

STRUCTURAL EVOLUTION OF GaN 2D MATERIALS: INSIGHTS FROM MOLECULAR DYNAMICS STUDY

Mai Van Dung^{1*}, Tran Thanh Dung¹, Doan Thi Thanh¹, Nguyen Van Yen²
Thidakham Nammavong³, Pham Huu Kien³

¹Thu Dau Mot University, ²Duy Tan University

³TNU - University of Education

ARTICLE INFO	ABSTRACT
<p>Received: 01/5/2022</p> <p>Revised: 31/5/2022</p> <p>Published: 31/5/2022</p>	<p>In this paper, molecular dynamics simulation is applied to investigate the structural evolution of 2D GaN materials using Stillinger – Weber interaction potential at 0 GPa. We have applied periodic boundary conditions to x and y directions. The process of structural evolution is analyzed via the total energy per atom, heat capacity, radial distribution function, distribution of coordination number, bond length, size of ring and atomic visualization, respectively. Our observations show that the phase transition is a first-order transition. Simulated results indicate that the melting temperature of the model is equal of 3760 ± 2 K. To see the correctness of the built models, the results of the present work are compared with the previous experimental and simulation data. The results indicated that the simulated total energy per atom, heat capacity, radial distribution function, distribution of coordination number and bond length are in good agreement with the experimental and other simulation data.</p>
<p>KEYWORDS</p> <p>Molecular dynamics simulation</p> <p>Structural evolution</p> <p>Phase transition</p> <p>Heat capacity</p> <p>Melting temperature</p>	

SỰ THAY ĐỔI CẤU TRÚC CỦA VẬT LIỆU HAI CHIỀU GaN: LÀM RÕ TỪ NGHIÊN CỨU ĐỘNG LỰC HỌC PHÂN TỬ

Mai Văn Dung^{1*}, Trần Thanh Dũng¹, Đoàn Thị Thanh¹, Nguyễn Văn Yên²
Thidakham Nammavong³, Phạm Hữu Kiên³

¹Trường Đại học Thủ Dầu Một, ²Trường Đại học Duy Tân,

³Trường Đại học Sư phạm – ĐH Thái Nguyên

THÔNG TIN BÀI BÁO	TÓM TẮT
<p>Ngày nhận bài: 01/5/2022</p> <p>Ngày hoàn thiện: 31/5/2022</p> <p>Ngày đăng: 31/5/2022</p>	<p>Trong bài báo này, mô phỏng động lực học phân tử đã được sử dụng để nghiên cứu quá trình nóng chảy của mô hình vật liệu hai chiều GaN với thế tương tác Stillinger – Weber ở áp suất 0 GPa. Điều kiện biên được áp dụng cho hai hướng x và y. Quá trình thay đổi cấu trúc của vật liệu được phân tích thông qua năng lượng tổng trên mỗi nguyên tử, nhiệt dung riêng, hàm phân bố xuyên tâm (PBXT), phân bố số phối trí, phân bố khoảng cách, phân bố vòng và mô hình trực quan. Chúng tôi quan sát thấy rằng sự chuyển pha của vật liệu là chuyển pha loại một. Kết quả mô phỏng của chúng tôi cho thấy nhiệt độ nóng chảy của mô hình vật liệu là 3760 ± 2 K. Để thấy được mục độ đúng đắn của mô hình xây dựng được, các kết quả nghiên cứu đã được so sánh với các kết quả thực nghiệm và mô phỏng trước đó. Các kết quả chỉ ra rằng năng lượng tổng trên nguyên tử, nhiệt dung riêng, hàm PBXT, phân bố số phối trí, độ dài liên kết phù hợp tốt với số liệu thực nghiệm và mô phỏng.</p>
<p>TỪ KHÓA</p> <p>Mô phỏng động lực học phân tử</p> <p>Sự tiến triển của cấu trúc</p> <p>Chuyển pha</p> <p>Nhiệt dung riêng</p> <p>Nhiệt độ nóng chảy</p>	

