



## The Mechanical, Electric and Thermoelectric Properties of the Low-Dimensional Material SnSx

---

Tran The Quang, Nguyen Hoàng Linh, Nguyen Minh Son,  
Nguyen Van Hoi, Vuong Van Thanh, Tran Thá» Hòa and  
Đo Van Truong

EasyChair preprints are intended for rapid dissemination of research results and are integrated with the rest of EasyChair.

November 28, 2022

# Tính chất cơ học, điện tử và nhiệt điện của vật liệu thấp chiều SnS<sub>x</sub>

Trần Thế Quang<sup>1,\*</sup>, Nguyễn Hoàng Linh<sup>2</sup>, Nguyễn Minh Sơn<sup>2</sup>, Nguyễn Văn Hội<sup>3</sup>, Vương Văn Thanh<sup>2</sup>, Trần Thị Hòa<sup>1</sup> và Đỗ Văn Trường<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup> Đại học Thái Bình, Thái Bình

<sup>2</sup> Trường Cơ Khí, Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội

<sup>3</sup> Đại học quốc gia Jeonbuk, Hàn Quốc

\*Email: tranthequang12@gmail.com; truong.dovan@hust.edu.vn

**Tóm tắt.** Trong nghiên cứu này, các tính chất cơ, nhiệt điện của vật liệu thấp chiều SnS<sub>x</sub> ( $x = 1, 2$ ) được tính toán bằng phương pháp nguyên lý đầu sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ. Kết quả thu được cho thấy vật liệu SnS có tính dị hướng, mô đun đàn hồi theo phương  $x$  và phương  $y$  lần lượt có giá trị là 10,47 N/m và 23,93 N/m, nó nhỏ hơn nhiều lần so với vật liệu SnS<sub>2</sub> là 93,23 N/m. Ở trạng thái cân bằng, SnS có độ rộng vùng cấm bằng 1,44 eV cao hơn so với 0,76 eV của SnS<sub>2</sub>. Tính chất bán dẫn của SnS và SnS<sub>2</sub> đều có xu hướng tăng dưới biến dạng kéo và giảm dưới biến dạng nén. Hệ số Seebeck (hệ số nhạy nhiệt điện -  $S$ ) của SnS lớn ( $> 2$  mV/K ở 300K) và có thể tăng dưới tác động của biến dạng kéo. Độ dẫn điện có thể được cải thiện khi tác dụng biến dạng. Kết quả nghiên cứu góp phần làm sáng tỏ ảnh hưởng của biến dạng cơ học đến tính chất nhiệt điện, điện tử của vật liệu ứng dụng vào nghiên cứu lý thuyết và thực tiễn trong tương lai.

*Từ khóa:* Vật liệu 2D, Nhiệt điện, Độ rộng vùng cấm, Hệ số Seebeck.

## 1. Giới thiệu

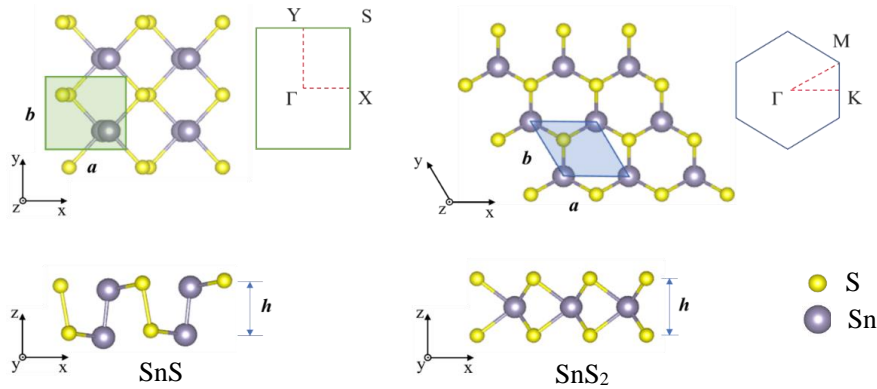
Việc tìm kiếm các vật liệu mới có khả năng chuyển hóa nguồn nhiệt năng tự nhiên và thu hồi nhiệt thải trong quá trình sản xuất công nghiệp đang rất được quan tâm nghiên cứu nhằm hướng tới nguồn năng lượng ‘xanh’. Trong số các vật liệu đó, vật liệu thấp chiều (1D và 2D) họ kim loại chuyển tiếp (TMDs) với cấu trúc và tính chất vật lý khác biệt đang được khám phá. Ataca và cộng sự [1] đã xác định được 52 vật liệu cấu trúc kim loại chuyển tiếp chalcogenides tồn tại dạng tổ ong và có thể cung cấp một nền tảng mới cho các ứng dụng của quang xúc tác [2], lưu trữ năng lượng [3], cảm biến [4] và các thiết bị điện tử [5], [6].

