



DOI: <https://doi.org/10.52714/dthu.14.04S.2025.1580>

NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG LỰC HỌC CỦA HỆ VẬT LIỆU HAI CHIỀU Ge/MoS₂ THÔNG QUA LÝ THUYẾT PHIẾM HÀM MẬT ĐỘ VÀ PHƯƠNG PHÁP HỌC SÂU

Nguyễn Hữu Phúc¹, Dương Trọng Nhân^{2,3}, Nguyễn Duy Khanh^{2,3} và Đặng Minh Triết^{1*}

¹*Trường Sư phạm, Đại học Cần Thơ, Việt Nam*

²*Phòng thí nghiệm Vật lý tính toán, Viện Khoa học tính toán và Trí tuệ nhân tạo, Trường Đại học Văn Lang, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam*

³*Khoa Kỹ thuật Cơ – Điện và Máy tính, Trường Công nghệ, Trường Đại học Văn Lang, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam*

**Tác giả liên hệ, Email: dmtriet@ctu.edu.vn*

Lịch sử bài báo

Ngày nhận: 01/6/2025; Ngày nhận chỉnh sửa: 13/7/2025; Ngày duyệt đăng: 22/7/2025

Tóm tắt

Nghiên cứu này trình bày việc phát triển và ứng dụng các thể tương tác nguyên tử học máy dựa trên mạng neuron cho việc mô phỏng các vật liệu hai chiều: Germanene đơn lớp, MoS₂ đơn lớp và dị cấu trúc Ge/MoS₂. Dữ liệu mô phỏng từ lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) được sử dụng để huấn luyện các mô hình học máy thông qua bộ công cụ DeePMD-kit nhằm dự đoán năng lượng hình thành và lực nguyên tử. Kết quả cho thấy phương pháp học máy có khả năng dự đoán chính xác giảm đồ năng lượng toàn phần của hệ, ngay cả khi dữ liệu huấn luyện bị giới hạn. Tuy nhiên, các dự đoán về lực nguyên tử tuy đạt độ chính xác tương đối nhất là trong các tính toán trạng thái phonon của hệ. Các cấu hình mạng neuron tối ưu đã được xác định cho từng hệ vật liệu, giúp cải thiện hiệu suất học máy. Kết quả nghiên cứu này khẳng định tiềm năng của học máy, đặc biệt là các mô hình học sâu, trong việc tăng tốc mô hình hóa nhiệt động học của các dị cấu trúc 2D với chi phí tính toán thấp hơn đáng kể so với phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ. Ngoài ra, nghiên cứu cũng nhấn mạnh sự cần thiết của các tập dữ liệu đa dạng hơn nhằm nâng cao độ tin cậy trong dự đoán lực cho các mô phỏng động lực học.

Từ khóa: *Học máy, học sâu, mạng neuron.*

Trích dẫn: Nguyễn, H. P., Dương, T. N., Nguyễn, D. K., & Đặng, M. T. (2025). Nghiên cứu tính chất nhiệt động lực học của hệ vật liệu hai chiều Ge/MoS₂ thông qua lý thuyết phiếm hàm mật độ và phương pháp học sâu. *Tạp chí Khoa học Đại học Đồng Tháp*, 14(04S), 202-213. <https://doi.org/10.52714/dthu.14.04S.2025.1580>

Copyright © 2025 The author(s). This work is licensed under a CC BY-NC 4.0 License.

DEEP LEARNING-BASED INTERATOMIC POTENTIALS FOR PREDICTING THERMODYNAMIC PROPERTIES OF TWO-DIMENSIONAL Ge/MoS₂ SYSTEMS

Nguyen Huu Phuc¹, Duong Trong Nhan^{2,3}, Nguyen Duy Khanh^{2,3}, and Dang Minh Triet^{1*}

¹*School of Education, Can Tho University, Vietnam*

²*Laboratory for Computational Physics, Institute for Computational Science and Artificial Intelligence, Van Lang University, Ho Chi Minh City, Vietnam;*

³*Faculty of Mechanical - Electrical and Computer Engineering, School of Technology, Van Lang University, Ho Chi Minh City, Vietnam*

