



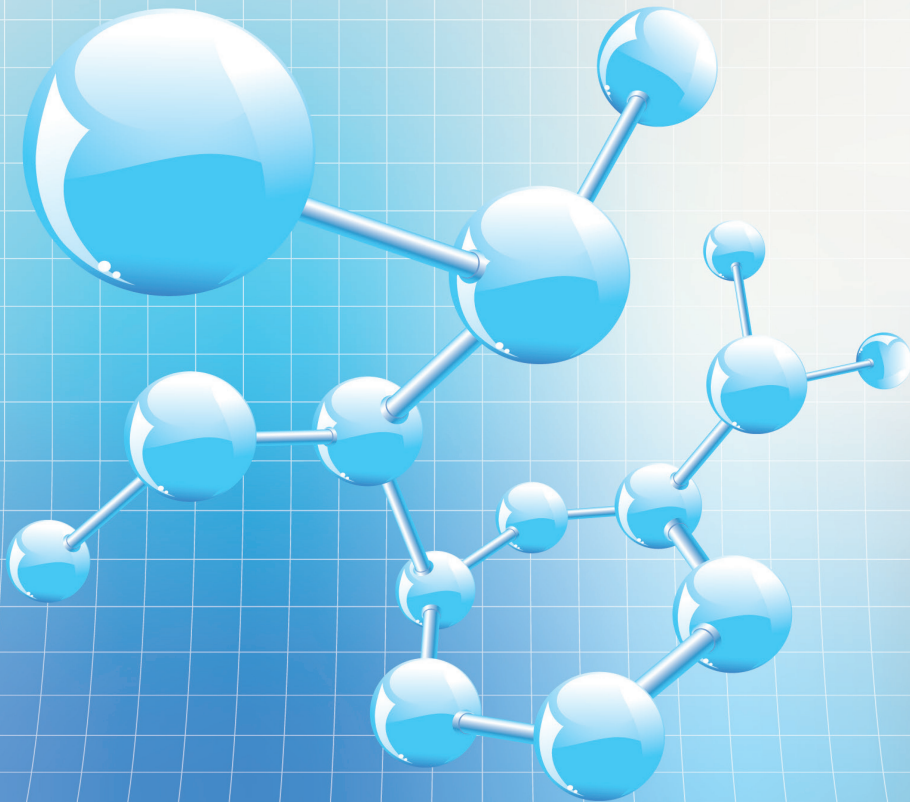
**Tạp chí**

# **NGHIÊN CỨU KHOA HỌC**

**ĐẠI HỌC SAO ĐỎ**

**SCIENTIFIC JOURNAL - SAO DO UNIVERSITY**

**P. ISSN 1859-4190  
E. ISSN 2815-553X**



**Số 1 (93)**

**2026**

**P. ISSN 1859-4190**  
**E. ISSN 2815-553X**

■ **Tổng Biên tập**

TS. Đỗ Văn Đĩnh

■ **Phó Tổng biên tập**

TS. Nguyễn Thị Kim Nguyễn

■ **Thư ký Tòa soạn**

PGS.TS. Ngô Hữu Mạnh

■ **Hội đồng Biên tập**

**TS. Nguyễn Thị Kim Nguyễn - Chủ tịch Hội đồng**

GS.TS. Phạm Thị Ngọc Yến

PGS.TSKH. Trần Hoài Linh

PGS.TS. Nguyễn Văn Liễn

GS.TSKH. Thân Ngọc Hoàn

GS.TSKH. Bành Tiến Long

GS.TS. Nguyễn Đức Toàn

PGS.TS. Lê Thu Quý

GS.TS. Lê Anh Tuấn

GS.TS. Đinh Văn Sơn

PGS.TS. Trương Thị Thủy

PGS.TS. Nguyễn Thị Bất

GS.TS. Đỗ Quang Kháng

PGS.TS. Ngô Sỹ Lương

PGS.TS. Khuất Văn Ninh

GS.TSKH. Phạm Hoàng Hải

PGS.TS. Đoàn Ngọc Hải

PGS.TS. Nguyễn Ngọc Hà

GS.TS. Yu Ming Zhang

GS.TS. Nguyễn Văn Anh

■ **Ban Biên tập**

TS. Vũ Văn Đông - Trưởng ban

ThS. Đoàn Thị Thu Hằng - Phó Trưởng ban

■ **Editor-in-Chief**

Dr. Do Van Dinh

■ **Vice Editor-in-Chief**

Dr. Nguyen Thi Kim Nguyen

■ **Office Secretary**

Assoc.Prof.Dr. Ngo Huu Manh

■ **Editorial Board**

**Dr. Nguyen Thi Kim Nguyen - Chairman**

Prof.Dr. Pham Thi Ngoc Yen

Assoc.Prof.Dr.Sc. Tran Hoai Linh

Assoc.Prof.Dr. Nguyen Van Lien

Prof.Dr.Sc. Than Ngoc Hoan

Prof.Dr.Sc. Banh Tien Long

Prof.Dr. Nguyen Duc Toan

Assoc.Prof.Dr. Le Thu Quy

Prof.Dr. Le Anh Tuan

Prof.Dr. Dinh Van Son

Assoc.Prof.Dr. Truong Thi Thuy

Assoc.Prof.Dr. Nguyen Thi Bat

Prof.Dr. Do Quang Khang

Assoc.Prof.Dr. Ngo Sy Luong

Assoc.Prof.Dr. Khuat Van Ninh

Prof.Dr.Sc. Pham Hoang Hai

Assoc.Prof.Dr. Doan Ngoc Hai

Assoc.Prof.Dr. Nguyen Ngoc Ha

Prof.Dr. Yu Ming Zhang

Prof.Dr. Nguyen Van Anh

■ **Editorial**

Dr. Vu Van Dong - Head

MSc. Doan Thi Thu Hang - Deputy Head

**Địa chỉ Tòa soạn:**

Trường Đại học Sao Đỏ.

Số 76, Nguyễn Thị Duệ, KDC Thái Học 2, P. Chu Văn An, TP. Hải Phòng.

Điện thoại: (0220) 3587213, Fax: (0220) 3882 921, Hotline: 0912 107858/0936 847980.

Website: <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn/> Email: [tapchikhcn@saodo.edu.vn](mailto:tapchikhcn@saodo.edu.vn).

Giấy phép xuất bản số: 620/GP-BTTTT ngày 17/9/2021 của Bộ Thông tin và Truyền thông.

In 2.000 bản, khổ 21 × 29,7cm, tại Công ty TNHH in Tre Xanh, cấp ngày 17/02/2011.

