

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

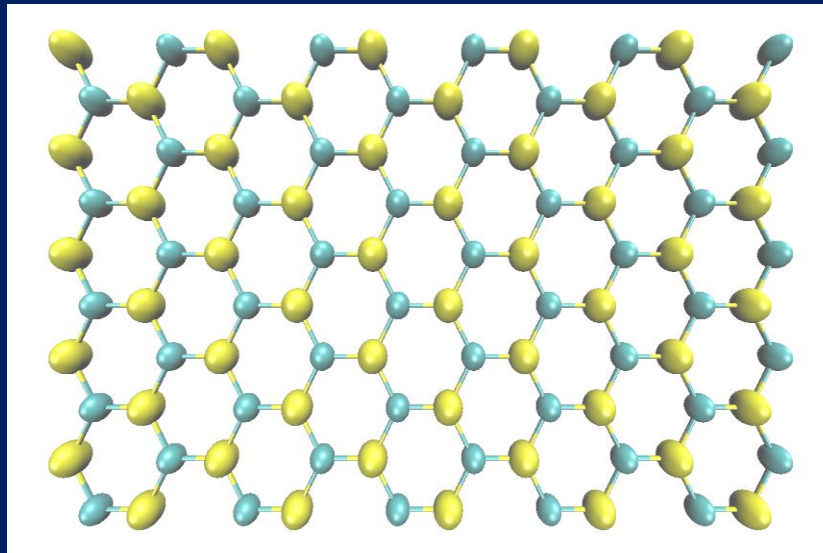
MSHV: 13121396

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

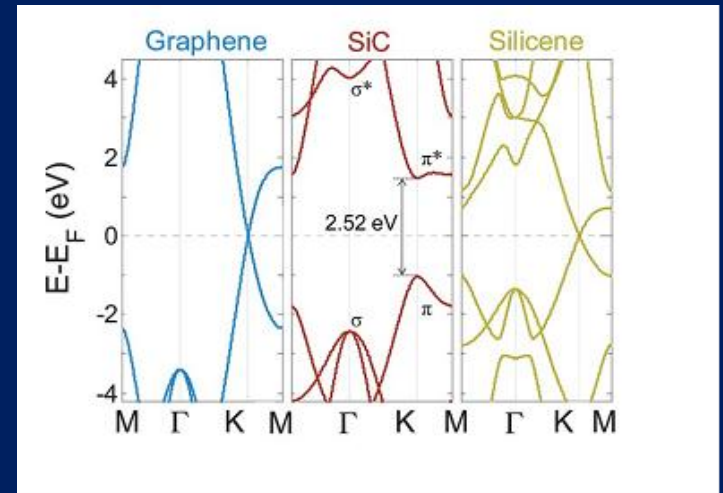
Tổng quan

- 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 2009 Phys. Rev. B 80 155453
 - Độ rộng dải cấm (E_g) ~ 2.5 eV : phù hợp LEDs ở vùng ánh sáng xanh
Xiao Lin et al 2013 J. Mater. Chem. C 1 2131-2135
 - 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 2010 Phys. Rev. B 81 075433
 - E_g của SiC nanoribbon armchair = $f(\text{width})$: thiết kế các thiết bị quang điện tử nano
E. Bekaroglu et al 2010 Phys. Rev. B 81 075433
 - 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 2008 J. Chem. Phys. 129 174114

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 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 586
 - Được chứng minh có thể tồn tại ổn định
H. Şahin et al 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155453
E. Bekaroglu et al 2010 *Phys. Rev. B* **81** 075433
 - Tổng hợp thành công từ phương pháp bóc tách bột SiC
S. S. Lin 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 3951–3955

Tổng quan

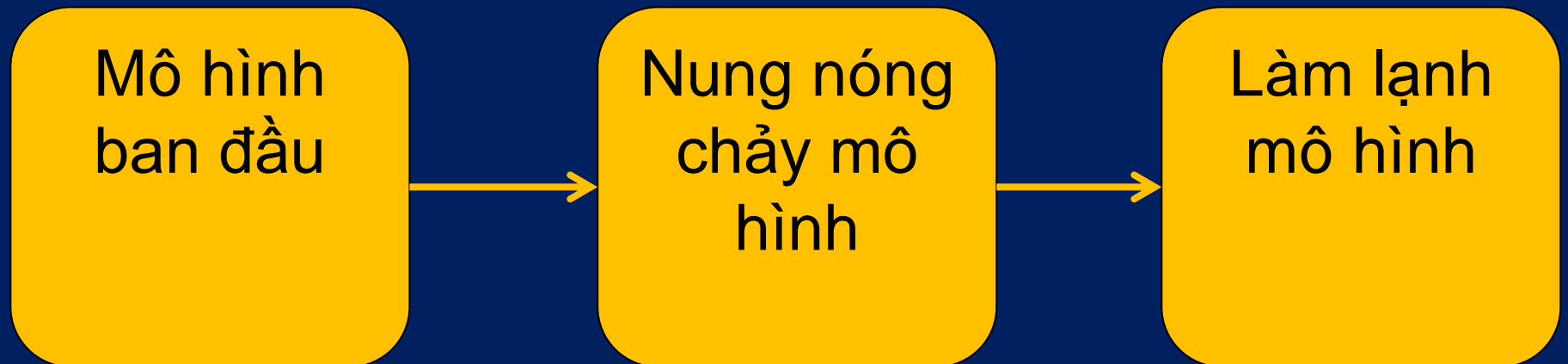
- Ý nghĩa của đề tài
 - SiC là vật liệu không phổ biến trong tự nhiên (chỉ tồn tại rất ít trong đá thiên thạch) => được tổng hợp thông qua các phản ứng hóa học và thu được ở trạng thái lỏng.
 - Đề tài đi tiên phong trong việc mô phỏng quá trình hình thành việc tạo màng SiC phẳng hai chiều từ trạng thái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

