

ĐỀ CƯƠNG LUẬN VĂN THẠC SĨ

MÔ PHỎNG QUÁ TRÌNH TẠO  
MÀNG SIC PHẪNG HAI CHIỀU TỪ  
TRẠNG THÁI LỎNG

GVHD: GS.TS. Võ Văn Hoàng

HVTH: Lê Hoàng Sang

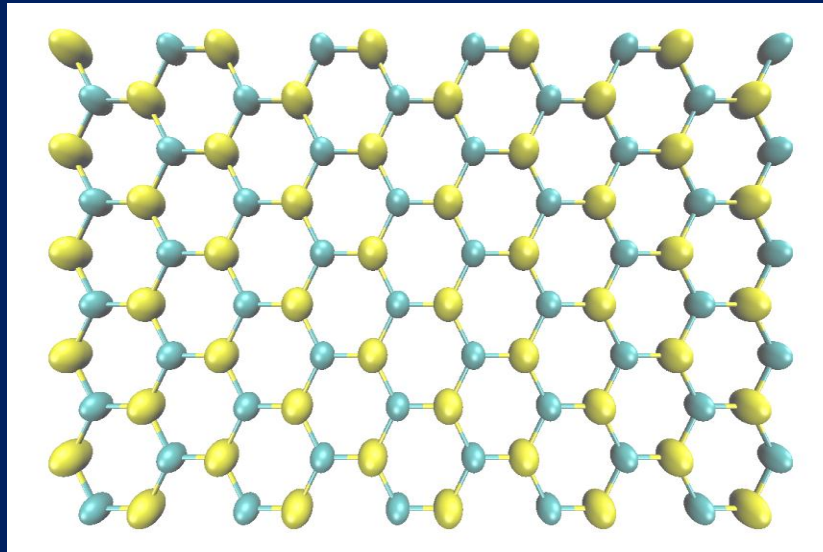
MSHV: 13121396

# Nội dung trình bày

1. Tổng quan
2. Tính toán và mô phỏng
3. Dự kiến kết quả và kế hoạch nghiên cứu
4. Đề xuất và kiến nghị

# Tổng quan

- Màng SiC hai chiều (2D) : ứng cử viên thay thế graphene và silicene trong các ứng dụng quang điện tử.



# Tổng quan

- Một số ưu điểm của SiC 2D về mặt lý thuyết
  - Độ cứng tốt (chỉ thua graphene và BN)

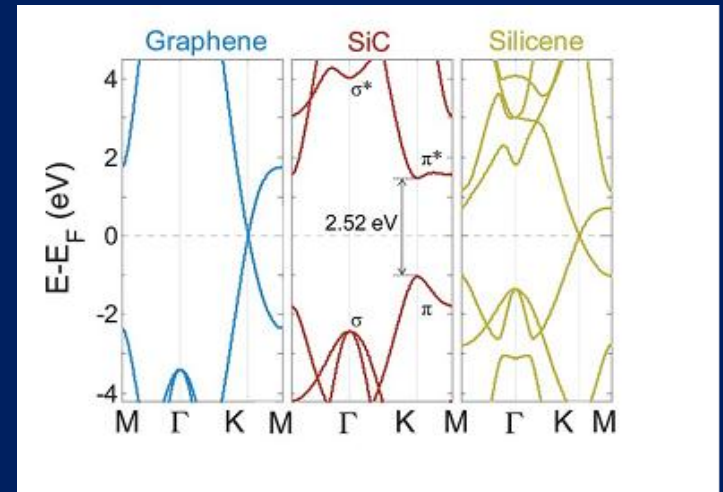
H. Şahin et al *Phys. Rev. B* **80** 155453 (2009)

- Độ rộng dải cấm ( $E_g$ ) ~ 2.5 eV : phù hợp LEDs ở vùng ánh sáng xanh

Xiao Lin et al *J. Mater.*

*Chem. C* **1** 2131-2135 (2013)