**LIÊN NGÀNH ĐIỆN - ĐIỆN TỬ - TỰ ĐỘNG HÓA**

Nghiên cứu sử dụng các bộ lọc thụ động cho lưới điện PV nhằm giảm sóng hài	5	Tạ Thị Mai
Phân tích các đặc tính chính của máy điện từ kháng hai khối làm việc ở chế độ động cơ - máy phát	12	Phạm Công Tảo Phạm Thị Hoan
Mô phỏng tán xạ sóng điện từ 2D sử dụng lớp hấp thụ hoàn hảo	19	Mạc Thị Nguyên
Ứng dụng học sâu (Deep Learning) trong bài toán dự báo công suất tiêu thụ của phụ tải điện công nghiệp	25	Phạm Văn Tài
Phương pháp điều khiển giám sát hệ thống sự kiện rời rạc trên PLC	32	Nguyễn Thị Quyên Vũ Bảo Tạo

**LIÊN NGÀNH CƠ KHÍ - ĐỘNG LỰC**

Nghiên cứu các yếu tố ảnh hưởng đến hình dạng mối hàn khi hàn thép SS400 bằng công nghệ hàn MAG tự động	38	Nguyễn Hữu Chấn
Ảnh hưởng của tốc độ làm việc đến khả năng tự hồi phục mòn của phụ gia nano TiC trong dầu bôi trơn	44	Nguyễn Đình Cường
Ứng dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ trong tính toán tối ưu cấu trúc và đặc tính cơ - lý của vật liệu 2D	51	Trần Thế Quang Phạm Thị Thanh Giang Dương Thị Loan Vũ Khắc Hưng Vũ Văn Tản
Ảnh hưởng của loại dầu ATF và điều kiện vận hành đến quá trình phát nhiệt của biến mô thủy lực GM 258 mm	57	Nguyễn Lương Căn Lê Đức Thắng Đỗ Tiến Quyết
Mô phỏng quá trình thấm - tôi Carbonitriding và sự hình thành ứng suất dư trên bánh răng thép C20	63	Mạc Văn Giang Đào Văn Kiên Ngô Hữu Mạnh

**NGÀNH KINH TẾ**

- Lợi thế so sánh và tăng trưởng kinh tế vùng của Việt Nam giai đoạn 2025-2030 70 Nguyễn Minh Tuấn  
Phạm Thị Hồng Hoa
- Các nhân tố ảnh hưởng đến phát triển năng lực số của đội ngũ quản lý cấp trung tại các công ty, đơn vị thuộc Tập đoàn công nghiệp Than - Khoáng sản Việt Nam (TKV) 77 Trần Xuân Chiến
- Phát triển kỹ năng số của lực lượng lao động Việt Nam trong thời đại số: thực trạng và hàm ý chính sách 84 Vũ Thị Lý  
Nguyễn Thị Quỳnh
- Tác động của chuyển đổi số tới hoạt động của các doanh nghiệp bán lẻ tại Việt Nam: Cơ hội và thách thức 90 Vũ Thị Thanh Thủy
- Hoàn thiện công tác kế toán thuế trong điều kiện các chính sách thuế thay đổi theo hướng chuyển đổi số tại một số doanh nghiệp nhỏ và vừa trên địa bàn phường Chu Văn An, thành phố Hải Phòng 96 Nguyễn Thị Quỳnh  
Đinh Thị Kim Thiết  
Vũ Thị Lý  
Hoàng Thị Bích Ngọc  
Đoàn Thị Thu Hằng

**LIÊN NGÀNH TRIẾT HỌC - XÃ HỘI HỌC - CHÍNH TRỊ HỌC**

- Đổi mới phương pháp giảng dạy các môn khoa học Mác - Lênin trong thời đại số 102 Nguyễn Thị Nhan
- Quan điểm của chủ nghĩa Mác - Lênin về con người và sự vận dụng của quan điểm đó ở Việt Nam hiện nay 108 Trần Thị Hồng Nhung  
Nguyễn Chí Dũng  
Nguyễn Vinh Diện  
Trần Thị Hiền
- Tư tưởng của Lênin về sử dụng các chuyên gia tư sản và sự vận dụng của Đảng ta trong xây dựng, phát triển đội ngũ trí thức Việt Nam hiện nay 113 Phạm Văn Dự  
Vũ Thị Quyên  
Nguyễn Thị Diễm  
Dương Thị Thanh
- Vai trò của triết học đối với sự hình thành tư duy phản biện cho sinh viên đại học hiện nay 118 Trần Thị Hồng Nhung  
Vũ Văn Đông  
Nguyễn Vinh Diện
- Tư tưởng Hồ Chí Minh về con người với việc phát huy vai trò của giảng viên đại học trước tác động của ChatGPT hiện nay 124 Trần Mai Ước  
Nguyễn Thị Kim Nguyên

**TITLE FOR ELECTRICITY - ELECTRONICS - AUTOMATION**

Research on the use of passive filters for PV grids to reduce harmonics	5	Ta Thi Mai
Analysis of the main characteristics of the two - package switched reluctance machine operating in motor - generator mode	12	Pham Cong Tao Pham Thi Hoan
Simulation of 2D electromagnetic wave scattering using perfectly matched layer	19	Mac Thi Nguyen
Application of deep learning in the problem of forecasting power consumption of industrial electricity loads	25	Pham Van Tai
A supervisory control method for discrete event system on PLC	32	Nguyen Thi Quyen Vu Bao Tao

**TITLE FOR MECHANICAL AND DRIVING POWER ENGINEERING**

Study on factors affecting weld bead geometry in automatic MAG welding of SS400 steel	38	Nguyen Huu Chan
Effect of sliding speed on the self-repairing behavior of TiC nanoparticle additives in lubricating oil	44	Nguyen Dinh Cuong
Application of density functional theory in structural optimization and mechanical-physical property calculations of 2D materials	51	Tran The Quang Pham Thi Thanh Giang Duong Thi Loan Vu Khắc Hưng Vu Van Tan
Effect of ATF type and operating conditions on heat generation in the GM 258 mm torque converter	57	Nguyen Luong Can Le Duc Thang Do Tien Quyet
Simulation of the carbonitriding quenching process and residual stress formation in C20 steel gears	63	Mac Van Giang Dao Van Kien Ngo Huu Manh

**TITLE FOR ECONOMICS**

- Vietnam's comparative advantages and regional economic growth during the period 2025-2030 70 Nguyen Minh Tuan  
Pham Thi Hong Hoa
- Factors affecting the development of digital competence of middle management teams in companies and units under Vietnam national Coal - Mineral industries holding corporation limited (TKV) 77 Tran Xuan Chien
- Developing digital skills of Vietnam's workforce in the digital age: Current situation and policy implications 84 Vu Thi Ly  
Nguyen Thi Quynh
- The impact of digital transformation on retail businesses in Vietnam: Opportunities and challenges 90 Vu Thi Thanh Thuy
- Improving tax accounting practices under the digital transformation of tax policies in small and medium-sized enterprises in Chu Van An ward, Hai Phong city 96 Nguyen Thi Quynh  
Dinh Thi Kim Thiet  
Vu Thi Ly  
Hoang Thi Bich Ngoc  
Doan Thi Thu Hang