DOI: <https://doi.org/10.34238/tnu-jst.5931>

* Corresponding author. Email: dungmv@tdmu.edu.vn

1. Giới thiệu

Giống như vật liệu graphene, rất nhiều vật liệu 2D khác đã được tách khỏi cấu trúc tinh thể phân lớp của thành phần tương ứng, có liên kết cộng hóa trị nội lớp mạnh và liên kết giữa các lớp yếu bị chi phối bởi tương tác van der Waals yếu [1]-[3] chẳng hạn như BN [4], kim loại chuyển tiếp đơn lớp dichalcogenide [5], [6], chalcogenide kim loại nhóm III và IV [7], [8], phốt pho [9], [10]. Ngoài ra, các vật liệu 2D vênh như silicene, germanene và stanene [11]-[14] đã được báo cáo là ổn định, trong đó sự tương tác giữa các lớp trong vật liệu bị chi phối bởi sự hình thành liên kết cộng hóa trị sp^3 . Các vật liệu bán dẫn nhóm III nitride hai chiều đã được quan tâm rất lớn của các nhà nghiên cứu cho các ứng dụng trong các lĩnh vực quang điện tử. Gallium nitride GaN được xem là chất bán dẫn thế hệ thứ ba đã và đang được quan tâm nhiều trong các ngành công nghiệp cũng như trong học thuật. Điều đó cho thấy, GaN là vật liệu có nhiều hứa hẹn cho các ứng dụng trong ngành điện tử và các thiết bị quang điện tử [15], [16]. Vật liệu đa tinh thể GaN đầu tiên được tổng hợp vào năm 1932 bởi Johnson và cộng sự, bằng cách cho NH_3 chảy qua Ga lỏng ở nhiệt độ cao [17]. Kết quả kiểm tra cho thấy, vật liệu này có độ ổn định lên đến $800^\circ C$. Đến năm 1972, Manasevit và cộng sự [18], [19] đã tạo ra các lớp GaN mọc ghép (epitaxy) pha hơi hữu cơ kim loại đầu tiên (MOVPE). Tuy nhiên, các lớp này vẫn còn thô và không trong suốt do sự không khớp về mạng tinh thể giữa sapphire và GaN. Đáng chú ý vào năm 2014 giải thưởng Nobel về Vật lý đã trao cho Isamu Akasaki, Hiroshi Amano và Shuji Nakamura cho phát minh ra điốt phát ánh sáng xanh hiệu quả giúp tạo ra các nguồn ánh sáng trắng sáng và tiết kiệm năng lượng, được thực hiện chủ yếu dựa trên GaN [20]. Vật liệu GaN đơn lớp với cấu trúc tổ ong phẳng đã được chế tạo thành công bằng cách tái tạo lại cấu trúc GaN wurtzite dạng khối thành cấu trúc graphit 2D [21], [22]. Cho đến nay, các công trình nghiên cứu về GaN đơn lớp tập trung chủ yếu vào các đặc tính điện, quang học và đặc tính điện áp, hứa hẹn những ứng dụng tiềm năng trong quang điện tử, chẳng hạn như điốt phát sáng và laser [23], [24]. Bên cạnh các nghiên cứu thực nghiệm, các đặc trưng cấu trúc của vật liệu GaN cũng được quan tâm nghiên cứu bằng các phương pháp lý thuyết khác nhau [25]-[28]. Lee và cộng sự [25] đã sử dụng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ để dự đoán cấu trúc điện tử của ống GaN (GaNNT). Kết quả nghiên cứu cho thấy rằng, cấu trúc của ống GaNNT dạng zigzag và dạng armchair có vùng cấm trực tiếp và gián tiếp dọc theo trục của ống. Đến năm 2004, Jeng và cộng sự [26] đã khảo sát các đặc tính cơ học của ống GaNNT bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử cổ điển (MD). Các tác giả đã tìm thấy rằng nhiệt độ có thể có ảnh hưởng đáng kể đến các đặc tính cơ học của GaNNT. Tiếp theo đó, vào năm 2006, Wang và cộng sự [27] đã nghiên cứu quá trình nóng chảy của GaNNT đơn tinh thể kiểu wurtzite cũng bằng phương pháp mô phỏng MD. Các kết quả cho thấy rằng, sự nóng chảy ban đầu xảy ra ở bề mặt của ống và sau đó lan rộng vào bên trong ống. Phương pháp mô phỏng động lực học phân tử cổ điển không cân bằng cũng được tác giả Wang và cộng sự sử dụng để tính toán độ dẫn nhiệt của GaNNT dọc theo trục của ống. Các tác giả đã chỉ ra rằng, khi nhiệt độ tăng thì độ dẫn nhiệt của ống giảm xuống [28]. Nhiệt độ nóng chảy của vật liệu khối GaN vẫn là một vấn đề chưa được hiểu biết rõ ràng vì sự khó khăn của thực nghiệm liên quan đến nhiệt độ nóng chảy và áp suất rất cao để ngăn chặn sự phân hủy của N_2 trước khi nóng chảy [27]. Dự đoán lý thuyết của tác giả Van Vechten cho thấy rằng, nhiệt độ nóng chảy của vật liệu khối GaN là 2791 K [29], trong khi đó Nord và cộng sự đã sử dụng phương pháp mô phỏng MD để xác định nhiệt độ nóng chảy của GaN là $3500 \pm 500\text{ K}$ ở áp suất 20 kbars [30]. Cũng bằng phương pháp mô phỏng MD đối với vật liệu GaN một pha và hai pha, nhóm tác giả Harafuji và cộng sự đã chỉ ra rằng nhiệt độ nóng chảy của vật liệu là 3200 K và 2550 K ở áp suất $10\text{--}4\text{ GPa}$ tương ứng [31]. Các đặc tính vật lý của vật liệu GaN có cấu trúc nano đã được quan tâm nghiên cứu, tuy nhiên những hiểu biết về quá trình nóng chảy của vật liệu GaN tinh thể đơn lớp vẫn còn nhiều tranh luận.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng phương pháp mô phỏng MD để làm rõ quá trình nóng chảy của vật liệu GaN hai chiều. Quá trình nóng chảy của vật liệu được đặc trưng bởi sự

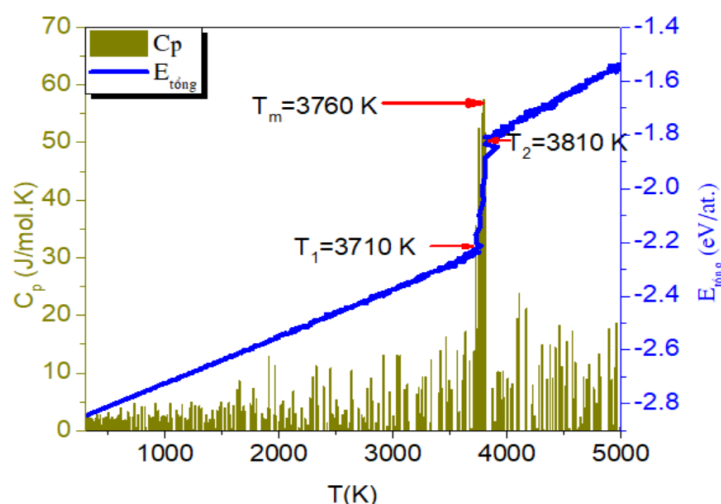
thay đổi của các đại lượng như: năng lượng tổng trên mỗi nguyên tử, nhiệt dung riêng, hàm phân bố xuyên tâm (PBXT), phân bố số phối trí, phân bố khoảng cách, phân bố vòng cũng như mô hình trực quan hai chiều. Vì vậy, các đại lượng này được sử dụng để xác định nhiệt độ chuyển pha cũng như sự thay đổi cấu trúc của vật liệu khi nhiệt độ thay đổi ở áp suất bằng 0 GPa.

