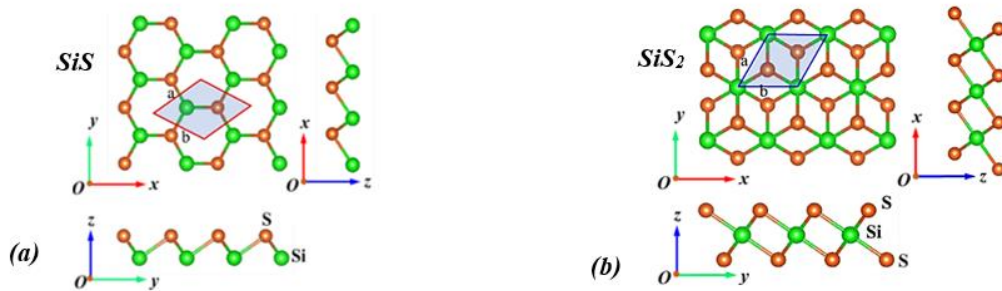
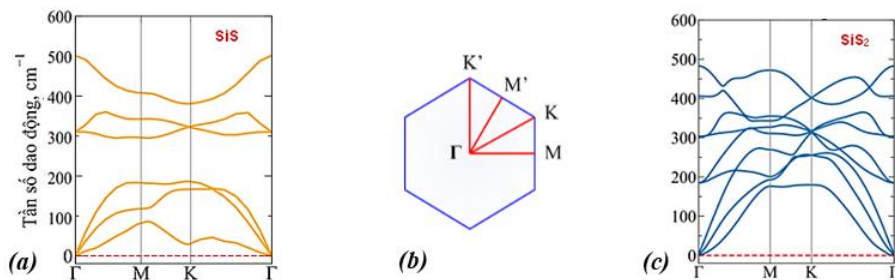
trao đổi GGA-PBE [11], với pseudopotential Optimized Norm-Conserving Vanderbilt (ONCV) PBE, phiên bản 1.2 [12]. Mô hình cấu trúc được mô phỏng với vùng chân không 30 Å theo phương *z* nhằm tránh sự tương tác giữa các lớp nguyên tử. Tối ưu hóa cấu trúc được thực hiện ở nhiệt độ 0K với điều kiện hội tụ: Lực tác dụng lên mỗi nguyên tử không vượt quá 5 $\times$ 10⁻³Ry/a.u. và ứng suất < 5 $\times$ 10⁻²GPa. Các tiêu điều kiện này đảm bảo trạng thái cân bằng được mô phỏng chính xác, tạo nền tảng cho các tính toán cơ học tiếp theo trên hệ SiS và SiS₂ đơn lớp.

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Tối ưu hóa cấu trúc và kiểm tra độ ổn định

Hình 1 mô tả cấu trúc đơn lớp SiS và SiS₂ dưới dạng hai chiều (2D), trong đó SiS gồm một nguyên tử Si và một nguyên tử S, còn SiS₂ gồm một nguyên tử Si và hai nguyên tử S. Các cấu trúc đơn lớp SiS và SiS₂ được tối ưu hóa trong điều kiện tiêu chuẩn tại nhiệt độ 0K bằng phương pháp phiếm hàm mật độ (DFT), đảm bảo trạng thái cân bằng năng lượng cực tiểu. Kết quả tối ưu hóa thu được về hằng số mạng tinh thể và các thông số vật liệu cơ bản được trình bày trong Bảng 1. Cụ thể, hằng số mạng tinh thể của SiS và SiS₂ lần lượt là *a* = *b* = 3,31Å và *a* = *b* = 3,28Å, phù hợp với các kết quả nghiên cứu trước đây [13, 14].