**TITLE FOR PHILOSOPHY - SOCIOLOGY - POLITICAL SCIENCE**

- Innovation in teaching methods Marxist-Leninist political theory in the digital age 102 Nguyen Thi Nhan
- The Marxist - Leninist view on humans and the application of that perspective in Vietnam today 108 Tran Thi Hong Nhung  
Nguyen Chi Dung  
Nguyen Vinh Dien  
Tran Thi Hien
- V.I. Lenin's thoughts on utilizing bourgeois experts and the Party's application of them in training, nurturing and attracting the current intellectual team 113 Pham Van Du  
Vu Thi Quyen  
Nguyen Thi Diem  
Duong Thi Thanh
- The role of philosophy in the formation of critical thinking for today's university students 118 Tran Thi Hong Nhung  
Vu Van Dong  
Nguyen Vinh Dien
- Ho Chi Minh's thought on people with promoting the role of university lecturers in the face of the impact of ChatGPT today 124 Tran Mai Uoc  
Nguyen Thi Kim Nguyen

# Ứng dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ trong tính toán tối ưu cấu trúc và đặc tính cơ-lý của vật liệu 2D

## Application of density functional theory in structural optimization and mechanical-physical property calculations of 2D materials

Trần Thế Quang<sup>1\*</sup>, Phạm Thị Thanh Giang<sup>1</sup>, Dương Thị Loan<sup>1</sup>,  
Vũ Khắc Hưng<sup>1</sup>, Vũ Văn Tân<sup>2</sup>

\*Tác giả liên hệ: tranthequang12@gmail.com

<sup>1</sup>Trường Đại học Thái Bình

<sup>2</sup>Trường Đại học Sao Đỏ

Ngày nhận bài: 05/9/2025

Ngày nhận bài sửa sau phản biện: 13/01/2026

Ngày chấp nhận đăng: 26/02/2026

### Tóm tắt

Lý thuyết hàm mật độ (DFT) đã trở thành một công cụ quan trọng trong nghiên cứu vật liệu hai chiều (2D), cho phép dự đoán chính xác các tính chất vật lý với chi phí tính toán hợp lý. DFT có khả năng mô tả hệ thống vật thể thông qua mật độ electron thay vì sử dụng hàm sóng phức tạp, từ đó có thể tối ưu hóa cấu trúc và xác định các cấu hình ổn định của vật liệu. Phương pháp này hỗ trợ đánh giá độ bền cơ học và ứng suất hỏng, đồng thời cung cấp thông tin chi tiết về các đặc điểm điện tử chính như cấu trúc dải, mật độ trạng thái và độ dẫn điện. Với sự phát triển không ngừng của khả năng tính toán hiện đại, DFT tiếp tục đóng vai trò cốt lõi trong việc hướng dẫn thiết kế và phát triển các vật liệu 2D mới cho các ứng dụng điện tử và công nghệ nano.

**Từ khóa:** Phiếm hàm mật độ; tối ưu hóa cấu trúc; tính chất cơ học; tính chất điện tử; vật liệu 2D.

### Abstract

Density Functional Theory (DFT) has become a vital tool in the study of two-dimensional (2D) materials, enabling accurate prediction of physical properties at a reasonable computational cost. DFT has the ability to describe a physical system through electron density instead of using complex wave functions, thereby optimizing the structure and determining stable configurations of materials. This method facilitates the evaluation of mechanical strength and failure stress, while also providing detailed insights into key electronic features such as band structure, density of states, and electrical conductivity. With the continuous advancement of modern computational capabilities, DFT remains a cornerstone in guiding the design and development of novel 2D materials for applications in electronics and nanotechnology.

**Keywords:** Density Functional Theory; structure optimization; mechanical properties; electronic properties; 2D materials.

### 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) là một phương pháp tính toán nền tảng trong vật lý và khoa học vật liệu, cho phép mô tả hệ nhiều điện tử thông qua mật độ điện tử thay vì hàm sóng phức tạp. Năm 1964, Hohenberg và Kohn đã thiết lập hai định lý cơ bản chứng minh rằng năng lượng trạng thái cơ bản là một hàm của mật độ điện tử, tạo nền tảng lý thuyết cho DFT [1-3]. Tiếp đó, phương pháp Kohn-Sham (1965) cung cấp quy trình tính toán hiệu quả để xấp xỉ mật độ điện tử, qua đó DFT được ứng dụng rộng rãi của phương pháp này trong khoa học và kỹ thuật [4-10].

Nhờ sự phát triển của công nghệ máy tính từ thập niên 1980, DFT được ứng dụng rộng rãi trong nghiên cứu vật lý chất rắn, hóa học lượng tử và đặc biệt là khoa học vật liệu. Phương pháp này cho phép dự đoán chính xác các tính chất quan trọng của vật liệu như cấu trúc tinh thể, cấu trúc vùng năng lượng, tính chất điện tử, từ tính và phản ứng bề mặt. DFT không chỉ hỗ trợ hiểu rõ bản chất vi mô của vật liệu mà còn đóng vai trò định hướng trong thiết kế, phát triển vật liệu mới và cung cấp hướng dẫn quan trọng cho thực nghiệm [11, 12].

Trong nghiên cứu này, DFT được áp dụng để tối ưu hóa hình học và phân tích cấu trúc điện tử của vật liệu hai chiều (2D). Với độ chính xác cao ở cấp độ nguyên tử, phương pháp này giúp xác định cấu hình năng lượng thấp nhất, đặc tính dẫn điện hoặc cách điện,

Người phản biện: 1. PGS.TS. Trần Vệ Quốc

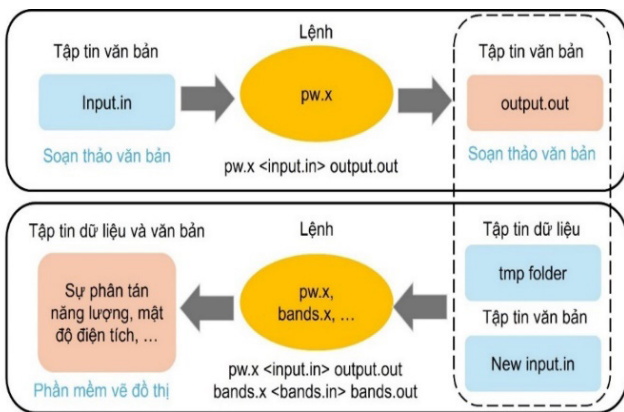
2. PGS.TS. Ngô Hữu Mạnh

cũng như so sánh với dữ liệu thực nghiệm nhằm hiệu chỉnh mô hình. Kết quả thu được góp phần mở rộng hiểu biết về cơ chế vật lý cơ bản và mở ra tiềm năng ứng dụng trong phát triển vật liệu bán dẫn tiên tiến cho các lĩnh vực điện tử, quang học và năng lượng.