- Hoạt động ở nhiệt độ cao



# Tổng quan

- Một số tính chất thú vị của SiC 2D về mặt lý thuyết
  - Không từ tính => Có từ tính : khiếm khuyết Si  
*E. Bekaroglu et al Phys. Rev. B 81 075433 (2010)*
  - $E_g$  của SiC nanoribbon armchair =  $f(\text{width})$  : thiết kế các thiết bị quang điện tử  
*E. Bekaroglu et al Phys. Rev. B 81 075433 (2010)*
  - SiC nanoribbon zigzac với width  $\sim 4\text{nm}$  thể hiện tính chất bán kim loại : ứng dụng spin điện tử  
*Lian Sun et al J. Chem. Phys. 129 174114 (2008)*

# Tổng quan

- Chứng minh sự tồn tại và tổng hợp SiC 2D
  - Dự đoán về khả năng hình thành SiC 2D  
*Yoshiyuki Miyamoto et al Appl. Phys. Lett. 80 586 (2002)*
  - Được chứng minh có thể tồn tại ổn định  
*H. Şahin et al Phys. Rev. B 80 155453 (2009)*  
*E. Bekaroglu et al Phys. Rev. B 81 075433 (2010)*
  - Tổng hợp thành công từ phương pháp bóc tách bột SiC  
*S. S. Lin J. Phys. Chem. C 116 3951–3955 (2012)*

# Tổng quan

- Ý nghĩa của đề tài
  - SiC là vật liệu không phổ biến trong tự nhiên (chỉ tồn tại rất ít trong đá thiên thạch) => được tổng hợp thông qua các phản ứng hóa học và thu được ở trạng thái lỏng.
  - Đề tài đi tiên phong trong việc mô phỏng quá trình hình thành việc tạo màng SiC phẳng hai chiều từ trạng thái lỏng.

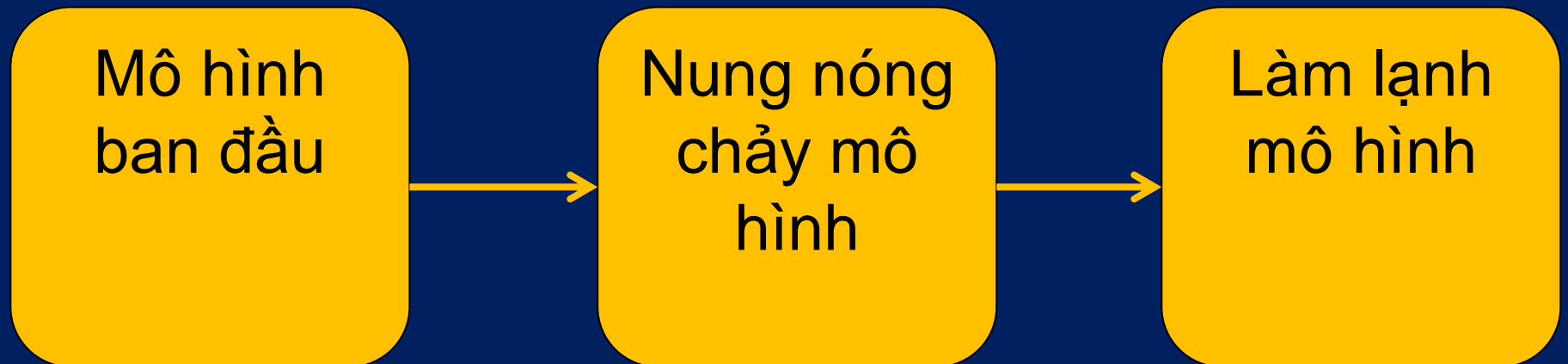
# Tổng quan

- Mục tiêu của đề tài:
  - Khảo sát sự thay đổi của cấu trúc và các tính chất nhiệt động học trong quá trình tạo màng SiC từ mô hình SiC lỏng hai chiều.