Để xác nhận tính ổn định của cấu trúc đơn lớp SiS và SiS₂, bài báo này đã tiến hành hai kiểm tra ổn định động lực học thông qua phổ phonon và ổn định tĩnh học qua hằng số đàn hồi. Kết quả cho thấy phổ phonon trong toàn bộ vùng Brillouin của SiS và SiS₂ đều sở hữu các nhánh dao động âm thanh ở tần số thấp và các nhánh quang học ở tần số cao, Hình 2 (a, c), với tần số dao động cực đại của SiS đạt 500 cm⁻¹, và của SiS₂ đạt ~490cm⁻¹, phản ánh độ bền liên kết mạnh giữa các nguyên tử. Đặc biệt, không xuất hiện bất kỳ tần số ảo trong vùng Brillouin, cho thấy các rung động nguyên tử không dẫn đến sự phá hủy cấu trúc, chứng minh mạng tinh thể không dễ bị phá hủy bởi dao động nguyên tử ngẫu nhiên. Về ổn định tĩnh học, các hằng số đàn hồi đã được tính theo tiêu chuẩn Born-Huang [15] và các giá trị này được báo cáo trong Bảng 1 đều thỏa mãn các điều kiện ổn định cơ học của cấu trúc lục giác, cụ thể là: $C_{11} > |C_{12}| > 0$ và $C_{66} > 0$, khẳng định tính chống biến dạng dưới ứng suất ngoài. Như vậy, việc kết hợp hai tiêu chuẩn này cho phép khẳng định của cấu trúc đơn lớp SiS và SiS₂ không chỉ duy trì trạng thái cân bằng dưới các ứng suất tĩnh mà còn chống lại sự mất ổn định do dao động nguyên tử, từ đó đảm bảo tính ổn định và tồn tại trong các điều kiện thực tế.

Hình 1. Mô hình cấu trúc nguyên tử của đơn lớp: (a) SiS; (b) SiS₂Hình 2. Phổ dao động phonon của cấu trúc đơn lớp: (a) SiS; (b) Vùng Brillouin; (c) SiS₂Bảng 1. Hằng số mạng tinh thể - a (Å), hằng số đàn hồi - C_{ij} (N/m), mô-đun đàn hồi - E (N/m) và hệ số Poisson - ν của vật liệu đơn lớp SiS và SiS₂

Vật liệu	$a = b$	C_{11}	C_{12}	C_{22}	C_{66}	$E_{xx} = E_{yy}$	$\nu_{xx} = \nu_{yy}$
SiS	3,31	121,03	19,63	121,03	50,64	117,85	0,16
SiS ₂	3,28	127,60	50,87	127,67	38,41	107,33	0,398

3.2. Tính chất cơ học

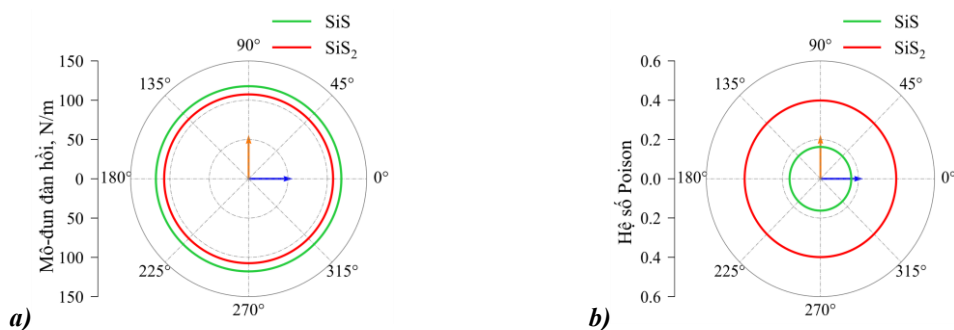
Cấu trúc đơn lớp của vật liệu được phân tích trong khuôn khổ lý thuyết đàn hồi tuyến tính hai chiều, với các thành phần hằng số đàn hồi hoàn toàn trong mặt phẳng gồm C_{11} , C_{12} , C_{22} và C_{66} , như trình bày ở Bảng 1. Nhằm đánh giá mức độ đẳng hướng của vật liệu trong miền đàn hồi, mối quan hệ giữa góc kéo φ mô-đun đàn hồi (E) và hệ số Poisson (ν) đã được phân tích, được xác định thông qua các công thức [14]:

$$E(\varphi) = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}\xi^4 + C_{22}\zeta^4 - \xi^2\zeta^2 \left(2C_{12} - \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} \right)} \quad (1)$$