**2. PHƯƠNG PHÁP LUẬN**

Quantum Espresso (QE) là một phần mềm mạnh mẽ và phổ biến trong cộng đồng nghiên cứu vật liệu, được sử dụng để thực hiện các phép tính và mô phỏng cấu trúc và các tính chất cơ - lý của vật liệu ở cấp độ nguyên tử. Với khả năng tính toán dựa trên nền tảng DFT, phần mềm này cho phép các nhà khoa học khám phá và phân tích các đặc trưng vật liệu một cách chi tiết và chính xác [3, 4, 10].

Trong quá trình sử dụng (QE) để tính toán cấu trúc cân bằng và đặc tính điện tử của vật liệu, bước đầu tiên là chuẩn bị tệp đầu vào mô tả cấu trúc tinh thể, bao gồm các hằng số mạng, vị trí nguyên tử và loại nguyên tố. Tiếp theo, cần lựa chọn các tham số tính toán phù hợp, đặc biệt là hàm thế năng và lưới điểm trong không gian  $k$  nhằm mô phỏng chính xác vùng Brillouin. Sau khi cấu trúc được tối ưu hóa đạt trạng thái cân bằng quá trình tính toán cấu trúc điện tử được thực hiện để thu được phổ năng lượng và các đặc trưng điện tử của hệ vật liệu (Hình 1). Các kết quả thu được bao gồm cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái điện tử, đóng vai trò quan trọng trong việc phân tích bản chất dẫn điện, bán dẫn hoặc cách điện của vật liệu.



Hình 1. Quy trình tính toán theo DFT sử dụng phần mềm QE

**3. KẾT QUẢ VÀ QUÁ TRÌNH ỨNG DỤNG**

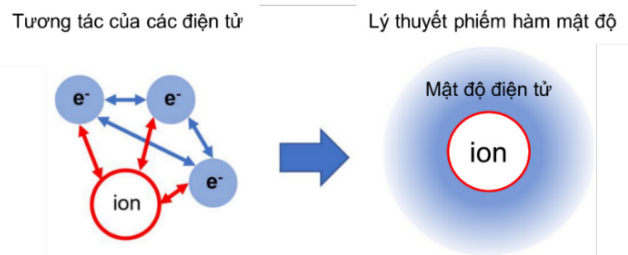
**3.1. Hàm sóng và cơ sở lý thuyết phiếm hàm mật độ**

Tương tự như trong các mô phỏng cấu trúc điện tử nhiều thân, các hạt nhân trong phân tử hoặc cụm nguyên tử được xem là cố định theo xấp xỉ Born-Oppenheimer, tạo nên một thế ngoài tĩnh  $V$  mà trong đó các electron chuyển động (Hình 2). Khi đó, trạng thái dừng của hệ điện tử được mô tả bằng hàm sóng  $\Psi(r_1, \dots, r_n)$ , thỏa mãn phương trình Schrödinger độc lập thời gian cho hệ nhiều electron [13]:

$$\hat{H}\Psi = [\hat{T} + \hat{U} + \hat{V}] \Psi \tag{1}$$

$$\left[ \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \right) + \sum_{i=1}^N V(r_i) + \sum_{i<j}^N U(r_i, r_j) \right] \Psi = E\Psi \tag{2}$$

Trong đó: với hệ thống  $N$  điện tử, là toán tử Hamilton,  $E$  là tổng năng lượng, là động năng, là thế năng tương tác, là năng lượng tương tác giữa các điện tử. Các toán tử và là các toán tử phổ quát, áp dụng cho mọi hệ điện tử, trong khi phụ thuộc vào hệ cụ thể.



Hình 2. Mô hình chuyển đổi hệ tương tác giữa nhiều điện tử và DFT [14].

Có nhiều phương pháp để giải phương trình Schrödinger, tiêu biểu là phương pháp Hartree-Fock và các phương pháp hậu Hartree-Fock với độ chính xác cao nhưng đòi hỏi tính toán lớn, hạn chế khả năng áp dụng cho hệ phức tạp. DFT cung cấp giải pháp linh hoạt và hiệu quả hơn bằng cách ánh xạ bài toán nhiều vật thể có tương tác  $\hat{U}$ , thành bài toán một vật thể không có tương tác  $\hat{U}$ . Trong DFT, đại lượng chính là mật độ electron  $n(r)$ , được xác định từ hàm sóng  $\Psi$  được chuẩn hóa theo công thức [13]:

$$n(r) = N \int d^3r_2 \dots \int d^3r_N \Psi^*(r, r_2, \dots, r_N) \Psi(r, r_2, \dots, r_N) \tag{3}$$

Mối quan hệ này có thể đảo ngược, nghĩa là, đối với mật độ trạng thái cơ bản  $n_0(r)$  cho trước, về nguyên tắc, có thể tính toán hàm sóng trạng thái cơ bản tương ứng  $\Psi_0(r_1, \dots, r_N)$ . Nói cách khác,  $\Psi$  là một hàm duy nhất của  $n_0$  [13]:

$$\Psi_0 = \Psi [n_0] \tag{4}$$

Và do đó giá trị kỳ vọng trạng thái cơ bản của một Ô quan sát được cũng là một hàm số của  $n_0$ :

$$O[n_0] = \langle \Psi [n_0] | \hat{O} | \Psi [n_0] \rangle \tag{5}$$

Đặc biệt, năng lượng ở trạng thái cơ bản là một hàm số của  $n_0$ :

$$E_0 = E[n_0] = \langle \Psi [n_0] | \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} | \Psi [n_0] \rangle \tag{6}$$