2. Phương pháp nghiên cứu

Quá trình nóng chảy của mô hình GaN hai chiều phẳng được nghiên cứu bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử với thể tương tác Stillinger – Weber (SW) với các hệ số thể được lấy từ tài liệu tham khảo [32]. Thể tương tác SW không chỉ tái hiện được các đặc tính cơ học cơ bản, các đặc trưng cấu trúc mà còn có thể mô tả tốt cấu trúc nguyên tử của vật liệu. Mô hình tinh thể hai chiều GaN bao gồm 10400 (5200 nguyên tử Ga và 5200 nguyên tử N) nguyên tử được xây dựng từ cấu trúc GaN wurtzite, chiều dài liên kết Ga-N là 1,87 Å được lấy từ kết quả tính toán bằng phương pháp mô phỏng DFT của nhóm tác giả Chen và cộng sự [33]. Kích thước của mô hình là $208.2886 \times 222.0096 \text{ \AA}^2$. Chúng tôi sử dụng phần mềm LAMMPS cho mô phỏng của hệ với thuật toán Verlet và bước thời gian mô phỏng là 0,001 ps [34]. Mô hình GaN hai chiều ban đầu được tạo ra ở nhiệt độ 300 K và được hồi phục trong thời gian 10^5 bước mô phỏng cho đến khi hệ đạt trạng thái cân bằng. Sau đó, hệ được nung nóng từ 300 K đến 5000 K với tốc độ nung nóng là 10^{12} K/s ở chế độ NPT với áp suất bằng 0 GPa. Để kiểm soát áp suất, chúng tôi sử dụng bộ điều áp Nose-Hoover được thực hiện trong LAMMPS [34]. Điều kiện biên tuần hoàn được áp dụng cho các hướng x và y , các nguyên tử theo hướng z được cố định ở vị trí $z=8.474 \text{ \AA}$. Phân bố vòng được tính toán bằng phần mềm ISAACS [35]. Để trực quan hoá mô hình hai chiều của vật liệu GaN, chúng tôi sử dụng phần mềm VMD [36]. Để tính toán phân bố số phối trí và phân bố khoảng cách, chúng tôi sử dụng bán kính cắt bằng 2,47 Å là vị trí nhỏ nhất sau đỉnh đầu tiên của hàm PBXT ở nhiệt độ 5000 K. Cần lưu ý rằng, để phân tích các thông số cấu trúc, các mô hình nhận được ở mỗi nhiệt độ sẽ được hồi phục trong khoảng thời gian 10^5 bước mô phỏng.

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Sự thay đổi của năng lượng tổng và nhiệt dung riêng theo nhiệt độ

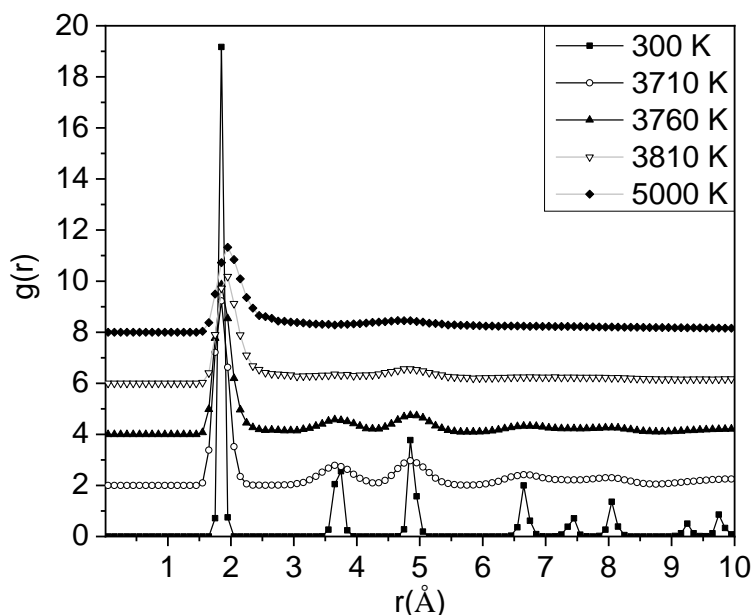


Hình 1. Đồ thị của năng lượng tổng trên mỗi nguyên tử và nhiệt dung riêng theo nhiệt độ

Hình 1 cho thấy sự phụ thuộc của năng lượng tổng ($E_{\text{tổng}}$) trên mỗi nguyên tử theo nhiệt độ (đường màu xanh). Chúng ta có thể thấy trong khoảng nhiệt độ từ 300 K đến 3710 K, năng lượng tổng trên mỗi nguyên tử biến đổi tuyến tính với nhiệt độ. Điều này cho thấy vật liệu đang ở trạng thái rắn với dạng cấu trúc tinh thể lục giác, trong đó các nguyên tử của mô hình chủ yếu thực hiện các dao động nhiệt xung quanh vị trí cân bằng của chúng.