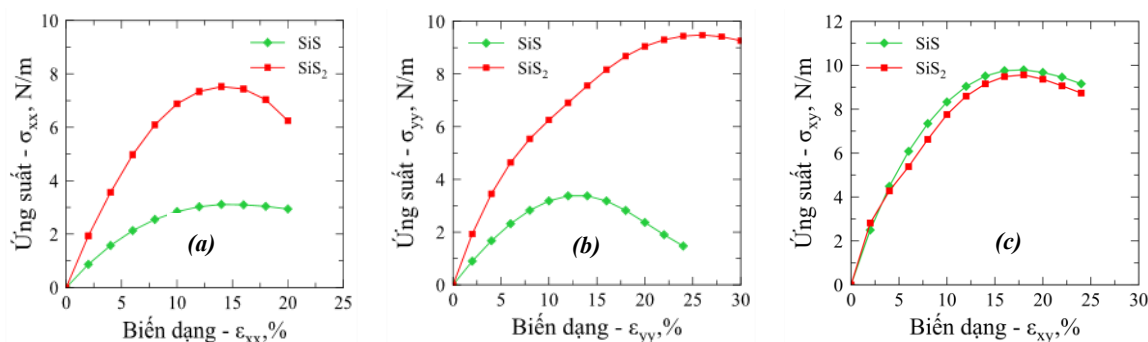
$$\nu(\varphi) = \frac{C_{12}(\xi^4 + \zeta^4) - \xi^2\zeta^2 \left(C_{11} + C_{22} - \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} \right)}{C_{11}\xi^4 + C_{22}\zeta^4 - \xi^2\zeta^2 \left(2C_{12} - \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} \right)} \quad (2)$$

Trong đó, C_{11} , C_{12} , C_{22} và C_{66} là các hằng số đàn hồi của vật liệu. $\xi = \sin^4(\varphi)$, $\zeta = \cos^4(\varphi)$ với φ là góc được tạo bởi véc-tơ kéo và phương Ox. Việc phân tích các phương trình này giúp làm rõ mức độ bất đẳng hướng của cấu trúc SiS và SiS₂, từ đó cung cấp góc độ phân tích sâu hơn về cơ chế đàn hồi của vật liệu.

Hình 3, mô tả kết quả sự phân tán của E và ν theo góc kéo φ . Phân tích dữ liệu cho thấy, cả hai đại lượng này đều có mức độ phân tán đồng nhất ở mọi góc kéo φ , điều này khẳng định tính đẳng hướng của vật liệu SiS và SiS₂ trong miền đàn hồi. Sự đẳng hướng này chứng minh rằng các tính chất cơ học của vật liệu không phụ thuộc vào hướng tác dụng của ứng suất hay biến dạng trong giới hạn của miền đàn hồi. Kết quả cho thấy mô-đun đàn hồi của SiS ($E = 117,85\text{N/m}$) cao hơn SiS₂ ($E = 107,33\text{N/m}$), phản ánh độ cứng cơ học lớn hơn ở SiS. Sự khác biệt này có thể do cấu trúc liên kết và độ bền liên kết nguyên tử trong mạng tinh thể. So với Janus WSe (137,7N/m) [16] và CN₂ (323,68N/m) [17], mô-đun đàn hồi của cả SiS và SiS₂ đều thấp hơn đáng kể. Đặc tính này gợi ý tiềm năng ứng dụng của chúng trong các lĩnh vực yêu cầu khả năng chịu biến dạng cơ học cao, như thiết bị điện tử dẻo. Ngoài ra, hệ số Poisson của SiS ($\nu=0,16$) thấp hơn đáng kể so với SiS₂ ($\nu=0,398$), cho thấy SiS có tính chất cơ học kém đẳng hướng hơn và ít bị biến dạng ngang hơn so với SiS₂ khi chịu ứng suất dọc. Hệ số Poisson của SiS₂ cao cho thấy vật liệu này có xu hướng giãn ngang mạnh hơn khi bị kéo dọc, do đó linh hoạt hơn SiS.



Hình 3. Đồ thị phân tán giá trị của mô-đun đàn hồi - E và hệ số Poisson - ν phụ thuộc vào góc θ



Hình 4. Quan hệ ứng suất - biến dạng của cấu trúc SiS và SiS2 đơn lớp theo các phương: (a) x ; (b) y ; (c) xy

Tính chất cơ học của vật liệu đơn lớp SiS và SiS2 còn được thể hiện qua mối quan hệ giữa ứng suất và biến dạng theo các phương x , y và đồng thời theo hai phương x và y (xy). Biến dạng cơ học được mô phỏng bằng cách điều chỉnh kích thước mạng tinh thể theo công thức:

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0} \quad (3)$$

Với, l_0 và l lần lượt là hằng số mạng tinh thể ở trạng thái cân bằng và trạng thái biến dạng. Đối với vật liệu hai chiều (2D), E có đơn vị là N/m do không có độ dày xác định như ở vật liệu ba chiều (3D). Vì vậy, ứng suất được biểu diễn theo lực trên đơn vị chiều dài thay vì diện tích, phản ánh đặc trưng cơ học trong mặt phẳng của hệ 2D.