Sự đóng góp của tiềm năng bên ngoài  $\langle \Psi [n_0] | \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} | \Psi [n_0] \rangle$  có thể được viết rõ ràng theo mật độ trạng thái cơ bản  $n_0$ :

$$V[n_0] = \int V(r)n_0(r)d^3r \quad (7)$$

Nói chung hơn, sự đóng góp của thế năng ngoài  $\langle \Psi | \hat{V} | \Psi \rangle$  có thể được viết rõ ràng theo mật độ trạng thái  $n$ :

$$V[n] = \int V(r)n(r)d^3r \quad (8)$$

Các hàm  $T[n]$  và  $U[n]$  là các hàm phổ quát, trong khi  $V[n]$  là hàm không phổ quát vì phụ thuộc vào hệ thống đang nghiên cứu. Khi hệ thống được xác định, nghĩa là:

$$E[n] = T[n] + U[n] + \int V(r)n(r)d^3r \quad (9)$$

Với  $n(r)$ , giả sử tồn tại các biểu thức tin cậy cho năng lượng động học  $T[n]$  và năng lượng thế năng ngoài  $U[n]$ , việc giảm thiểu hàm năng lượng toàn phần sẽ xác định được mật độ trạng thái cơ bản  $n_0$ , từ đó suy ra các đặc trưng vật lý của hệ. Bài toán biến thiên này có thể giải bằng phương pháp Lagrangian với các hệ số nhân. Trước tiên, xem xét dạng hàm năng lượng không chứa rõ ràng một thành phần năng lượng tương tác giữa các electron [13]:

$$E_s[n] = \langle \Psi_s[n] | \hat{T} + \hat{V}_s | \Psi_s[n] \rangle \quad (10)$$

Trong đó:

$\hat{T}$ : Biểu thị toán tử động năng;

$\hat{V}_s$ : Thế năng hiệu dụng của các hạt đang chuyển động.

Dựa trên  $E_s$ , phương trình Kohn-Sham cho hệ thống không tương tác phụ trợ này có thể được suy ra:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_s(r) \right] \varphi_i(r) = \varepsilon_i \varphi_i(r) \quad (11)$$

Tạo ra các orbital  $\varphi_i$  tái tạo mật độ  $n(r)$  của hệ nhiều vật

$$n(r) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(r)|^2$$

Thế năng của một hạt đơn lẻ có thể được viết như sau:

$$V_s(r) = V(r) + \int \frac{n(r')}{|r-r'|} d^3r' + V_{xc}[n(r)] \quad (12)$$

Ở đây:

$V_r$ : Thế năng bên ngoài, số hạng thứ hai là số hạng Hartree mô tả lực đẩy Coulomb giữa các điện tử và số hạng cuối cùng;

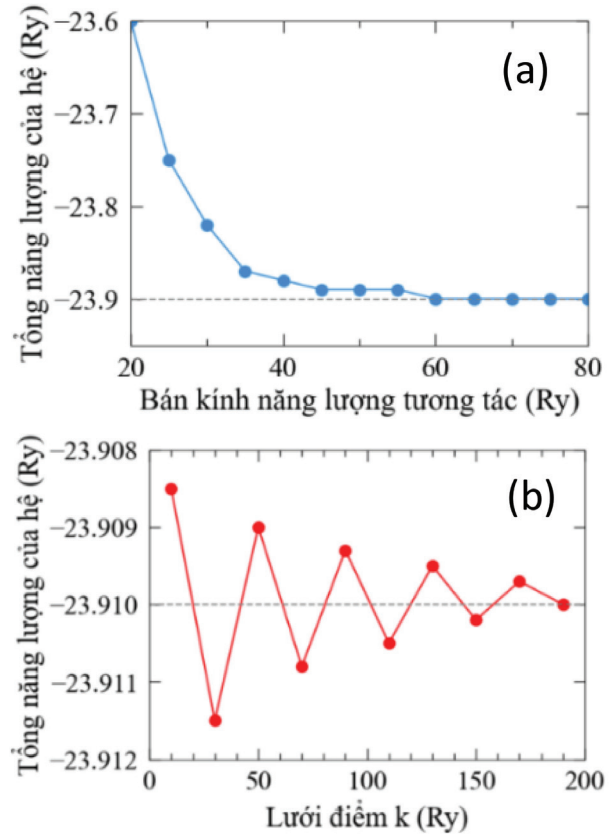
$V_{xc}$ : Thế năng tương quan trao đổi.

Tại đây,  $V_{xc}$  bao gồm tất cả các tương tác nhiều hạt.

### 3.2. Xác định điều kiện biên tuần hoàn

Trong mô phỏng vật liệu 2D bằng phần mềm QE, việc xác định điều kiện biên đóng vai trò quan trọng đảm bảo độ chính xác. Điều kiện biên tuần hoàn thường

được áp dụng cho hệ tinh thể, giúp giảm thiểu khối lượng tính toán bằng mô phỏng vật liệu vô hạn qua sự lặp lại ô đơn vị, (Hình 3). Ngược lại, nghiên cứu bề mặt, cấu trúc nano hoặc hệ không tuần hoàn yêu cầu điều kiện biên không tuần hoàn để mô phỏng chính xác các hiệu ứng biên và tính chất điện tử, quang học. Việc lựa chọn điều kiện biên phù hợp cần xem xét cấu trúc hệ, tương tác tầm xa và ảnh hưởng biên, đòi hỏi hiểu biết sâu về tính chất vật liệu.



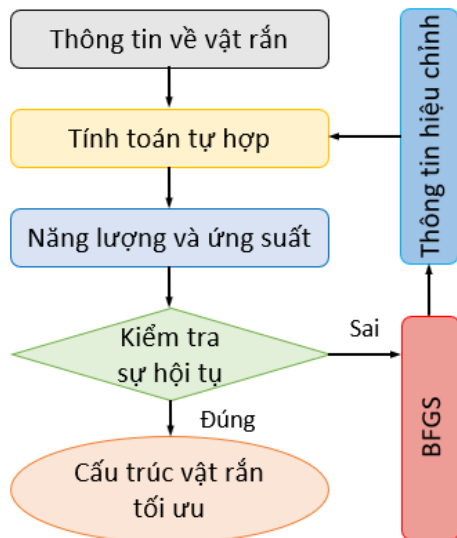
Hình 3. Điều kiện biên tuần hoàn

(a) Bán kính năng lượng tương tác; (b) Lưới điểm k được xác định qua phần mềm QE

### 3.3. Tối ưu hoá cấu trúc của vật rắn

Tối ưu hóa cấu trúc là bước quan trọng trong mô phỏng vật liệu bằng DFT, giúp xác định cấu hình bền vững với năng lượng thấp nhất. Trong QE, chương trình pw.x thực hiện quá trình này bằng cách tính toán năng lượng toàn phần và điều chỉnh vị trí nguyên tử cũng như thông số mạng dựa trên cấu trúc ban đầu.

Tệp đầu vào cần khai báo các thông số như hằng số mạng, năng lượng cắt và lưới điểm k. Quá trình tối ưu được lặp lại đến khi hội tụ, sau đó kết quả được phân tích để xác nhận cấu trúc tối ưu. Nếu cần, các tham số có thể được điều chỉnh để cải thiện độ chính xác. Quy trình này hỗ trợ dự đoán tính chất vật lý và hóa học, góp phần thiết kế vật liệu mới với đặc tính mong muốn (Hình 4).