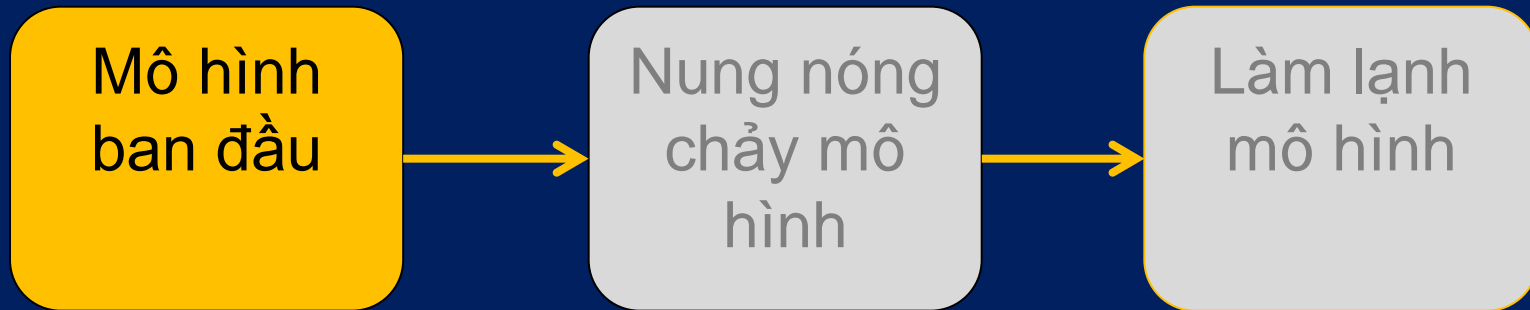


# Tính toán và mô phỏng

- Phương pháp mô phỏng : Động lực học phân tử cổ điển
  - Tính tương tác của các hạt => Lực tương tác => gia tốc, vận tốc, tọa độ => nhiệt độ, năng lượng...
- Các bước chính tiến hành mô phỏng



# Tính toán và mô phỏng



- Mô hình gồm : 10.000 nguyên tử
- Thế tương tác : Tersoff

J. Tersoff *Phys. Rev. B* **37** 6991 (1988)

# Tính toán và mô phỏng

- Thế tương tác Tersoff

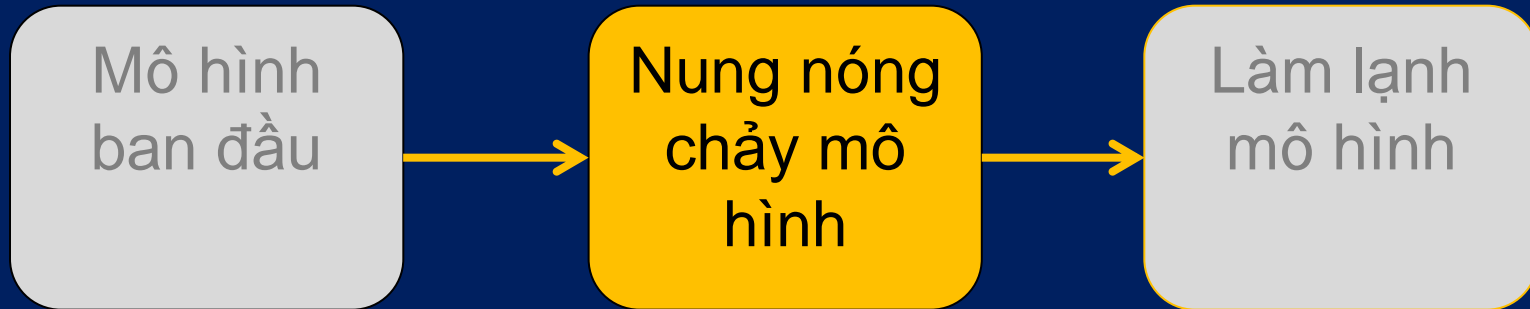
$$V_{ij} = f_C(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]$$