Hình 4 mô tả mối quan hệ giữa biến dạng kéo và ứng suất của vật liệu đơn lớp SiS và SiS2 theo phương x , y và đồng thời xy . Dưới biến dạng theo phương x , cả hai vật liệu thể hiện ứng xử cơ học tương đối ổn định với biến dạng phá hủy đạt $\varepsilon_{xx}=14\%$. Tuy nhiên, SiS2 có ứng suất tới hạn cao hơn đáng kể ($\sigma_{xx}=7,52$ N/m so với $\sigma_{xx}=3,1$ N/m của SiS), cho thấy độ bền cơ học vượt trội hơn, như mô tả trên Hình 4 (a). Dưới biến dạng theo phương y , SiS2 thể hiện khả năng chịu ứng suất tốt hơn với biến dạng phá hủy $\varepsilon_{yy}=26\%$ và ứng suất tới hạn đạt $\sigma_{yy}=9,48$ N/m, trong khi SiS chỉ đạt $\varepsilon_{yy}=14\%$ và $\sigma_{yy}=3,38$ N/m, như thể hiện trên Hình 4 (b). Điều này cho thấy SiS2 có tính đàn hồi cao hơn

và khả năng chịu tải tốt hơn theo phương y . Khi chịu biến dạng đồng thời theo phương xy , cả hai vật liệu đều có biến dạng phá hủy tương đối đồng đều ($\varepsilon_{xy}=18\%$) với ứng suất tới hạn xấp xỉ nhau ($\sigma_{xy}=9,8$ N/m đối với SiS và $\sigma_{xy}=9,56$ N/m đối với SiS2). Tuy nhiên, sự khác biệt rõ rệt được quan sát trong giai đoạn biến dạng nhỏ ($\varepsilon < 4\%$), khi SiS duy trì tính đàn hồi lên đến 4%, trong khi SiS2 chỉ khoảng 2%, như trên Hình 4 (c). Phân tích cho thấy SiS có độ cứng cao hơn ở mức biến dạng thấp, có thể là lợi thế trong các ứng dụng yêu cầu độ ổn định cơ học ở giai đoạn đầu của biến dạng. So sánh với một số vật liệu đơn lớp khác đã được nghiên cứu, như PbS2 (0,15 N/m) [18], GeSe (6,2 N/m) [19], nhận thấy SiS và SiS2 có độ bền cơ học vượt trội, với giá trị ứng suất cao hơn đáng kể. Kết quả này không chỉ khẳng định khả năng chịu tải cao của các vật liệu này mà còn mở ra tiềm năng ứng dụng trong các môi trường yêu cầu độ bền cơ học lớn, như thiết bị cơ điện tử, cảm biến áp suất và vật liệu chịu lực. Đặc biệt, sự kết hợp giữa tính bền cao và khả năng biến dạng linh hoạt giúp SiS và SiS2 trở thành ứng viên tiềm năng cho các hệ thống nano-cơ điện tử và các thiết bị tiên tiến trong tương lai.

4. Kết luận

Phân tích sự phụ thuộc của E và ν theo góc kéo φ cho thấy cả SiS và SiS2 đều có tính đẳng hướng trong miền đàn hồi. Cụ thể, SiS thể hiện mô-đun đàn hồi cao

hơn ($E = 117,85\text{N/m}$ so với $107,33\text{N/m}$ của SiS_2), phản ánh độ cứng vượt trội ở mức biến dạng thấp. Ngược lại, SiS_2 có hệ số Poisson lớn hơn đáng kể ($\nu=0,398$ so với $0,16$ của SiS), cho thấy khả năng giãn ngang và độ linh hoạt hơn khi chịu lực kéo dọc.