Hình 4. Sơ đồ tính toán tối ưu hóa cấu trúc vật rắn của lý thuyết phiếm hàm mật độ

Trong QE, tối ưu hóa cấu trúc sử dụng thuật toán cực tiểu hóa năng lượng BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno), một công cụ hiệu quả cho bài toán tối ưu hóa không ràng buộc, được phát triển độc lập bởi Broyden, Fletcher, Goldfarb và Shanno [15, 16]:

$$\min f(x), x \in R^n \quad (13)$$

Ở đây:

$f(x)$  là một hàm tổng quát có đạo hàm cấp hai liên tục.

Mục tiêu của bài toán tối ưu là tìm ra nghiệm  $x^*$  để đảm bảo rằng  $\nabla f(x^*) = 0$ . Với giá trị cho trước là  $x_0$  và giới hạn ban đầu  $H^{-1} \approx \nabla^2 f(x_0)$  với  $(k+1)$  tương tác của thuật toán BFGS:

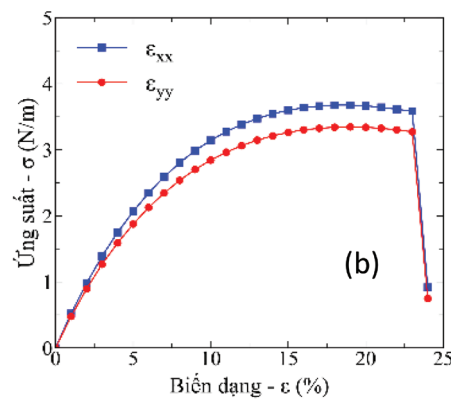
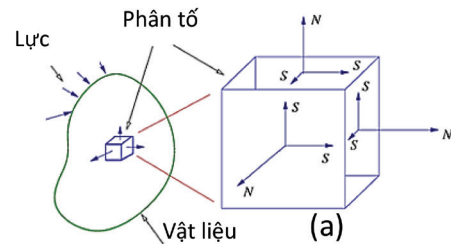
$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - H_k^{-1} \nabla f(x_k) \\ s_k &= x_{k+1} - x_k \\ y_k &= \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \\ H_{k+1} &= H_k - \frac{H_k s_k s_k^T H_k}{s_k^T H_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \end{aligned} \quad (14)$$

Ma trận ban đầu  $H_0^{-1}$  thường được coi là bội số dương của ma trận đồng nhất, nghĩa là hướng tìm kiếm ban đầu sẽ là hướng đi xuống dốc nhất. Ưu điểm của thuật toán BFGS là không cần phải tính toán  $\nabla^2 f(x_k)$  cho mỗi lần lặp.

### 3.4. Độ bền lý tưởng của vật liệu

Độ bền lý tưởng là một trong những tính chất cơ học quan trọng nhất của vật liệu 2D, phản ánh khả năng chịu ứng suất cực đại trước khi xảy ra biến dạng dẻo hoặc phá hủy. Trong vật lý chất rắn và khoa học vật liệu, đặc tính này giữ vai trò then chốt trong đánh giá độ ổn định cấu trúc.

Lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) là công cụ hiệu quả để dự đoán độ bền lý tưởng, cho phép mô phỏng cấu trúc điện tử và phản ứng của vật liệu dưới ứng suất mà không cần giải trực tiếp phương trình Schrödinger nhiều hạt (Hình 5).

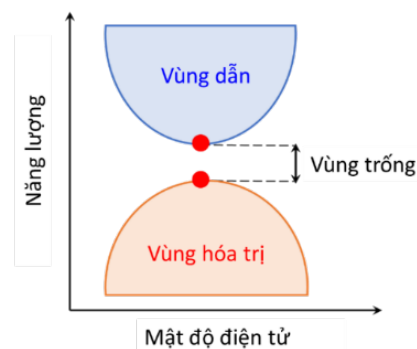


Hình 5. (a) Mô hình biến dạng; (b) Quan hệ ứng suất và biến dạng của vật liệu 2D [17, 18].

### 3.5. Tính toán và phân tích cấu trúc điện tử của vật liệu

Cấu trúc vùng năng lượng quyết định các tính chất điện, quang, từ và nhiệt của vật liệu 2D, đóng vai trò quan trọng trong thiết kế vật liệu cho ứng dụng bán dẫn và quang điện. Nó mô tả sự phân bố năng lượng của electron giữa vùng hóa trị, vùng cấm và vùng dẫn, cho phép đánh giá khả năng dẫn điện của vật liệu (Hình 6).

DFT là phương pháp hiệu quả để tính toán cấu trúc vùng với độ chính xác cao, ngày càng được sử dụng rộng rãi trong nghiên cứu và phát triển vật liệu 2D.

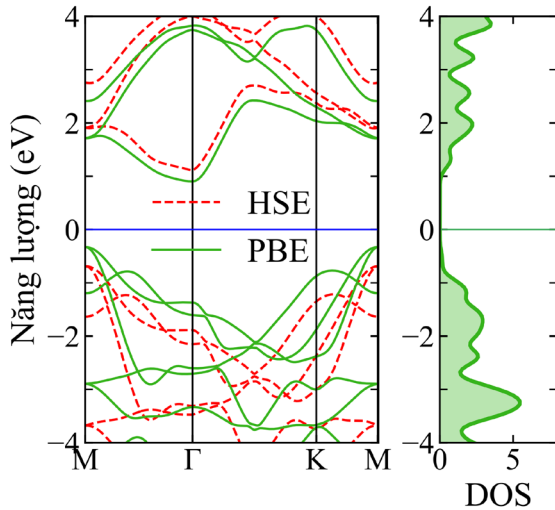


Hình 6. Cấu trúc vùng năng lượng điện tử trong chất rắn

Quá trình tính toán cấu trúc vùng năng lượng gồm các bước: Xác định cấu trúc tinh thể, tính toán hàm sóng electron, sau đó suy ra mật độ trạng thái (DOS) và

dải băng năng lượng. DOS phản ánh số trạng thái mà electron có thể chiếm, trong khi dải băng thể hiện sự phân bố năng lượng của electron trong vật liệu (Hình 7).

Ngoài ra, phân tích cấu trúc vùng còn đánh giá ảnh hưởng của các yếu tố như áp suất, nhiệt độ hoặc pha tạp. Ví dụ, áp suất cao có thể làm thay đổi khoảng cách nguyên tử, biến đổi vùng cấm và ảnh hưởng đến tính chất dẫn điện của vật liệu.