Tổng quan

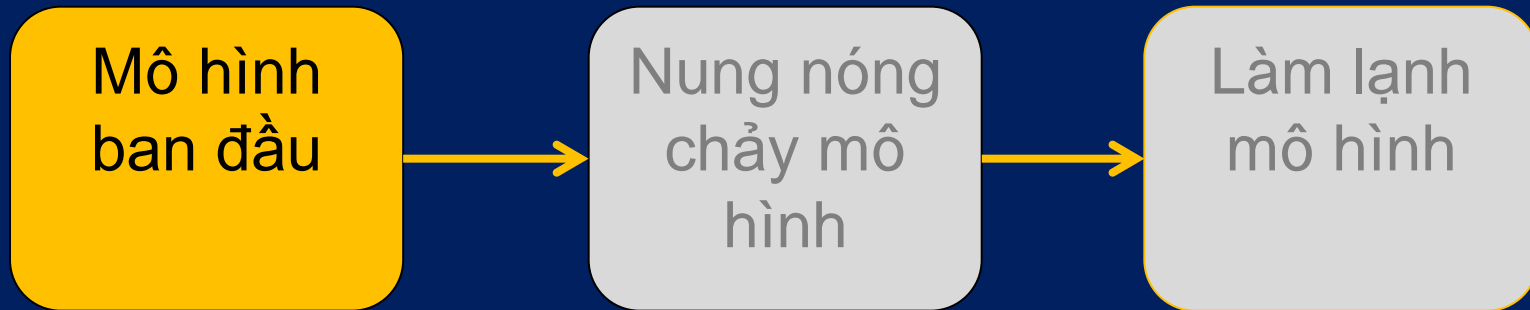
- Mục tiêu của đề tài:
 - Khảo sát sự thay đổi của cấu trúc và các tính chất nhiệt động học trong quá trình tạo màng SiC từ mô hình SiC lỏng hai chiều.