^{*} *Corresponding author, Email: dmtriet@ctu.edu.vn*

Article history

Received: 01/6/2025; Received in revised form: 13/7/2025; Accepted: 22/7/2025

Abstract

This study presents the development and application of machine learning interatomic potentials based on neural networks for simulating two-dimensional materials, specifically monolayer Germanene, monolayer MoS₂, and the heterostructure Ge/MoS₂. Using first-principles molecular dynamics data, the ML models were trained via the DeePMD-kit framework to predict formation energies and atomic forces. The results demonstrate that machine learning can efficiently capture energy landscapes with high accuracy, even with limited training data. In contrast, predictions of moderately accurate atomic forces exhibit higher absolute errors, particularly affecting phonon calculations. Optimal neural network configurations were identified for each material system, enabling enhanced learning performance. This work confirms the potential of machine learning, particularly deep learning-based potentials, in accelerating thermodynamic modeling of 2D heterostructures with significantly reduced computational cost compared to traditional ab initio methods. Additionally, it underscores the need for more diverse datasets to enhance the reliability of force prediction in dynamical simulations.

Keywords: *Deep learning, machine learning, neural networks.*

1. Giới thiệu

Khoa học vật liệu đang bước vào kỷ nguyên mới nhờ tích hợp các phương pháp học máy (Machine Learning – ML), đặc biệt là các mô hình học sâu. Việc kết hợp mô hình ML đã cho thấy những đột phá trong việc khám phá và thiết kế vật liệu mới bằng cách khai thác dữ liệu lớn và mô hình hóa các mối quan hệ phi tuyến giữa cấu trúc và tính chất vật liệu. Thành công tiêu biểu cho sự kết hợp này là GNoME của Google DeepMind, sử dụng ML để dự đoán hơn 380.000 vật liệu mới, mở rộng đáng kể việc khai phá các vật liệu tiềm năng (Merchant & cs., 2023; Szymanski & cs., 2023). Gần đây, các mô hình mạng neuron đồ thị (Graph Neural Networks – GNNs) đã chứng minh hiệu quả vượt trội trong việc dự đoán tính chất của khung kim loại hữu cơ (Metal-Organic Frameworks – MOFs) với độ chính xác cao (Zhang & cs., 2023). Bên cạnh đó, các kỹ thuật như học chuyển tiếp và mô hình sinh (Generative Adversarial Networks – GANs) đang được áp dụng để thiết kế hợp kim entropy cao (High-Entropy Alloys – HEAs), một trong những thách thức lớn trong vật liệu học tính toán (Badini & cs., 2023; Saxena & cs., 2021). Gần đây, gói phần mềm DeePMD-kit được phát triển mạnh mẽ dùng để xây dựng và áp dụng mô hình học sâu cho các mô phỏng động lực học phân tử. DeePMD-kit cho phép tính toán các tính chất vật liệu như năng lượng, lực và các đại lượng khác với độ chính xác cao, hỗ trợ nghiên cứu vật liệu 2D và hệ dị cấu trúc (Zhang & cs., 2018).

Germanene 2D, vật liệu sở hữu cấu trúc mạng tinh thể lục giác tương tự graphene nhưng với tính chất điện tử đặc trưng như hiệu ứng spin – quỹ đạo mạnh và khả năng mở rộng độ rộng vùng cấm dưới tác động từ các yếu tố bên ngoài, làm cho nó trở thành vật liệu tiềm năng cho các lĩnh vực spintronics và điện tử (Coello-Fiallos & cs., 2017). Bên cạnh đó, molybdenum disulfide (MoS_2) là một vật liệu tiêu biểu trong nhóm vật liệu 2D chuyển tiếp kim loại – chalcogenides (Transition-metal dichalcogenide – TMDs) (Dang & cs., 2025; Tran & cs., 2022; van der Laan & cs., 2023), với độ rộng vùng cấm trực tiếp khoảng 1.8 eV ở dạng đơn lớp, phù hợp cho nghiên cứu chế tạo transistor và cảm biến quang (Rai & cs., 2020; Wang & cs., 2012). Việc kết hợp hai vật liệu này thành vật liệu dị cấu trúc dạng lớp đôi Germanene/ MoS_2 tạo nên hệ vật liệu có thể điều chỉnh linh hoạt tính chất điện tử, đồng thời nâng cao hiệu suất tách dòng điện tử – lỗ trống. Các tính toán lý thuyết gần đây xác nhận tính ổn định và khả năng điều chỉnh độ rộng vùng cấm của cấu trúc dị thể này, mở ra hướng phát triển vật liệu 2D đa chức năng thế hệ mới (Pang & cs., 2021).