Hình 7. Cấu trúc điện tử của vật liệu 2D được tính toán bằng DFT [19]

Phân tích cấu trúc vùng năng lượng còn giúp làm rõ các hiện tượng lượng tử như hiệu ứng Hall lượng tử, Spin Hall và siêu dẫn, vốn phát sinh từ tương tác phức tạp giữa electron và vùng năng lượng. Hiểu rõ các hiệu ứng này cho phép khai thác các tính chất mới, đặc biệt trong vật liệu 2D ứng dụng cho linh kiện bán dẫn.

Trong công nghiệp, nghiên cứu cấu trúc vùng là nền tảng cho thiết kế vật liệu bán dẫn hiệu suất cao, tiết kiệm năng lượng và bền vững. Nhờ công nghệ mô phỏng tiên tiến, việc tiếp cận cấu trúc vi mô ngày càng chính xác, mở ra nhiều đột phá trong khoa học vật liệu và công nghệ nano.

#### 4. KẾT LUẬN

Nghiên cứu này đã làm rõ vai trò của các bước tính toán cấu trúc vật rắn - từ tối ưu hóa hình học, đánh giá độ bền lý tưởng đến phân tích cấu trúc vùng năng lượng - trong việc hiểu và dự đoán tính chất vật liệu 2D. Phương pháp DFT cho thấy hiệu quả vượt trội trong việc mô phỏng các đặc tính vật lý và hóa học ở cấp độ nguyên tử, đồng thời cung cấp cơ sở tính toán tin cậy cho việc thiết kế vật liệu mới. Nhờ sự phát triển của công nghệ mô phỏng và tính toán, khả năng dự đoán và điều chỉnh tính chất vật liệu ngày càng chính xác, mở ra triển vọng ứng dụng rộng rãi trong các lĩnh vực bán dẫn, năng lượng tái tạo và công nghệ cao.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. R. M. D. Eberhard Engel (2011), *Density Functional Theory*.
- [2]. N. Troullier and J. L. Martins (1991), *Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations*, Phys Rev B Condens Matter, vol. 43, no 3, pp. 1993-2006.
- [3]. William C. Lane and M. S (2002), *University The wave equation and its solutions*, Physnet.
- [4]. N. Fatahi et al. (2020), *2D Hexagonal SnTe monolayer: a quasi direct band gap semiconductor with strain sensitive electronic and optical properties*, The European Physical Journal B, vol. 93, no 2, pp. 1-7.
- [5]. J. M. Gonzalez and I. I. Oleynik (2016), *Layer-dependent properties of SnS<sub>2</sub> and SnSe<sub>2</sub> two-dimensional materials*, Physical Review B, vol. 94, no 12, pp. 125443(10).
- [6]. T. V. Vu et al. (2022), *Novel Janus GalnX<sub>(3)</sub> (X = S, Se, Te) single-layers: first-principles prediction on structural, electronic, and transport properties*, RSC Adv, vol. 12, no 13, pp. 7973-7979.
- [7]. T. V. Vu et al. (2021), *Theoretical prediction of electronic, transport, optical, and thermoelectric properties of Janus monolayers In<sub>2</sub>XO (X=S,Se,Te)*, Physical Review B, vol. 103, no 8, pp. 085422(14).
- [8]. T. V. Vu et al. (2021), *A theoretical study on elastic, electronic, transport, optical and thermoelectric properties of Janus SnSO monolayer*, Journal of Physics D: Applied Physics, vol. 54, no 47, pp. 475306(12).
- [9]. P. R. Wallace (1947), *The Band Theory of Graphite*, Physical Review, vol. 71, no 9, pp. 622-634.
- [10]. Y. Wang et al. (2019), *Ultralow lattice thermal conductivity and electronic properties of monolayer 1T phase semimetal SiTe<sub>2</sub> and SnTe<sub>2</sub>*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, vol. 108, pp. 53-59.
- [11]. C.Y. Lina, D. T. Nga, Y. K. Huang, M. F. Lina (2017), *Optical properties of graphene in magnetic and electric fields*, physics.comp-ph.
- [12]. A. Dal Corso (2016), *Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation*, J Phys Condens Matter, vol. 28, no 7, pp. 075401.
- [13]. E. Schrödinger (1926), *An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules*, Physical Review, vol. 28, no 6, pp. 1049-1070.

- [14]. M. T. Lusk and A. E. Mattsson (2011), *High-performance computing for materials design to advance energy science*, MRS Bulletin, vol. 36, no 3, pp. 169-174.
- [15]. C. G. Broyden (1969), *The convergence of a class of double-rank minimization algorithms*.
- [16]. R. Fletcher (1970), *A new approach to variable metric algorithms*, Oxford University Press.
- [17]. N. H. Linh et al. (2023), *Theoretical computational of electronic and transport properties and optical conductivity of monolayer NiS<sub>2</sub> under mechanical strain*, Journal of science and technology technical universities, vol. 33, no 1, pp. 34-41.
- [18]. N. H. Linh et al. (2023), *First-principles investigation on the electromechanical properties of monolayer 1H Pb-Dichalcogenides*, Materials Research Society of Korea, vol. 33, no 5 ,pp. 189-194.
- [19]. N. H. Linh et al. (2025), *Revealing Photo-electrochemical, Piezoelectric, and Ferroelectric Properties of  $\gamma$ -SnTe Monolayer via Density Functional Theory*, Computational Materials Science, vol. 253, no, pp. 113879(8).

---

#### AUTHORS INFORMATION

**Tran The Quang<sup>1\*</sup>, Pham Thi Thanh Giang<sup>1</sup>,  
Duong Thi Loan<sup>1</sup>, Vu Khắc Hưng<sup>1</sup>, Vu Van Tan<sup>2</sup>**

\*Corresponding author: tranthequang12@gmail.com

<sup>1</sup>Thai Binh University;

<sup>2</sup>Sao Do University.

# THỂ LỆ GỬI BÀI

## TẠP CHÍ NGHIÊN CỨU KHOA HỌC, TRƯỜNG ĐẠI HỌC SAO ĐỎ

Tạp chí Nghiên cứu khoa học, Trường Đại học Sao Đỏ (P. ISSN 1859-4190, E. ISSN 2815-553X), thường xuyên công bố kết quả, công trình nghiên cứu khoa học và công nghệ của các nhà khoa học, cán bộ, giảng viên, nghiên cứu sinh, học viên cao học, sinh viên ở trong và ngoài nước.