Gần đây, nhóm vật liệu gốc Sn (SnS<sub>x</sub>,  $x = 1, 2$ ), đã được chú ý nhiều do có tính điện tử ưu việt, thể hiện tính chất của vật liệu bán dẫn [7]–[9], tính ổn định cao, độ bền cơ học lớn [9], giá thành chế tạo rẻ, thân thiện với môi trường và có nguồn gốc từ tự nhiên [10]. Chúng được ứng dụng phổ biến trong thiết bị quang điện [11], chất xúc tác quang [12], [13], máy tách sóng quang [13], cảm biến khí, bóng bán dẫn hiệu ứng trường, pin lithium và các thiết bị lưu trữ thông tin điện tử [9], [14]. Đặc biệt, hai vật liệu SnS, SnS<sub>2</sub> sở hữu tiềm năng nhiệt điện lớn, SnS là vật liệu có hiệu suất chuyển đổi nhiệt - điện cao [15], [16] trong khi đó SnS<sub>2</sub> là ứng cử viên tuyệt vời của nhiệt điện loại p trong điều kiện áp suất cao [17], do có hệ số nhạy về nhiệt điện và độ dẫn điện lớn. Hơn nữa, một công trình gần đây đã minh chứng về hiện tượng siêu dẫn trong lớp 1T-SnS<sub>2</sub> ứng dụng trong bóng bán dẫn đa lớp, cung cấp một quan điểm mới về hiện tượng siêu dẫn 2D [18]. Để hiểu sâu thêm về các đặc tính điện tử, nhiệt điện của SnS, SnS<sub>2</sub> liên quan đến cấu trúc nguyên tử, nghiên cứu ảnh hưởng của biến dạng cơ học đến các tính chất vật lý của vật liệu được thực hiện. Các tính toán sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) [19] được dùng để khảo sát các biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và phương  $y$  lên cấu trúc, điện tử và nhiệt điện của vật liệu đơn lớp SnS, SnS<sub>2</sub>.

## 2. Phương pháp tính toán

Các tính toán của nghiên cứu được thực hiện bằng phương pháp nguyên lý đầu [20] dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ (Density Functional Theory - DFT) qua phần mềm Quantum Espresso [21]. Các giả thế Vanderbilt (USPP) [22] được sử dụng để mô tả tương tác giữa các electron với năng lượng tương quan trao đổi được xác định qua hàm Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) bằng phương pháp xấp xỉ gradient tổng quát (GGA) [23]. Hàm sóng trên mặt phẳng được khảo sát trong phạm vi ngưỡng năng lượng tối thiểu bằng 60 Ry và ngưỡng năng lượng cho mật độ điện tích là 720 Ry. Lưới chia điểm kpoint trong vùng Brillouin được chọn là  $15 \times 15 \times 1$  theo phương pháp Monkhorst-Pack [24].

Mô hình cấu trúc nguyên tử của SnS và SnS<sub>2</sub> được biểu diễn trên hình 1. Điều kiện biên tuần hoàn được áp dụng trên cả ba phương  $x$ ,  $y$ ,  $z$  của mô hình. Để tránh sự tương tác giữa các lớp nguyên tử theo phương  $z$ , vùng chân không được thiết lập với chiều dày bằng 30 Å. Cấu trúc vật liệu được cân bằng theo phương pháp năng lượng cực tiểu Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) với điều kiện về ứng suất nhỏ hơn  $5 \cdot 10^{-2}$  GPa, điều kiện lực nhỏ hơn  $10^{-6}$  Ry/a.u ở nhiệt độ 0K [25]. Các hằng số đàn hồi được tính toán bằng giải thuật Thermo-Pw [26]. Hệ số Seebeck ( $S$ ), độ dẫn điện  $\sigma$  được mô tả qua phương trình Boltzmann [27] được làm sáng tỏ.

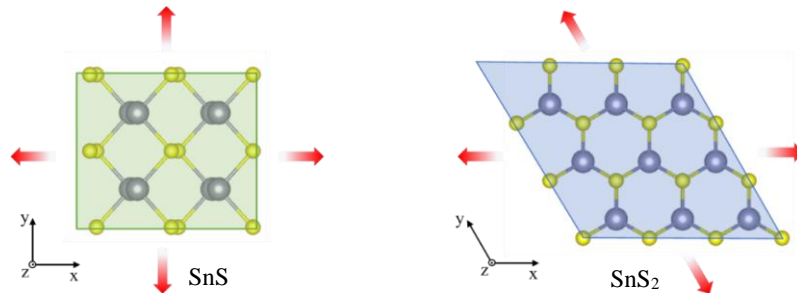


Hình 1. Cấu trúc của hai vật liệu SnS, SnS<sub>2</sub> đơn lớp và vùng Brillouin với các điểm đối xứng bậc cao.