Ở nhiệt độ $T_1 = 3710$ K, năng lượng tổng trên mỗi nguyên tử tăng đột ngột cho đến nhiệt độ $T_2 = 3810$ K. Điều này có nghĩa là mô hình bắt đầu xảy ra sự nóng chảy ở nhiệt độ 3710 K. Như vậy chúng ta có thể thấy rằng, quá trình nóng chảy diễn ra trong khoảng nhiệt độ từ 3710 K đến 3810 K. Trong khoảng nhiệt độ lớn hơn nhiệt độ $T_2 = 3810$ K, năng lượng tổng trên mỗi nguyên tử lại biến đổi tuyến tính theo nhiệt độ. Điều này có nghĩa là vật liệu đã chuyển sang trạng thái lỏng hoàn toàn. Như vậy, nhiệt độ nóng chảy của vật liệu được xác định là $T_m = (T_1 + T_2)/2 = 3760$ K. Giá trị này rất gần với nhiệt độ nóng chảy 3500 ± 500 K được tính toán bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử (MD) ở áp suất 20 kbar của tác giả Nord và cộng sự [30]. Tuy nhiên, nhiệt độ nóng chảy hoàn toàn $T_2 = 3810$ K thấp hơn giá trị 4000 K. Nhiệt độ nóng chảy T_m được tìm thấy khá cao so với kết quả 3200 K của tác giả Harafuji và cộng sự [31]. Kết quả mô phỏng của chúng tôi cũng cao hơn so với kết quả thực nghiệm 3400 K của tác giả Porowski và cộng sự [37] được thực hiện ở áp suất 9 GPa và lớn hơn rất nhiều so với các kết quả thực nghiệm 2493 K [38] và 2573 K [39]. Tuy nhiên, giá trị $T_m=3760$ K thấp hơn nhiều so với nhiệt độ nóng chảy 4200 K của ống nano GaN [27]. Có thể thấy rằng, các kết quả tính toán nhiệt độ nóng chảy của vật liệu GaN có sự khác nhau đáng kể. Cần chú ý rằng, nhiệt độ nóng chảy của vật liệu GaN có sự khác nhau là do sự khác nhau về điều kiện áp suất, cũng như dạng cấu trúc của vật liệu (dạng khối hoặc dạng ống). Kết quả tính toán của chúng tôi dựa trên mô hình GaN hai chiều và ở điều kiện áp suất 0 GPa. Nhiệt độ nóng chảy của vật liệu cũng được xác định thông qua nhiệt dung riêng (đường màu vàng đậm Hình 1). Nhiệt dung riêng ở áp suất là hằng số $P=0$ GPa được xác định bởi hệ thức $C_p = \frac{\Delta E}{\Delta T}$, trong đó khoảng nhiệt độ $\Delta T=10$ K. Chúng ta có thể thấy rằng, C_p có một đỉnh cao nhất xung quanh nhiệt độ 3760 K. Điều này cho thấy sự chuyển pha của vật liệu là chuyển pha loại một và nhiệt độ $T_m=3760$ K được xem là nhiệt độ nóng chảy của vật liệu phù hợp với giá trị được xác định trên hàm năng lượng tổng.

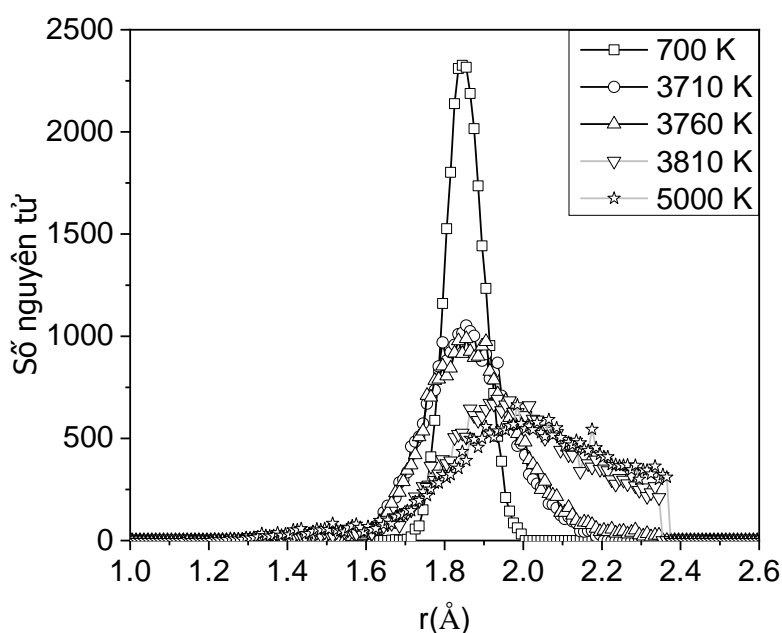
3.2. Hàm phân bố xuyên tâm dưới ảnh hưởng của nhiệt độ



Hình 2. Hàm phân bố xuyên tâm của cặp Ga-N ở các nhiệt độ khác nhau

Hình 2 cho thấy hàm phân bố xuyên tâm của mô hình vật liệu GaN thay đổi theo nhiệt độ. Chúng ta có thể thấy rằng, ở nhiệt độ 300 K, hàm PBXT có nhiều đỉnh nhọn và cao, độ cao đỉnh đầu tiên rất lớn có giá trị khoảng 19,05 Å. Hình dạng của đỉnh cao và nhọn cho thấy ở nhiệt độ này mô hình vật liệu đang ở trạng thái rắn tinh thể với trật tự cấu trúc cao. Ở nhiệt độ 3710 K, độ cao của các đỉnh giảm mạnh và đỉnh thứ nhất cao khoảng 9,2 Å, đỉnh thứ hai và thứ ba có độ cao rất nhỏ, một số đỉnh ở xa hơn không còn xuất hiện. Điều này cũng cho thấy rằng quá trình nóng chảy của vật liệu bắt đầu xảy ra. Quá trình nóng chảy của vật liệu xảy ra rõ ràng hơn khi nhiệt độ tăng đến 3760 K, ở nhiệt độ này có thể thấy rằng độ cao đỉnh thứ nhất tiếp tục giảm mạnh, hình dạng đỉnh không nhọn và mở rộng hơn. Đỉnh thứ hai và đỉnh thứ ba giảm rất mạnh. Điều này có nghĩa mô hình đã bắt đầu chuyển sang trạng thái nóng chảy. Tuy nhiên, ở nhiệt độ này mô hình chưa chuyển sang trạng thái lỏng hoàn toàn mà tồn tại đồng thời trạng thái rắn – lỏng. Tại nhiệt độ 3810 K, hàm PBXT chỉ tồn tại một đỉnh duy nhất với độ cao rất nhỏ, đỉnh thứ hai và đỉnh thứ ba không còn tồn tại. Điều đó cho thấy mô hình đã chuyển sang trạng thái lỏng hoàn toàn. Hiện tượng này càng thể hiện rõ ràng qua hàm PBXT ở nhiệt độ 5000 K. Chúng ta cũng có thể thấy rằng, ở nhiệt độ $T < T_m$ khoảng cách Ga-N tập trung chủ yếu xung quanh giá trị 1,87 Å. Tuy nhiên, khi nhiệt độ tăng đến $T > T_m$ khoảng cách Ga-N tăng. Hiện tượng khoảng cách Ga-N tăng khi nhiệt độ tăng từ 3760 K đến 5000 K giống như hiện tượng khi nung nóng các cấu trúc tinh thể đơn nguyên tử đã được giải thích trong nghiên cứu [40].