1. Tạp chí xuất bản 01 số/quý bằng hai ngôn ngữ tiếng Việt và tiếng Anh. Tạp chí nhận đăng các bài báo khoa học thuộc các lĩnh vực: Điện - Điện tử - Tự động hóa; Cơ khí - Động lực; Kinh tế; Triết học - Xã hội học - Chính trị học; Các lĩnh vực khác gồm: Công nghệ thông tin; Hóa học - Công nghệ thực phẩm; Ngôn ngữ học; Toán học; Vật lý; Văn hóa - Nghệ thuật - Thể dục thể thao...
2. Bài nhận đăng là những công trình nghiên cứu khoa học chưa công bố trong bất kỳ ấn phẩm khoa học nào.
3. Tòa soạn chỉ nhận bài báo gửi online trên website <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn>. Bài báo gửi về tòa soạn dưới dạng file điện tử (\*.doc \*.docx và \*.pdf); cuối bài báo, tác giả ghi rõ thông tin địa chỉ liên hệ, số điện thoại, email và cập nhật thông tin trên website. Bài báo phải được trình bày đúng định dạng, rõ ràng; Trường hợp bài báo phải chỉnh sửa theo thể lệ hoặc theo yêu cầu của Phản biện thì tác giả sẽ cập nhật trên website. Người phản biện sẽ do tòa soạn mời. Tòa soạn không gửi lại bài nếu không được đăng.
4. Các công trình thuộc đề tài nghiên cứu có Cơ quan quản lý cần kèm theo giấy phép cho công bố của cơ quan (Tên đề tài, mã số, tên chủ nhiệm đề tài, cấp quản lý,...).
5. Tên bài báo trình bày bằng hai ngôn ngữ (tiếng Việt và tiếng Anh), font Arial, cỡ chữ 14, in đậm, căn giữa.
6. Tên tác giả (không ghi học hàm, học vị), font Arial, cỡ chữ 10, in đậm, căn lề phải; cơ quan công tác của các tác giả, font Arial, cỡ chữ 9, in nghiêng, căn lề phải.
7. Chữ "Tóm tắt" in đậm, font Arial, cỡ chữ 10; Nội dung tóm tắt của bài báo không quá 10 dòng, trình bày bằng hai ngôn ngữ (tiếng Việt và tiếng Anh), font Arial, cỡ chữ 10, in thường.
8. Chữ "Từ khóa" in đậm, nghiêng, font Arial, cỡ chữ 10; Có từ 03÷05 từ khóa, font Arial, cỡ chữ 10, in nghiêng, ngăn cách nhau bởi dấu chấm phẩy, cuối cùng là dấu chấm.
9. Nội dung bài báo viết bằng tiếng Việt hoặc tiếng Anh; Nếu là bài báo viết bằng tiếng Việt: Tiêu đề tiếng Việt trước, tiếng Anh sau; Tóm tắt tiếng Việt trước, tiếng Anh sau; Từ khóa tiếng Việt trước, tiếng Anh sau; Nếu là bài báo viết bằng tiếng Anh: Tiêu đề tiếng Anh trước, tiếng Việt sau; Tóm tắt tiếng Anh trước, tiếng Việt sau; Từ khóa tiếng Anh trước, tiếng Việt sau.
10. Bài báo được đánh máy trên khổ giấy A4 (21 × 29,7cm) có độ dài không quá 8 trang, font Arial, cỡ chữ 10, giãn dòng At least 12pt, Before 3pt, After 3pt; căn lề trên 2.5cm, dưới 2.5cm, trái 3cm, phải 2cm; hình vẽ phải rõ ràng, đủ nét và được định dạng dưới dạng file ảnh (\*.jpg); Phương trình, công thức phải soạn thảo bằng Mathtype hoặc Equation; Phần nội dung bài báo được chia thành 02 cột, khoảng cách cột là 1cm; Trong trường hợp hình vẽ, hình ảnh có kích thước lớn, bảng biểu có độ rộng lớn hoặc công thức, phương trình dài thì cho phép trình bày dưới dạng 01 cột.
11. Tài liệu tham khảo được sắp xếp theo thứ tự tài liệu được trích dẫn trong bài báo.
  - Nếu là sách/luận án: Tên tác giả (năm), Tên sách/luận án/luận văn, Nhà xuất bản/Trường/Viện, lần xuất bản/tái bản.
  - Nếu là bài báo/báo cáo khoa học: Tên tác giả (năm), Tên bài báo/báo cáo, Tạp chí/Hội nghị/Hội thảo, Tập/Kỷ yếu, số, trang.
  - Nếu là trang web: Phải trích dẫn đầy đủ tên website và đường link, ngày cập nhật.
12. Định dạng mẫu bài báo tham khảo tại địa chỉ [http://tapchikhcn.saodo.edu.vn/news/detail/198/format\\_paper](http://tapchikhcn.saodo.edu.vn/news/detail/198/format_paper)  
Bài báo sau khi xuất bản sẽ được công bố trên <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn>.

### THÔNG TIN LIÊN HỆ:

**Ban Biên tập Tạp chí Nghiên cứu khoa học, Trường Đại học Sao Đỏ**

Phòng 203, Tầng 2, Nhà B1, Trường Đại học Sao Đỏ.

Địa chỉ: Số 76, Nguyễn Thị Duệ, KDC Thái Học 2, P. Chu Văn An, TP. Hải Phòng.

Điện thoại: (0220) 3587213, Fax: (0220) 3882921, Hotline: 0912 107858/0936 847980.

Website: <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn>

Email: [tapchikhcn@saodo.edu.vn](mailto:tapchikhcn@saodo.edu.vn)

**Tạp chí Nghiên cứu khoa học, Trường Đại học Sao Đỏ, Số 1 (93) 2026**



**BỘ CÔNG THƯƠNG**

**TRƯỜNG ĐẠI HỌC SAO ĐỎ**

**Địa chỉ:**

- **Số 1:** Số 76, đường Nguyễn Thị Duệ, KDC Thái Học 2, phường Chu Văn An, thành phố Hải Phòng.
- **Số 2:** Số 72, đường Nguyễn Thái Học, quốc lộ 37, phường Chu Văn An, thành phố Hải Phòng.
- **Điện thoại:** (0220) 3882 269 **Fax:** (0220) 3882 921 **Website:** <http://saodo.edu.vn> **Email:** [info@saodo.edu.vn](mailto:info@saodo.edu.vn)

**P. ISSN 1859-4190**  
**E. ISSN 2815-553X**

**Số 1 (93)**  
**2026**

**Địa chỉ Tòa soạn:**

Trường Đại học Sao Đỏ

Số 76, đường Nguyễn Thị Duệ, KDC Thái Học 2, phường Chu Văn An, thành phố Hải Phòng.

Điện thoại: (0220) 3587213, Fax: (0220) 3882 921, Hotline: 0912 107858/0936 847980.

Website: <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn/>Email: [tapchikhcn@saodo.edu.vn](mailto:tapchikhcn@saodo.edu.vn).

Giấy phép xuất bản số: 620/GP-BTTTT ngày 17/9/2021 của Bộ Thông tin và Truyền thông.  
In 2.000 bản, khổ 21 × 29,7cm, tại Công ty TNHH in Tre Xanh, cấp ngày 17/02/2011.