Cấu trúc vật liệu được khảo sát dưới tác động của biến dạng đồng thời theo hai phương  $x$  và  $y$  trên hình 2. Biến dạng  $\varepsilon$  được tính toán theo công thức (1):

$$\varepsilon = \frac{l_1 - l_0}{l_0} \times 100\% \quad (1)$$

Ở đây,  $l_1$ ,  $l_0$  lần lượt là thông số mạng tinh thể ở trạng thái biến dạng (kéo hoặc nén) và thông số mạng của trạng thái cân bằng. Mô hình được khảo sát với mức biến dạng từ -10% đến 10% với mỗi bước biến dạng là 2%. Sau mỗi bước biến dạng, cấu trúc vật liệu được ổn định với các thành phần ứng suất dư nhỏ hơn  $5,0 \times 10^{-2}$  GPa.



Hình 2. Minh họa biến dạng kéo nén đồng thời theo hai phương  $x$  và  $y$

Các thông số cơ học của vật liệu như mô đun đàn hồi  $E$ , hệ số poisson  $\nu$  được xác định theo các hằng số đàn hồi  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  và  $C_{22}$  [28]–[30]:

$$E_{xx} = C_{11} - \frac{C_{12}^2}{C_{22}}; \quad E_{yy} = C_{22} - \frac{C_{12}^2}{C_{11}}; \quad \nu_{xy} = \frac{C_{12}}{C_{22}}; \quad \nu_{yx} = \frac{C_{12}}{C_{11}} \quad (3)$$

### 3. Kết quả và thảo luận

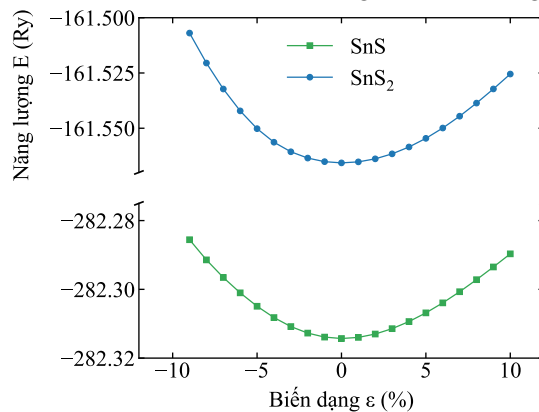
#### 3.1. Tính chất cơ học và cấu trúc nguyên tử

Trong nghiên cứu này, hai cấu trúc của vật liệu thấp chiều SnSx ( $x = 1, 2$ ) đơn lớp như mô tả trên hình 1 được khảo sát. Kết quả tính toán thu được về thông số mạng tinh thể và các hằng số đàn hồi của vật liệu SnS và SnS<sub>2</sub> đơn lớp ở trạng thái cân bằng được liệt kê trong bảng 1. Vật liệu SnS<sub>2</sub> có hằng số mạng lần lượt là  $a = b = 3,60(\text{Å})$  sai khác 0,5% so với L.H. Qu và cộng sự [31], vật liệu SnS có hằng số mạng là  $a = 4,05(\text{Å})$  và  $b = 4,33(\text{Å})$  kết quả phù hợp với các công trình cả thực nghiệm [32] và lý thuyết [33]. Từ kết quả thu được cho thấy, vật liệu SnS có tính dị hướng cao hơn so với vật liệu SnS<sub>2</sub> và hai vật liệu đều thỏa mãn điều kiện về ổn định đàn hồi với  $C_{11} > |C_{12}| > 0$  và  $C_{66} > 0$  [34].

Bảng 1: Thông số mạng  $a$  &  $b$  (Å), chiều dày tấm  $h$  (Å), hằng số đàn hồi  $C_{ij}$  (N/m), mô đun đàn hồi  $E$  (N/m) và hệ số poisson  $\nu$  của vật liệu SnS và SnS<sub>2</sub>

Vật liệu	$a$	$b$	$h$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{22}$	$C_{66}$	$E_{xx} - E_{yy}$	$\nu_{xy} - \nu_{yx}$
SnS <sub>2</sub>	3,60	3,60	3,24	99,26	24,46	99,26	37,40	93,23 - 93,23	0,25 - 0,25
SnS	4,05	4,33	2,88	17,26	16,37	39,46	16,21	10,47 - 23,93	0,41 - 0,44

Hình 3 thể hiện quan hệ giữa biến dạng và mức năng lượng của vật liệu SnS và SnS<sub>2</sub>. Kết quả cho thấy, mức năng lượng ở vị trí cân bằng ( $\epsilon = 0\%$ ) luôn thấp nhất, đảm bảo được trạng thái ổn định. Khi vật liệu thay đổi về cấu trúc ( $\epsilon \neq 0\%$ ) thì mức năng lượng tăng dần theo mức độ của biến dạng. Nhìn chung, cả hai cấu trúc vật liệu đều ổn định dưới tác dụng của biến dạng.