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

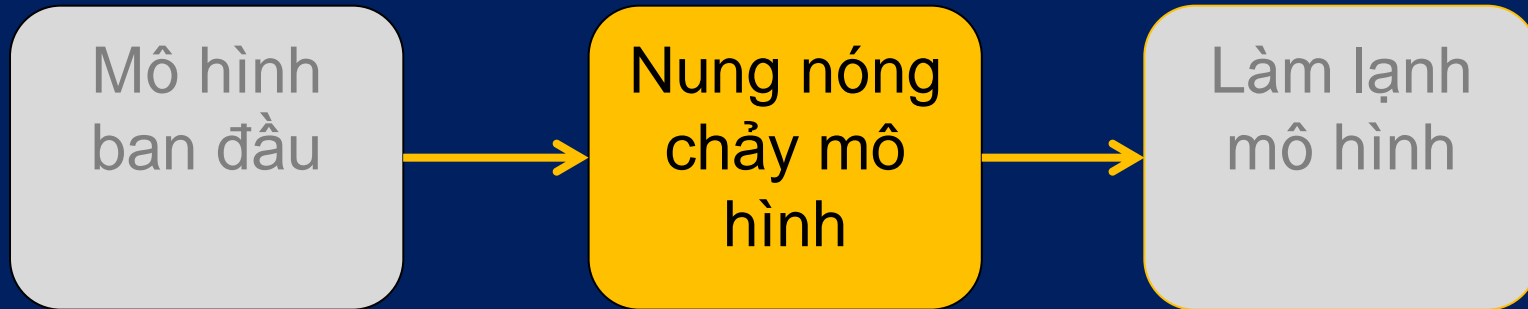


- Mô hình gồm : 10.000 nguyên tử
- Thế tương tác : Tersoff

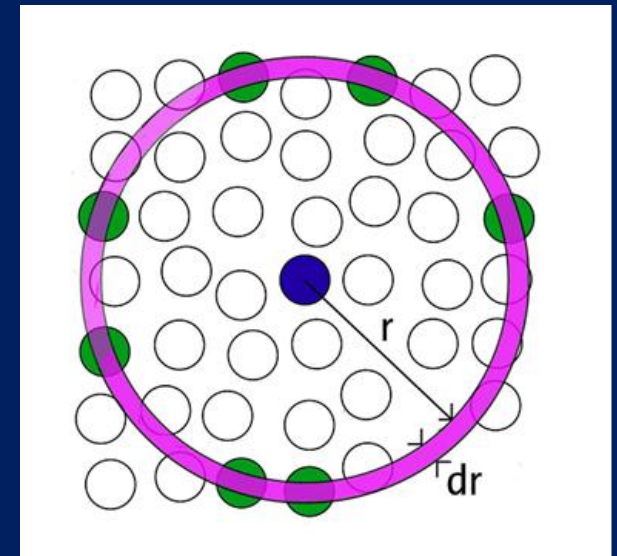
J. Tersoff 1988 *Phys. Rev. B* **37** 6991

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

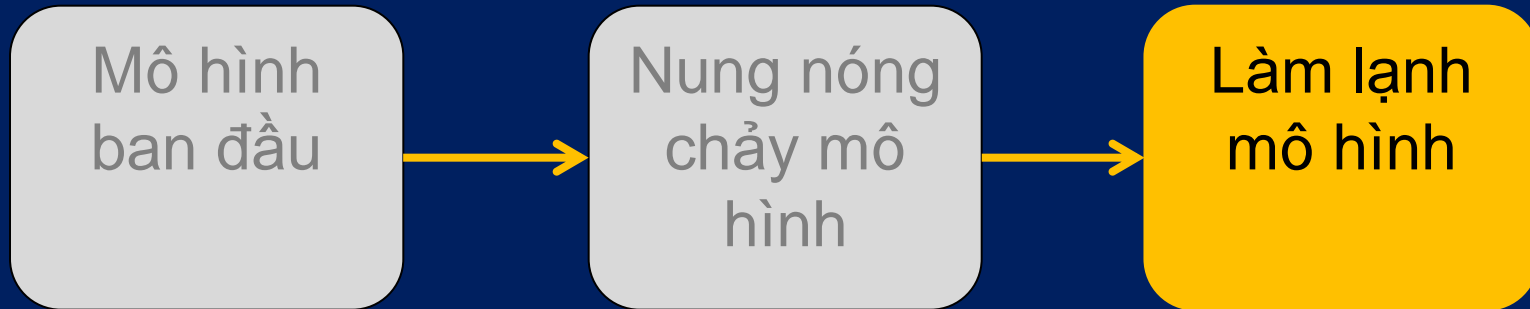
Tính toán và mô phỏng



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

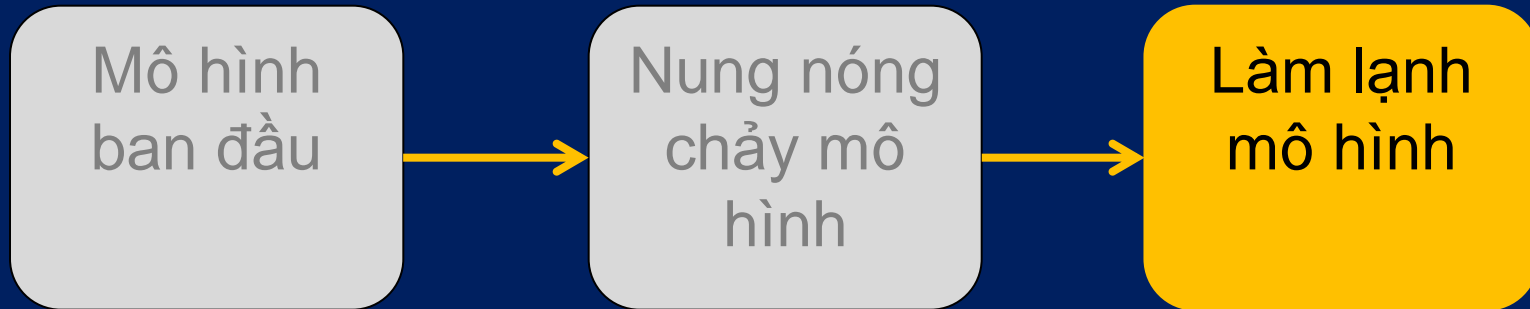


Tính toán và mô phỏng



- 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 tung 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 ~ 3
 - Phân bố góc $\sim 120^\circ$
 - Kích thước vòng ~ 6
 - Khoảng cách giữa các nguyên tử $\sim 1.78\text{\AA}$ (S. S. Lin 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 3951–3955)
- 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

Công việc	T2 /15	T3	T4	T5	T6	T7	T8	T9	T 10	T 11	T 12	T1 /16
Tìm hiểu đề tài và tổng hợp tài liệu												
Xây dựng chương trình mô phỏng và chạy thử.												
Chạy chương trình chính thức và xử lý kết quả												
Viết luận văn và báo cáo luận văn trước hội đồng												

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!