3.3. Phân bố khoảng cách



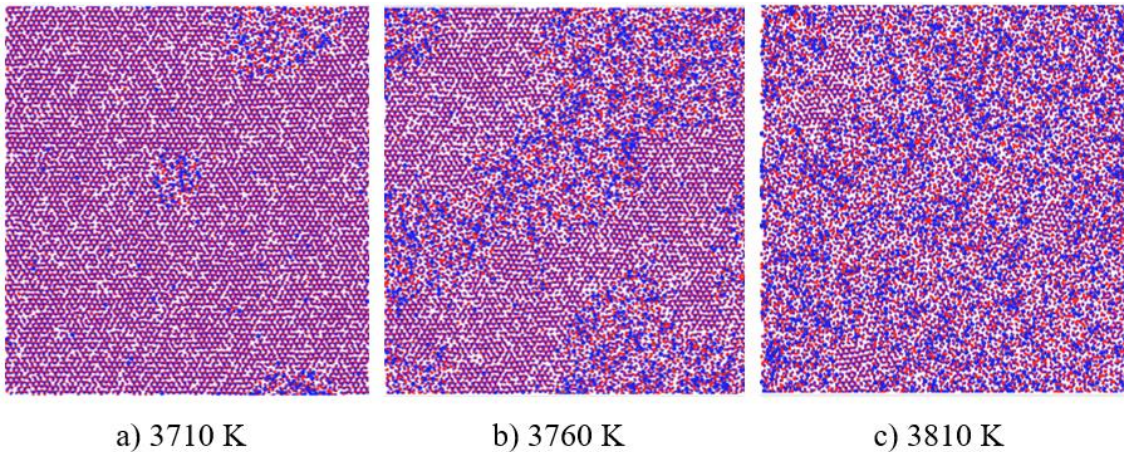
Hình 3. Phân bố khoảng cách Ga-N ở các nhiệt độ khác nhau

Chi tiết hơn về quá trình nóng chảy của vật liệu được mô tả trên Hình 3. Hình 3 cho thấy sự phân bố khoảng cách ở các nhiệt độ khác nhau. Chúng ta có thể thấy rằng ở nhiệt độ thấp (ở 700 K), phân bố khoảng cách phân bố trong vùng hẹp và độ cao của đỉnh rất lớn, vị trí của đỉnh tập trung ở 1,87 Å tương ứng với vị trí của đỉnh đã được chỉ ra trên hàm PBXT (ở Hình 2). Khi nhiệt độ tăng, phân bố khoảng cách mở rộng hơn và vị trí đỉnh gần như không đổi cho đến nhiệt độ 3760 K. Tuy nhiên, ở nhiệt độ lớn hơn nhiệt độ $T_m=3760$ K vị trí đỉnh dịch đến khoảng cách lớn

hơn, cụ thể ở nhiệt độ 3810 K vị trí đỉnh ở 1,93 Å và ở nhiệt độ 5000 K ở vị trí 1,98 Å tương ứng với vị trí đỉnh của hàm PBXT trên Hình 2.