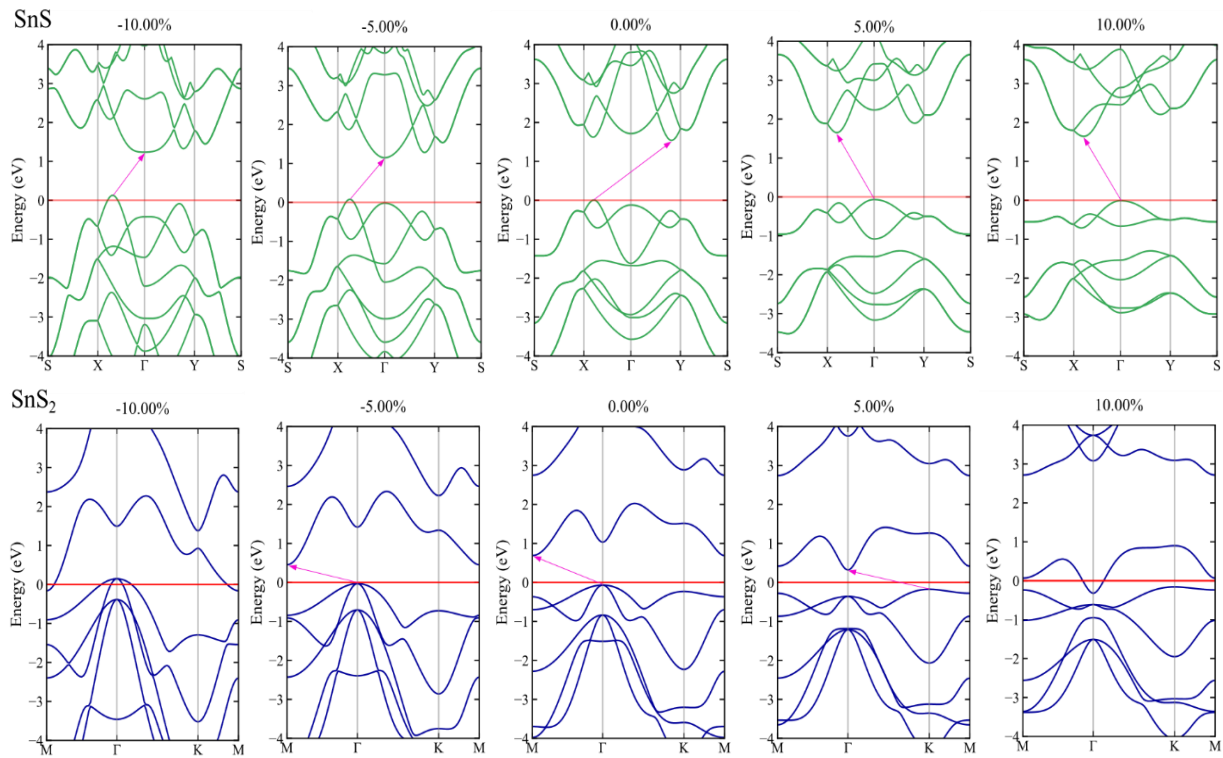


Hình 3. Quan hệ năng lượng và biến dạng

#### 3.2. Tính chất điện tử

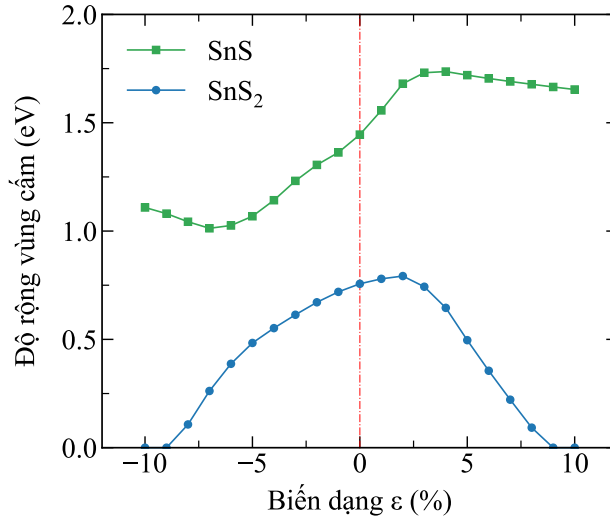
Để tìm hiểu ảnh hưởng của biến dạng đến tính chất điện tử của vật liệu, cấu trúc vùng năng lượng của SnS và SnS<sub>2</sub> được khảo sát ở một vài mức của biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và  $y$ , như hình 4 (a) và (b). Kết quả thu được cho thấy cấu trúc vùng năng lượng của SnS và SnS<sub>2</sub> bị thay đổi dưới tác