$$f_R(r) = A \exp(-\lambda_1 r)$$

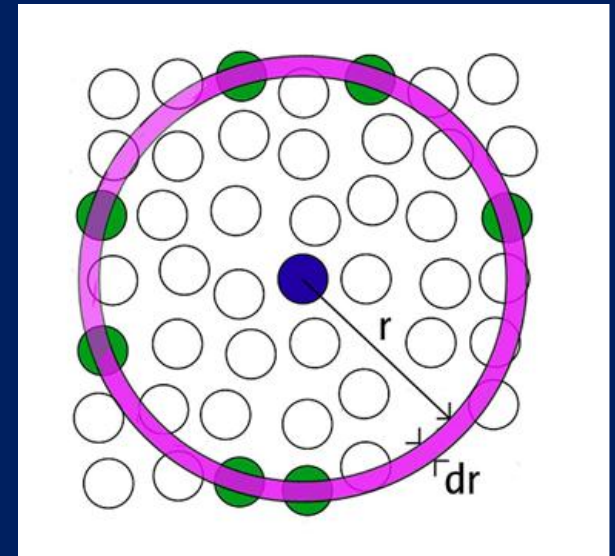
$$f_A(r) = -B \exp(-\lambda_2 r)$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, r_{ij} < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin \left[ \frac{\pi}{2} (r_{ij} - R) / D \right], R - D < r_{ij} < R + D \\ 0, r_{ij} > R + D \end{cases}$$

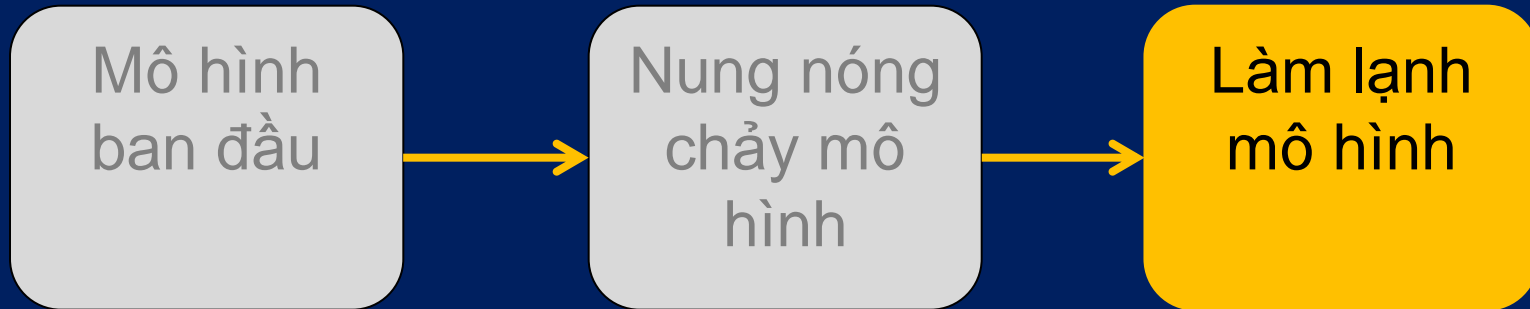
# Tính toán và mô phỏng



- Dùng hàm phân bố xuyên tâm kiểm tra mô hình nóng chảy hoàn toàn hay chưa.