3.4. Mô hình trực quan

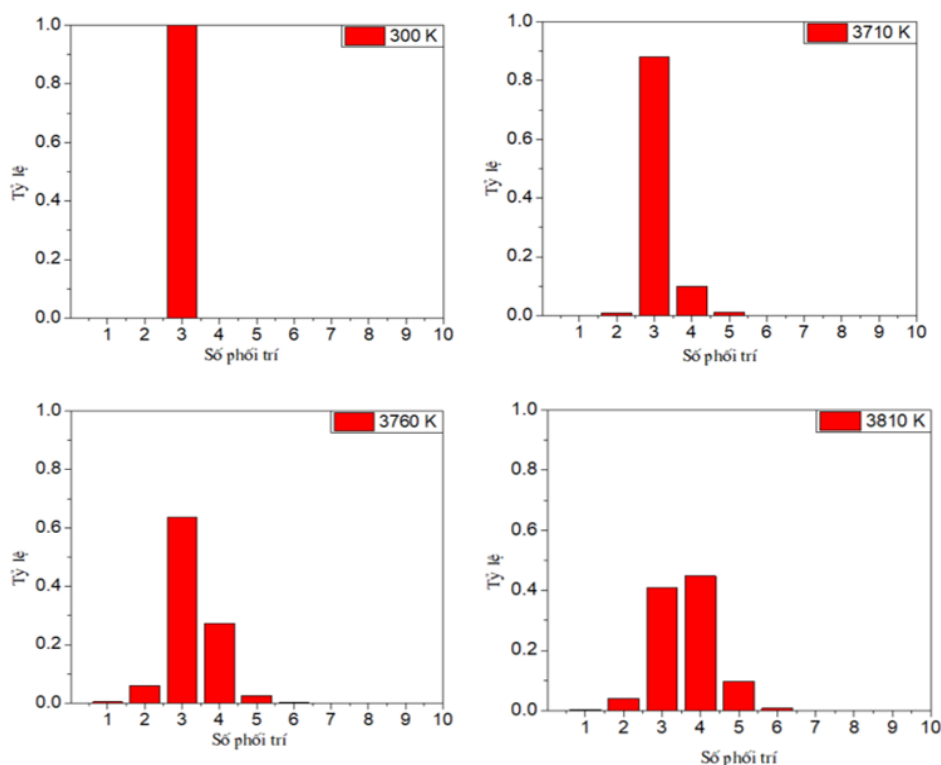
Quá trình nóng chảy của vật liệu GaN cũng được xem xét thông qua kết quả trực quan mô hình hai chiều xung quanh nhiệt độ nóng chảy. Hình 4 cho thấy cấu trúc hai chiều của mô hình GaN ở ba nhiệt độ 3710 K, 3760 K và 3810 K. Có thể thấy rằng, ở nhiệt độ 3710 K cấu trúc hai chiều bắt đầu xuất hiện các khuyết tật cấu trúc bên cạnh cấu trúc lục giác. Vị trí xuất hiện các khuyết tật chính là điểm khởi phát cho các quá trình nóng chảy của vật liệu. Các khuyết tật cấu trúc xuất hiện nhiều hơn ở nhiệt độ 3760 K. Tuy nhiên, trong mô hình vẫn tồn tại đồng thời cả cấu trúc tinh thể và các khuyết tật cấu trúc. Điều này cho thấy sự chuyển pha cấu trúc là chuyển pha loại một. Cấu trúc tinh thể gần như bị phá vỡ hoàn toàn và thay vào đó là các khuyết tật cấu trúc khi nhiệt độ tăng đến 3810 K. Điều này có nghĩa là mô hình đã chuyển sang trạng thái lỏng hoàn toàn. Có thể thấy rằng, quá trình nóng chảy của vật liệu diễn ra trong khoảng thời gian ngắn so với quá trình nóng chảy của vật liệu graphene hai chiều đã được báo cáo trong các nghiên cứu trước đó.



Hình 4. Mô hình trực quan GaN hai chiều xung quanh nhiệt độ nóng chảy

3.5. Phân bố số phối trí

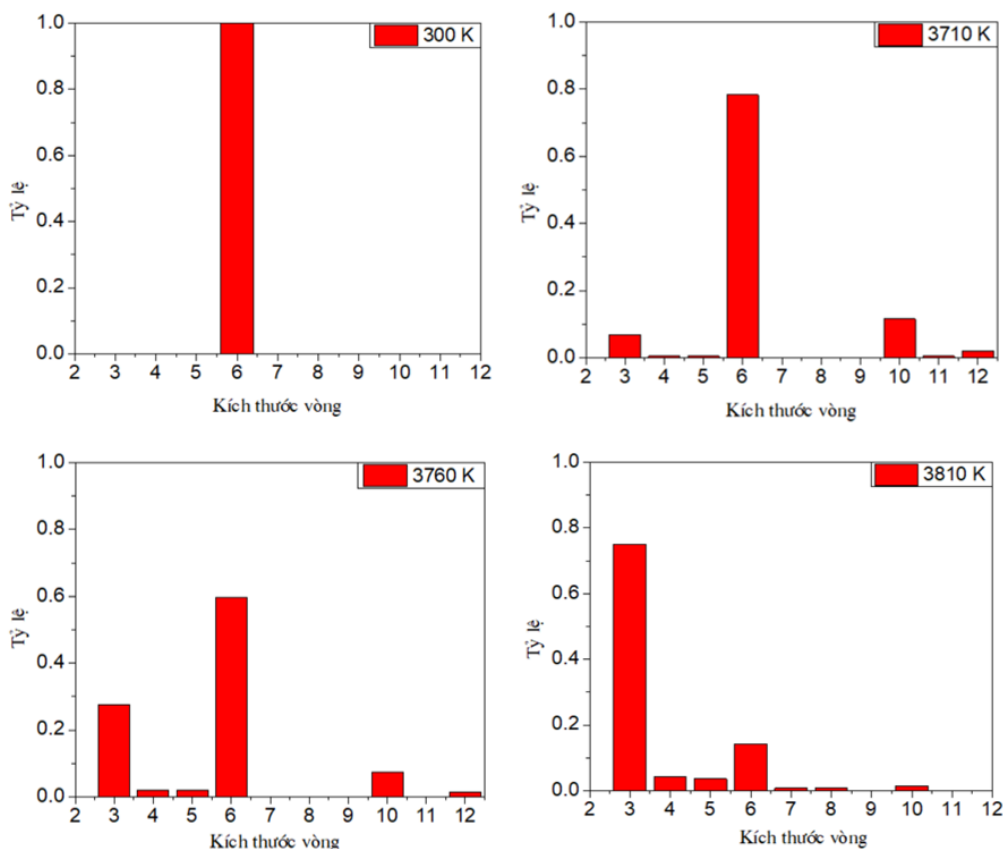
Để làm rõ quá trình nóng chảy của vật liệu GaN dưới ảnh hưởng của nhiệt độ, chúng tôi thực hiện phân tích sự phân bố số phối trí ở các nhiệt độ khác nhau. Hình 5 là phân bố số phối trí ở các nhiệt độ 300 K, 3710 K, 3760 K và 3810 K. Có thể thấy rằng, ở nhiệt độ thấp (300 K), hầu hết là số phối trí 3. Điều này có nghĩa mô hình đang ở trạng thái rắn tinh thể với cấu trúc tinh thể lục giác. Khi nhiệt độ tăng đến 3710 K, số phối trí 3 giảm xuống nhưng vẫn chiếm chủ yếu và đồng thời xuất hiện các số phối trí 2, 4, và 5. Điều này cho thấy rằng mô hình bắt đầu xảy ra sự nóng chảy. Ở nhiệt độ 3760 K, số phối trí 3 giảm mạnh xuống còn khoảng 62%, trong khi đó số phối trí 2, 4 và 5 tăng với khoảng 29% là số phối trí 4. Khi nhiệt độ tăng đến 3810 K, số phối trí 3 giảm rất mạnh, điều này liên quan đến sự hình thành của các vòng cũng như sự phá vỡ của các vòng. Tuy nhiên, số phối trí 4 tăng mạnh nhất và chiếm tỷ lệ chủ yếu với khoảng 42%, các số phối trí 2, 5 và 6 có tỷ lệ nhỏ.