Phân tích quan hệ ứng suất - biến dạng cho thấy SiS_2 có độ bền cơ học vượt trội so với SiS , với ứng suất tới hạn đạt $7,52\text{N/m}$ (phương x) và $9,48\text{N/m}$ (phương y), so với $3,1\text{N/m}$ và $3,38\text{N/m}$ tương ứng ở SiS . Khi chịu biến dạng đồng thời theo cả hai phương x và y , hai vật liệu đạt ngưỡng ứng suất tới hạn xấp xỉ $9,8\text{N/m}$. Tuy nhiên, trong miền biến dạng nhỏ ($\varepsilon < 4\%$), SiS cho thấy tính đàn hồi tốt hơn, phản ánh độ cứng cao hơn ở mức biến dạng thấp, trong khi SiS_2 thể hiện linh hoạt và bền hơn ở biến dạng lớn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] K. S. Novoselov et al. (2004). *Electric field effect in atomically thin carbon films*, Sci., Vol. 306, No.(1), pp.666-669.
- [2] V. A. Cao et al. (2021). *Enhanced piezoelectric output performance of the $\text{S}_m\text{S}_2/\text{S}_m\text{S}$ heterostructure thin-film piezoelectric nanogenerator realized by atomic layer deposition*, ACS nano, Vol. 15, No.(2), pp.10428-10436.
- [3] L. Zhang et al. (2023). *Design, synthesis, and application of some two-dimensional materials*, Chem. Sci., Vol. 14, No.(3), pp.5266-5290.
- [4] M. Ye et al. (2015). *Recent advancement on the optical properties of two-dimensional molybdenum disulfide (MoS_2) thin films*, in Photonics, Vol.2, No.4, pp.288-307.
- [5] V. Guerra et al. (2019). *Thermal conductivity of 2D nano-structured boron nitride (BN) and its composites with polymers*, Progr. Mater. Sci., Vol. 100, No.(5), pp.170-186.
- [6] D. M. Cruz et al. (2020). *Green nanotechnology-based zinc oxide (ZnO) nanomaterials for biomedical applications: a review*, J. Phys. Mater., Vol.3, No.(7), pp.034005-36.
- [7] S. Ullah et al. (2023). *Theoretical prediction of the electronic structure, optical properties and photocatalytic performance of type-I SiS/GeC and type-II SiS/ZnO heterostructures*, RSC Adv., Vol. 13, No.(8), pp.7436-7442.
- [8] A. Abd-Elsalam et al. (2022). *Structure and thermoelectric behavior of polyaniline-based/CNT-composite*, Curr. Appl., Vol.36, No.(11), pp.88-92.
- [9] Y. Guan et al. (2020). *Tunable electronic properties of type-II $\text{SiS}_2/\text{WSe}_2$ hetero-bilayers*, Nanomaterials, Vol.10, No.(17), pp.2037-12.
- [10] J. Bera et al. (2021). *Phonon Coupled Scattering Caused Ultralow Lattice Thermal Conductivity and Its Role in The Remarkable Thermoelectric Performance of Newly Predicted SiS_2 and SiSe_2 monolayers*, Cond-Mat.Mtrl-Sci., Vol.5, No.(18), pp.1-23.
- [11] J. P. Perdew et al. (1996). *Generalized gradient approximation made simple*, Physical Review Letters, Vol.77, No.(18), pp.3865-3868.
- [12] D. R. Hamann (2013). *Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials*, Physical Review B, Vol.88, No.(8), pp.085117-10.
- [13] Q. Alam et al. (2021). *First-principles study of the electronic structures and optical and photocatalytic performances of van der Waals heterostructures of SiS , P and SiC monolayers*, RSC Advances, Vol. 11, No.(24), pp.14263-14268.
- [14] N.H.Linh et al.(2023), *Prediction of mechanical, electronic and optical properties of monolayer $1\text{TSi-dichalcogenides}$ via first-principles theory*, Mater. Today Commun., Vol. 36, No.(1), pp.1-16.
- [15] F. Mouhat et al. (2014). *Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems*, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., Vol.90, No.(22), pp.224104-4.
- [16] V. V. Thanh et al. (2020). *First-principles study of mechanical, electronic and optical properties of Janus structure in transition metal dichalcogenides*, Appl. Surf. Sci., Vol.526, pp. 146730-30.
- [17] V. V. Thanh et al. (2019). *Charge-induced electromechanical actuation of two-dimensional hexagonal and pentagonal materials*, Phys Chem Chem Phys, Vol.21, No.(40), pp.22377-22384.
- [18] N. H. Linh et al. (2023). *First-principles investigation on the electromechanical properties of monolayer $1\text{HPb-Dichalcogenides}$* , Mater. Res. Soc. Korea, Vol. 33, No.(5), pp.189-194.
- [19] N. H. Linh et al. (2025). *First-principles analysis of mechanical, optoelectronics and piezoelectric properties in buckled honeycomb GeSe monolayer*, Surf. Sci., Vol.755, pp.122703-8.

Ngày nhận bài:	11/06/2025
Ngày nhận bản sửa:	13/07/2025
Ngày duyệt đăng:	16/07/2025