dụng của biến dạng. Hay nói cách khác, biến dạng có thể điều khiển cấu trúc vùng năng lượng. Ở trạng thái cân bằng ( $\varepsilon = 0$ ), cả SnS và SnS<sub>2</sub> đều có tính chất bán dẫn với độ rộng vùng cấm bằng 1,44 eV và 0,76 eV, tương ứng. Sự thay đổi độ rộng vùng cấm của SnS và SnS<sub>2</sub> đơn lớp do biến dạng được xác định bởi chênh lệch giá trị năng lượng cực tiểu vùng dẫn và giá trị năng lượng cực đại vùng hóa trị. Do đó, biến dạng có thể dẫn đến những thay đổi đáng kể về độ rộng vùng cấm của nó. Với vật liệu SnS, các tính toán đã chứng minh được rằng biến dạng kéo làm cho điểm có mức năng lượng lớn nhất của vùng hóa trị dịch chuyển từ gần điểm X sang điểm  $\Gamma$ , điểm có mức năng lượng thấp nhất của vùng dẫn lại dịch chuyển gần về phía điểm X. Ngược lại, biến dạng nén hầu như chỉ làm thay đổi sự phân bố của điểm có năng lượng thấp nhất của vùng dẫn, từ điểm Y sang điểm  $\Gamma$ . Khác với vật liệu SnS, biến dạng nén và kéo theo hai phương  $x$  và  $y$  làm cho độ rộng vùng cấm của SnS<sub>2</sub> thay đổi không đáng kể, đồng thời vị trí các điểm năng lượng thấp nhất và cao nhất của vùng dẫn, vùng hoá trị tương ứng luôn phân bố ở các điểm đối xứng bậc cao như  $\Gamma - M$  ( $\varepsilon = 0\%$  và  $\varepsilon = -5\%$ ),  $\Gamma - K$  ( $\varepsilon = 5\%$ ).



Hình 4. Cấu trúc vùng năng lượng ở một vài biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và  $y$

Hình 5 trình bày ảnh hưởng của biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và  $y$  đến độ rộng vùng cấm của hai vật liệu SnS và SnS<sub>2</sub>. Kết quả khảo sát cho thấy, dưới tác động của biến dạng ( $\varepsilon \neq 0$ ), độ rộng vùng cấm của SnS và SnS<sub>2</sub> bị thay đổi. Độ rộng vùng cấm của SnS tăng từ 1,44 eV tại  $\varepsilon = 0\%$  đến 1,7 eV tại  $\varepsilon = 6\%$  và sau đó giảm xuống 1,65 eV tại  $\varepsilon = 10\%$ . Với vật liệu SnS<sub>2</sub>, độ rộng vùng cấm tăng nhẹ ở khoảng 2,5% sau đó giảm về 0 tại  $\varepsilon = 10\%$ . Độ rộng lớn nhất của SnS<sub>2</sub> là 0,79 eV tại  $\varepsilon = 2\%$  so với 0,76 eV tại  $\varepsilon = 0\%$ . Ngược lại, biến dạng nén làm cho độ rộng vùng cấm của SnS và SnS<sub>2</sub> đều có xu hướng giảm mạnh. Cụ thể, ở mức biến dạng nén  $\varepsilon = -10\%$  vật liệu SnS vẫn tồn tại tính bán dẫn trong khi tại mức nén  $\varepsilon = -9\%$  vật liệu SnS<sub>2</sub> chuyển thành vật liệu kim loại. Như vậy, vật liệu SnS dưới biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và  $y$  đến  $\pm 10\%$  vẫn tồn tại tính bán dẫn và vật liệu SnS<sub>2</sub> chỉ tồn tại tính bán dẫn với mức biến dạng nhỏ hơn  $\pm 9\%$ .



Hình 5. Ảnh hưởng của biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và  $y$  đến độ rộng vùng cấm

### 3.3. Tính chất nhiệt điện

Để đánh giá tính chất nhiệt điện của vật liệu 2D, người ta có thể tính toán độ dẫn điện ( $\sigma$ ), hệ số Seebeck ( $S$ ) theo các công thức [35], [36]:

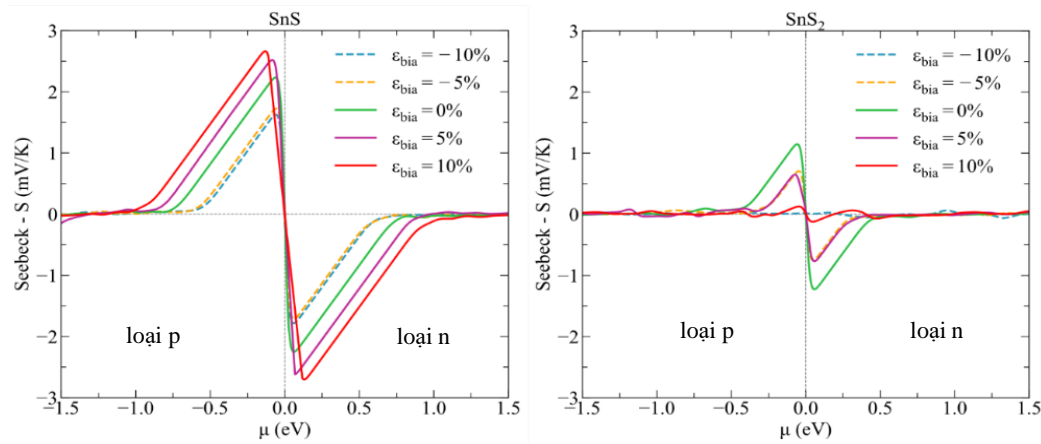
$$\sigma = q^2 L_0 \quad (4)$$

$$S = \frac{L_1}{qTL_0} \quad (5)$$

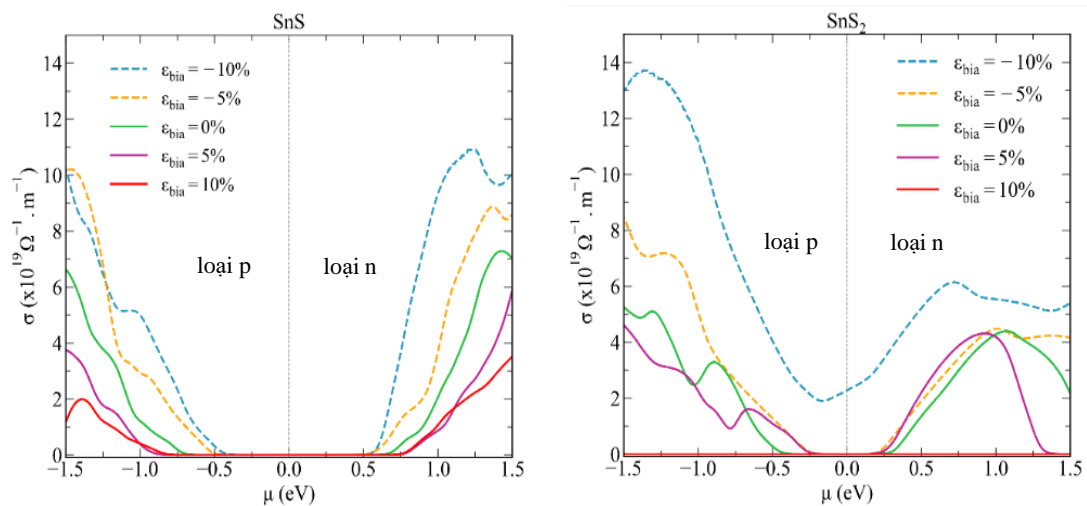
$$L_i = \frac{2}{h} \int (E - \mu)^i \left[ -\frac{\partial f(E, \mu, T)}{\partial E} \right] \tau(E) dE \quad (6)$$

Trong đó,  $q$  là điện tích của hạt tải điện (là điện tích dương đối với lỗ trống và điện tích âm đối với điện tử),  $T$  là nhiệt độ tuyệt đối (K),  $f(E, \mu, T)$  là hàm phân phối Fermi-Dirac,  $\mu$  là năng lượng thế hóa,  $h$  là hằng số Planck,  $E$  là năng lượng ở trạng thái cân bằng của cấu trúc và  $L_i$  được xác định dưới dạng hàm mô men dịch chuyển điện tử với  $i = 0, 1$  hoặc  $2$  tùy thuộc vào đặc tính nhiệt điện được tính toán.

Hình 6 trình bày ảnh hưởng của biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và  $y$  đến hệ số  $S$  của hai vật liệu SnS và SnS<sub>2</sub> ở 300K. Sự biến thiên của hệ số  $S$  được xem xét cả ở lớp tiếp giáp bán dẫn kiểu dương (loại n) và tiếp giáp bán dẫn kiểu âm (loại p). Kết quả chỉ ra rằng hệ số  $S$  của SnS là 2,235 mV/K (loại p) và 2,252 mV/K (loại n) cao hơn so với hệ số của SnS<sub>2</sub> là 1,148 mV/K (loại p) và 1,185 mV/K (loại n) tại  $\varepsilon = 0\%$ . Hệ số  $S$  của SnS giảm dưới biến dạng nén và tăng dưới biến dạng kéo. Giá trị  $S$  cao nhất là 2,485 mV/K (loại p) và 2,653 mV/K (loại n) tại  $\varepsilon = 10\%$  và thấp nhất là 1,628 mV/K (loại p) và 1,620 mV/K (loại n) tại  $\varepsilon = -10\%$ . Với vật liệu SnS<sub>2</sub>, hệ số  $S$  giảm ở cả biến dạng kéo, nén và  $S$  gần như bị triệt tiêu ở khoảng biến dạng  $\pm 10\%$ . Giá trị hệ số  $S$  của SnS lớn hơn xấp xỉ khoảng 2 lần so với giá trị của SnS<sub>2</sub> ở biến dạng 0%. Độ dẫn điện  $\sigma$  của SnS và SnS<sub>2</sub> tăng dưới biến dạng nén và giảm dưới biến dạng kéo như mô tả trên hình 7. Giá trị độ dẫn điện  $\sigma$  của SnS<sub>2</sub> dưới biến dạng nén có giá trị lớn nhất là  $13,7 \times 10^{19} \Omega^{-1}m^{-1}$  (loại p) và  $6,14 \times 10^{19} \Omega^{-1}m^{-1}$  (loại n) thay đổi lớn hơn so với SnS là  $10,4 \times 10^{19} \Omega^{-1}m^{-1}$  (loại p) và  $10,9 \times 10^{19} \Omega^{-1}m^{-1}$  (loại n) tại  $\varepsilon = -10\%$ . Như vậy, có thể nhận thấy rằng biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và  $y$  ảnh hưởng là đáng kể đến hệ số  $S$  và độ dẫn điện  $\sigma$  của SnS và SnS<sub>2</sub>.