Hình 5. Phân bố số phối trí ở các nhiệt độ khác nhau

3.6. Phân bố vòng

Hình 6 cho thấy phân bố kích thước vòng ở các nhiệt độ khác nhau. Chúng ta có thể thấy rằng, ở nhiệt độ 300 K, mô hình chỉ chứa chủ yếu là vòng 6. Điều này có nghĩa là mô hình ở trong trạng thái rắn với cấu trúc tinh thể lục giác. Khi mô hình được nung nóng đến nhiệt độ 3710 K, tỷ lệ vòng 6 xuống còn khoảng 80%, đồng thời xuất hiện nhiều vòng có kích thước khác nhau, trong đó vòng 10 và vòng 3 chiếm tỷ lệ cao nhất khoảng 15% và 9% tương ứng. Điều này có nghĩa là mô hình bắt đầu xảy ra sự nóng chảy. Quá trình nóng chảy tiếp tục diễn ra khi nhiệt độ tăng đến 3760 K, trong mô hình xuất hiện nhiều vòng với kích thước khác nhau, trong đó vòng 6 giảm mạnh, đồng thời vòng 3 tăng. Điều này cho thấy mô hình đã chuyển sang trạng thái nóng chảy, trong mô hình tồn tại đồng thời trạng thái rắn – lỏng. Mô hình chuyển sang trạng thái lỏng hoàn toàn khi nhiệt độ tăng đến 3810 K với vòng 6 chỉ chiếm khoảng 17%, trong khi đó vòng 3 là chủ yếu với khoảng 78% và một tỷ lệ nhỏ các vòng có kích thước khác nhau. Có thể thấy rằng, ở nhiệt độ 3810 K, tỷ lệ các vòng có kích thước lớn giảm, điều này liên quan đến việc đứt gãy của các vòng khi nhiệt độ tăng. Hiện tượng này cũng đã được chỉ ra trong nghiên cứu đối với mô hình graphen hai chiều [41].



Hình 6. Phân bố vòng ở các nhiệt độ khác nhau

4. Kết luận

Quá trình nóng chảy của vật liệu hai chiều GaN được nghiên cứu bằng mô phỏng động lực học phân tử ở áp suất 0 GPa. Kết quả mô phỏng của chúng tôi cho thấy nhiệt độ nóng chảy của mô hình vật liệu là 3760 K. Giá trị này gần với giá trị thực nghiệm của Porowski và cộng sự và thấp hơn nhiều so với nhiệt độ nóng chảy của ống nano GaN. Chúng tôi cũng quan sát thấy, sự chuyển pha của vật liệu là chuyển pha loại một.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Thủ Dầu Một trong đề tài mã số DT.21.4-003.

Các kết quả của bài báo được tính toán trên hệ thống máy tính hiệu năng cao (HPCC) của trường Đại học Thủ Dầu Một.

TÀI LIỆU THAM KHẢO/ REFERENCES

- [1] J. N. Coleman *et al.*, "Two-dimensional nanosheets produced by liquid exfoliation of layered materials," *Science*, vol. 331, no. 6017, pp. 568-571, 2011.
- [2] J. Dai and X. C. Zeng, "Titanium trisulfide monolayer: theoretical prediction of a new direct-gap semiconductor with high and anisotropic carrier mobility," *Angewandte Chemie*, vol. 127, no. 26, pp. 7682-7686, 2015.
- [3] L.-M. Yang *et al.*, "Two-dimensional Cu₂Si monolayer with planar hexacoordinate copper and silicon bonding," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 137, no. 7, pp. 2757-2762, 2015.
- [4] Y. Kubota *et al.*, "Deep ultraviolet light-emitting hexagonal boron nitride synthesized at atmospheric pressure," *Science*, vol. 317, no. 5840, pp. 932-934, 2007.
- [5] K. F. Mak *et al.*, "Atomically thin MoS₂: a new direct-gap semiconductor," *Physical review letters*, vol. 105, no. 13, p. 136805, 2010.