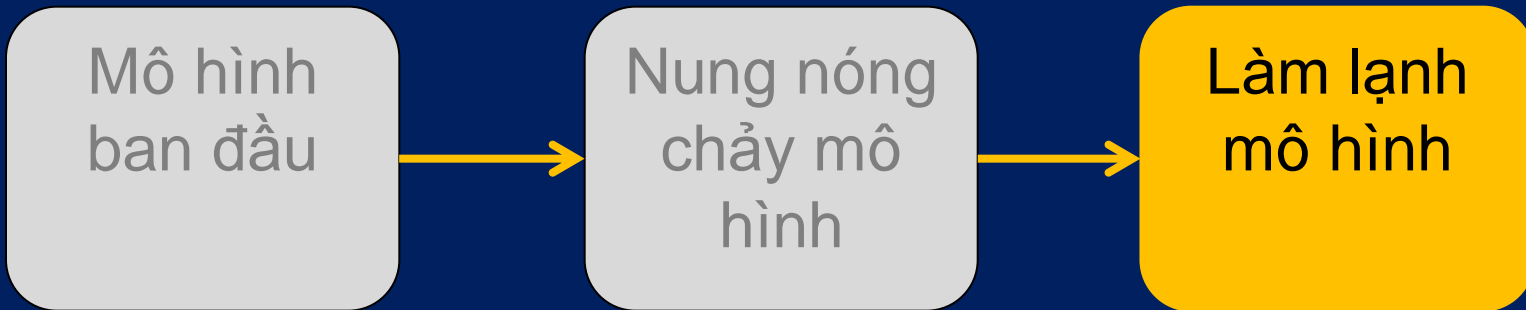


# Tính toán và mô phỏng



- Quá trình làm lạnh mô hình :
  - Xác định sự thay đổi của cấu trúc (số phối vị, số góc, kích thước vòng) và các giá trị nhiệt động (năng lượng toàn phần, nhiệt dung riêng)

# Tính toán và mô phỏng



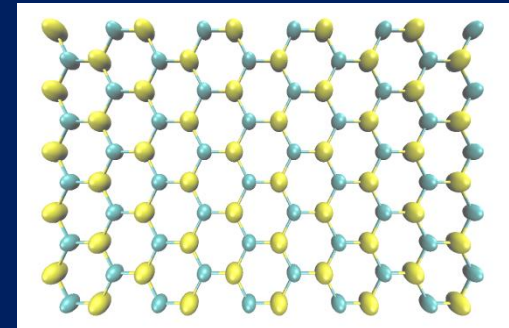
- Mô hình cuối cùng thu được:
  - Xác định cấu trúc (số phối vị, số góc, kích thước vòng, khoảng cách giữa các nguyên tử)

# DỰ KIẾN KẾT QUẢ VÀ KẾ HOẠCH NGHIÊN CỨU

- Các giá trị nhiệt động của hệ (năng lượng toàn phần, nhiệt dung riêng) hay cấu trúc của mô hình (số phối vị trung bình, kích thước vòng...) sẽ có những thay đổi đột ngột tại giá trị nhiệt độ nóng chảy/đông đặc từ đó có thể xác định được nhiệt độ nóng chảy của màng SiC 2D

# DỰ KIẾN KẾT QUẢ VÀ KẾ HOẠCH NGHIÊN CỨU

- Màng SiC 2D cấu trúc tổ ong lục giác đều => mô hình cuối cùng thu được dự đoán có:
  - Số phối vị  $\sim 3$
  - Phân bố góc  $\sim 120^\circ$
  - Kích thước vòng  $\sim 6$
  - Khoảng cách giữa các nguyên tử  $\sim 1.78\text{\AA}$  (S. S. Lin *J. Phys. Chem. C* **116** 3951–3955 2012)
- Dự kiến sẽ báo cáo tại 01 Hội nghị quốc tế và hướng tới viết bài báo quốc tế





# DỰ KIẾN KẾT QUẢ VÀ KẾ HOẠCH NGHIÊN CỨU

[illegible]

# ĐỀ XUẤT VÀ KIẾN NGHỊ

- GVHD đề xuất: GS.TS. Võ Văn Hoàng, bộ môn Vật Lý Ứng Dụng, Khoa Khoa Học Ứng Dụng, Đại học Bách Khoa Thành phố Hồ Chí Minh.

Xin chân thành cảm ơn sự lắng  
nghe của quý hội đồng!