Hình 6. Ảnh hưởng của biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và  $y$  đến hệ số Seebeck ở 300K.



Hình 7. Ảnh hưởng của biến dạng đồng thời theo phương  $x$  và  $y$  đến độ dẫn điện  $\sigma$  ở 300K.

#### 4. Kết luận

Nghiên cứu của chúng tôi đã làm sáng tỏ ảnh hưởng của biến dạng cơ học đến tính chất điện tử và nhiệt điện của hai vật liệu họ Sn dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ. Kết quả thu được cho thấy, vật liệu SnS có tính dị hướng cao hơn và sở hữu mô đun đàn hồi nhỏ hơn so với SnS<sub>2</sub>. Bên cạnh đó, biến dạng đã có tác động lên cấu trúc vùng năng lượng, làm cho các vật liệu thay đổi về độ rộng vùng cấm, là yếu tố giúp thay đổi tính chất bán dẫn của vật liệu. Thêm vào đó, một số đặc trưng nhiệt điện của vật liệu cũng được thay đổi khi có biến dạng, làm tăng khả năng chuyển hoá nhiệt - điện. Các khảo sát có ý nghĩa tích cực phục vụ đời sống.

#### Tài liệu tham khảo

- [1] C. Ataca, H. Şahin, and S. Ciraci. Stable, single-layer MX<sub>2</sub> transition-metal oxides and dichalcogenides in a honeycomb-like structure. *Journal of Physical Chemistry C*, **116**, (16), (2012), pp. 8983–8999.
- [2] M. Chhowalla, H. S. Shin, G. Eda, L. J. Li, K. P. Loh, and H. Zhang. The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenide nanosheets. *Nature Chemistry*, **5**, (4), (2013), pp. 263–275.
- [3] H. Wang, H. Feng, and J. Li. Graphene and graphene-like layered transition metal dichalcogenides in energy conversion and storage. *Small*, **10**, (11), (2014), pp. 2165–2181.
- [4] D. Jariwala, V. K. Sangwan, L. J. Lauhon, T. J. Marks, and M. C. Hersam. Emerging device applications

- for semiconducting two-dimensional transition metal dichalcogenides. *ACS Nano*, **8**, (2), (2014), pp. 1102–1120.
- [5] W. Liu, J. Kang, D. Sarkar, Y. Khatami, D. Jena, and K. Banerjee. Role of metal contacts in designing high-performance monolayer n-type  $\text{WSe}_2$  field effect transistors. *Nano Letters*, **13**, (5), (2013), pp. 1983–1990.
- [6] S. Larentis, B. Fallahazad, and E. Tutuc. Field-effect transistors and intrinsic mobility in ultra-thin  $\text{MoSe}_2$  layers. *Applied Physics Letters*, **101**, (22), (2012), pp. 223104–4.
- [7] D. M. Guzman and A. Strachan. Role of strain on electronic and mechanical response of semiconducting transition-metal dichalcogenide monolayers: An ab-initio study. *Journal of Applied Physics*, **115**, (24), (2014), pp. 243701–8.
- [8] W. Z. Xiao, G. Xiao, and L. L. Wang. A first-principles study of the  $\text{SnO}_2$  monolayer with hexagonal structure. *Journal of Chemical Physics*, **145**, (17), (2016), pp. 174702–9.
- [9] F. A. Rasmussen and K. S. Thygesen. Computational 2D Materials Database: Electronic Structure of Transition-Metal Dichalcogenides and Oxides. *Journal of Physical Chemistry C*, **119**, (23), (2015), pp. 13169–13183.
- [10] Y. Huang *et al.* Tin disulfide—an emerging layered metal dichalcogenide semiconductor: Materials properties and device characteristics. *ACS Nano*, **8**, (10), (2014), pp. 10743–10755.
- [11] V. O. Özçelik, O. Ü. Aktürk, E. Durgun, and S. Ciraci. Prediction of a two-dimensional crystalline structure of nitrogen atoms. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, **92**, (12), (2015), pp. 125420–8.
- [12] L. A. Burton *et al.* Electronic and optical properties of single crystal  $\text{SnS}_2$ : An earth-abundant disulfide photocatalyst. *Journal of Materials Chemistry A*, **4**, (4), (2016), pp. 1312–1318.
- [13] G. Su *et al.* Chemical vapor deposition of thin crystals of layered semiconductor  $\text{SnS}_2$  for fast photodetection application. *Nano Letters*, **15**, (1), (2015), pp. 506–513.
- [14] X. An, J. C. Yu, and J. Tang. Biomolecule-assisted fabrication of copper doped  $\text{SnS}_2$  nanosheet-reduced graphene oxide junctions with enhanced visible-light photocatalytic activity. *Journal of Materials Chemistry A*, **2**, (4), (2014), pp. 1000–1005.
- [15] L. D. Zhao *et al.* Ultralow thermal conductivity and high thermoelectric figure of merit in  $\text{SnSe}$  crystals. *Nature*, **508**, (7496), (2014), pp. 373–377.
- [16] Q. Tan *et al.* Thermoelectrics with earth abundant elements: Low thermal conductivity and high thermopower in doped  $\text{SnS}$ . *Journal of Materials Chemistry A*, **2**, (41), (2014), pp. 17302–17306.
- [17] J. A. Kilner, S. J. Skinner, S. J. C. Irvine, and P. P. Edwards. *Functional materials for sustainable energy applications*, (2012). Woodhead Publishing Series in Energy, 2012.
- [18] J. Zeng *et al.* Gate-Induced Interfacial Superconductivity in 1T- $\text{SnSe}_2$ . *Nano Letters*, **18**, (2), (2018), pp. 1410–1415.
- [19] G. Kresse and J. Furthmüller. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, **54**, (16), (1996), pp. 11169–11186.
- [20] M. A. Morales, R. Clay, C. Pierleoni, and D. M. Ceperley. First principles methods: A perspective from quantum Monte Carlo. *Entropy*, **16**, (1), (2014), pp. 287–321.
- [21] P. Giannozzi *et al.* QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics Condensed Matter*, **21**, (39), (2009),
- [22] D. Vanderbilt. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical Review B*, **41**, (11), (1990), pp. 7892–7895.
- [23] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, **77**, (18), (1996), pp. 3865–3868.
- [24] H. J. Monkhorst and J. D. Pack. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, **13**, (12), (1976), pp. 5188–5192.
- [25] V. Van Thanh, N. D. Van, D. Van Truong, and N. T. Hung. Effects of strain and electric field on electronic and optical properties of monolayer  $\gamma$ - $\text{GeX}$  ( $X = \text{S}, \text{Se}$  and  $\text{Te}$ ). *Applied Surface Science*, **582**, (January), (2022),
- [26] A. Dal Corso. Elastic constants of beryllium: A first-principles investigation. *Journal of Physics Condensed*