- [6] A. Kuc *et al.*, "Influence of quantum confinement on the electronic structure of the transition metal sulfide T S 2," *Physical Review B*, vol. 83, no. 24, p. 245213, 2011.
- [7] H. L. Zhuang and R. G. Hennig, "Single-layer group-III monochalcogenide photocatalysts for water splitting," *Chemistry of Materials*, vol. 25, no. 15, pp. 3232-3238, 2013.
- [8] J. Zheng *et al.*, "High yield exfoliation of two-dimensional chalcogenides using sodium naphthalenide," *Nature communications*, vol. 5, no. 1, pp. 1-7, 2014.
- [9] A. Rodin *et al.*, "Strain-induced gap modification in black phosphorus," *Physical review letters*, vol. 112, no. 17, p. 176801, 2014.
- [10] H. Liu *et al.*, "Phosphorene: an unexplored 2D semiconductor with a high hole mobility," *ACS nano*, vol. 8, no. 4, pp. 4033-4041, 2014.
- [11] S. Balendhran *et al.*, "Elemental analogues of graphene: silicene, germanene, stanene, and phosphorene," *Small*, vol. 11, no. 6, pp. 640-652, 2015.
- [12] P. Vogt *et al.*, "Silicene: compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon," *Physical review letters*, vol. 108, no. 15, p. 155501, 2012.
- [13] L. Li *et al.*, "Buckled germanene formation on Pt (111)," *Advanced Materials*, vol. 26, no. 28, pp. 4820-4824, 2014.
- [14] F.-f. Zhu *et al.*, "Epitaxial growth of two-dimensional stanene," *Nature materials*, vol. 14, no. 10, pp. 1020-1025, 2015.
- [15] R. P. Tompkins *et al.*, "HVPE GaN for high power electronic Schottky diodes," *Solid-state electronics*, vol. 79, pp. 238-243, 2013.
- [16] J.-M. Wagner and F. Bechstedt, "Properties of strained wurtzite GaN and AlN: Ab initio studies," *Physical Review B*, vol. 66, no. 11, p. 115202, 2002.
- [17] W. C. Johnson *et al.*, "Nitrogen compounds of gallium. iii," *The journal of physical chemistry*, vol. 36, no. 10, pp. 2651-2654, 2002.
- [18] H. Manasevit *et al.*, "The use of metalorganics in the preparation of semiconductor materials: IV. The nitrides of aluminum and gallium," *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 118, no. 11, p. 1864, 1971.
- [19] H. Manasevit, "The use of metalorganics in the preparation of semiconductor materials: Growth on insulating substrates," *Journal of Crystal Growth*, vol. 13, pp. 306-314, 1972.
- [20] L. Martiradonna, "A 2D barrier to defects," *Nature Materials*, vol. 14, no. 4, pp. 362-362, 2015.
- [21] Z. Y. Al Balushi *et al.*, "Two-dimensional gallium nitride realized via graphene encapsulation," *Nature materials*, vol. 15, no. 11, pp. 1166-1171, 2016.
- [22] T. H. Seo *et al.*, "Direct growth of GaN layer on carbon nanotube-graphene hybrid structure and its application for light emitting diodes," *Scientific reports*, vol. 5, no. 1, pp. 1-7, 2015.
- [23] A. Kolobov *et al.*, "Instability and spontaneous reconstruction of few-monolayer thick GaN graphitic structures," *Nano Letters*, vol. 16, no. 8, pp. 4849-4856, 2016.
- [24] T. Tao *et al.*, "Significant improvements in InGaN/GaN nano-photoelectrodes for hydrogen generation by structure and polarization optimization," *Scientific reports*, vol. 6, no. 1, pp. 1-8, 2016.
- [25] S. M. Lee *et al.*, "Electronic structures of GaN nanotubes," *Journal of the Korean Physical Society*, vol. 34, no. 3, pp. S253-S257, 1999.
- [26] Y.-R. Jeng *et al.*, "Molecular dynamics investigation of the mechanical properties of gallium nitride nanotubes under tension and fatigue," *Nanotechnology*, vol. 15, no. 12, p. 1737, 2004.
- [27] Z. Wang *et al.*, "Atomic-level study of melting behavior of GaN nanotubes," *Journal of applied physics*, vol. 100, no. 6, p. 063503, 2006.
- [28] Z. Wang *et al.*, "Thermal conductivity of GaN nanotubes simulated by nonequilibrium molecular dynamics," *Physical Review B*, vol. 75, no. 15, p. 153303, 2007.
- [29] J. Van Vechten, "Quantum dielectric theory of electronegativity in covalent systems. III. Pressure-temperature phase diagrams, heats of mixing, and distribution coefficients," *Physical Review B*, vol. 7, no. 4, p. 1479, 1973.
- [30] J. Nord *et al.*, "Modelling of compound semiconductors: analytical bond-order potential for gallium, nitrogen and gallium nitride," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 15, no. 32, p. 5649, 2003.
- [31] K. Harafuji *et al.*, "Molecular dynamics simulation for evaluating melting point of wurtzite-type GaN crystal," *Journal of applied physics*, vol. 96, no. 5, pp. 2501-2512, 2004.
- [32] J. Kioseoglou *et al.*, "A modified empirical potential for energetic calculations of planar defects in GaN," *Computational materials science*, vol. 27, no. 1-2, pp. 43-49, 2003.

- [33] Q. Chen *et al.*, "Tailoring band gap in GaN sheet by chemical modification and electric field: Ab initio calculations," *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 5, p. 053102, 2011.
- [34] S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics," *Journal of computational physics*, vol. 117, no. 1, pp. 1-19, 1995.
- [35] S. Le Roux and V. Petkov, "ISAACS–interactive structure analysis of amorphous and crystalline systems," *Journal of Applied Crystallography*, vol. 43, no. 1, pp. 181-185, 2010.
- [36] W. Humphrey *et al.*, "VMD: visual molecular dynamics," *Journal of molecular graphics*, vol. 14, no. 1, pp. 33-38, 1996.
- [37] S. Porowski *et al.*, "The new insight into gallium nitride (GaN) melting under pressure," *arXiv preprint arXiv:1408.3254*, 2014.
- [38] W. Utsumi *et al.*, "Congruent melting of gallium nitride at 6 GPa and its application to single-crystal growth," *Nature materials*, vol. 2, no. 11, pp. 735-738, 2003.
- [39] J. Karpiński *et al.*, "Equilibrium pressure of N₂ over GaN and high pressure solution growth of GaN," *Journal of Crystal Growth*, vol. 66, no. 1, pp. 1-10, 1984.
- [40] N. H. March, *Introduction to liquid state physics*. Allied Publishers, 2002.
- [41] V. V. Hoang *et al.*, "Stages of melting of graphene model in two-dimensional space," *Philosophical Magazine*, vol. 96, no. 19, pp. 1993-2008, 2016.