- Matter*, **28**, (7), (2016), pp. 075401–16.
- [27] G. Pizzi, D. Volja, B. Kozinsky, M. Fornari, and N. Marzari. BoltzWann: A code for the evaluation of thermoelectric and electronic transport properties with a maximally-localized Wannier functions basis. *Computer Physics Communications*, **185**, (1), (2014), pp. 422–429.
- [28] V. Van Thanh, N. T. Hung, and D. Van Truong. Charge-induced electromechanical actuation of Mo- and W-dichalcogenide monolayers. *RSC Advances*, **8**, (67), (2018), pp. 38667–38672.
- [29] V. Van Thanh, N. D. Van, D. Van Truong, R. Saito, and N. T. Hung. First-principles study of mechanical, electronic and optical properties of Janus structure in transition metal dichalcogenides. *Applied Surface Science*, **526**, (2020), pp. 146730–29.
- [30] V. Van Thanh, D. Van Truong, and N. T. Hung. Charge-induced electromechanical actuation of two-dimensional hexagonal and pentagonal materials. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **21**, (40), (2019), pp. 22377–22384.
- [31] L. H. Qu *et al.* Strain tunable structural, mechanical and electronic properties of monolayer tin dioxides and dichalcogenides SnX<sub>2</sub> (X=O, S, Se, Te). *Materials Research Bulletin*, **119**, (2019), pp. 110533–6.
- [32] J. R. Brent *et al.* Tin(II) Sulfide (SnS) Nanosheets by Liquid-Phase Exfoliation of Herzenbergite: IV-VI Main Group Two-Dimensional Atomic Crystals. *Journal of the American Chemical Society*, **137**, (39), (2015), pp. 12689–12696.
- [33] Y. Zhang, B. Shang, L. Li, and J. Lei. Coupling effects of strain on structural transformation and bandgap engineering in SnS monolayer. *RSC Advances*, **7**, (48), (2017), pp. 30327–30333.
- [34] F. Mouhat and F. X. Coudert. Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, **90**, (22), (2014), pp. 224104–4.
- [35] E. H. Hasdeo, L. P. A. Krisna, M. Y. Hanna, B. E. Gunara, N. T. Hung, and A. R. T. Nugraha. Optimal band gap for improved thermoelectric performance of two-dimensional Dirac materials. *Journal of Applied Physics*, **126**, (3), (2019), pp. 1–10.
- [36] L. Medrano Sandonas *et al.* Anisotropic Thermoelectric Response in Two-Dimensional Puckered Structures. *Journal of Physical Chemistry C*, **120**, (33), (2016), pp. 18841–18849.