Trong nghiên cứu này, chúng tôi phát triển mô hình học máy sử dụng gói phần mềm DeePMD-kit để ứng dụng vào vật liệu Germanene, MoS_2 và hệ dị cấu trúc Germanene/ MoS_2 (Ge/ MoS_2) 2D, dựa trên dữ liệu động lực học phân tử. Các mô hình được tối ưu hóa cấu trúc nhằm dự đoán năng lượng hình thành của các hệ khảo sát, một chỉ số quan trọng phản ánh độ ổn định nhiệt động của hệ. Các kết quả chính sẽ xác định cấu trúc mạng neuron tối ưu cho việc huấn luyện cho các mô hình, cụ thể chúng tôi tập trung vào số lượng neuron của mạng khớp (fitting) nhằm đạt được sự tối ưu về độ chính xác trong việc dự đoán lực và năng lượng. Mô hình tối ưu nhất sẽ được huấn luyện tăng cường để xác định đồ thị Phonon.

2. Phương pháp nghiên cứu

2.1. Descriptor và mạng neuron

Trong nghiên cứu sử dụng phương pháp mô tả nhúng hai đối tượng theo phương pháp

DeepPot-SE (two-body embedding DeepPot-SE descriptors). Theo đó cấu hình nguyên tử cục bộ sẽ được biểu diễn thông qua khoảng cách của hai nguyên tử, cụ thể giữa nguyên tử i và các nguyên tử j lân cận trong bán kính cắt (cutoff radius). Phương pháp ánh xạ này giúp bảo toàn các đối xứng xoay, tịnh tiến và hoán vị của hệ nguyên tử (Zhang, Han, Wang, Saidi & cs., 2018).

Môi trường cục bộ có thể được mô tả bằng ma trận $\mathcal{R}^i \in R^{N_i \times 3}$, trong đó N_i là số lượng nguyên tử trong bán kính cắt.

$$\mathcal{R}^i = \{r_{1i}^T, \dots, r_{ji}^T, \dots, r_{N_i i}^T\}^T, \quad r_{ji} = (x_{ji}, y_{ji}, z_{ji}).$$

Các đặc tính của môi trường nguyên tử cục bộ $\mathcal{R}^i$ cho mỗi nguyên tử sẽ được ánh xạ bằng mạng neuron vào giá trị năng lượng cục bộ E_i của nguyên tử đó, sau đó năng lượng toàn phần sẽ là tổng của tất cả các năng lượng cục bộ (Behler & cs., 2007)

$$E^w(\mathcal{R}) = \sum_i E^{w_{\alpha_i}}(\mathcal{R}^i) \equiv \sum_i E_i$$

Trong đó α_i đặc trưng loại nguyên tử i và w_{α_i} là mạng khớp năng lượng giống nhau cho mỗi loại nguyên tử. Trong quá trình huấn luyện các tham số của mạng khớp sẽ được điều chỉnh để đưa ra ánh xạ tốt nhất.

Lực tương tác có thể được xác định bằng ma trận $\mathcal{F}(\mathcal{R}) \equiv \mathcal{F} \in R^{N \times 3}$

$$\mathcal{F} = -\nabla_{\mathcal{R}} E \quad (F_{ij} = -\nabla_{R_{ij}} E)$$

Hàm lỗi được chúng tôi sử dụng được xây dựng trên sai số toàn phương trung bình (MSE) của giá trị năng lượng và lực (Zeng & cs., 2023)

$$L(p_e, p_f, \mathbf{w}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \sum_{l \in \mathcal{B}} p_e |E_l - E_l^w|^2 + p_f |\mathcal{F}_l - \mathcal{F}_l^w|^2$$

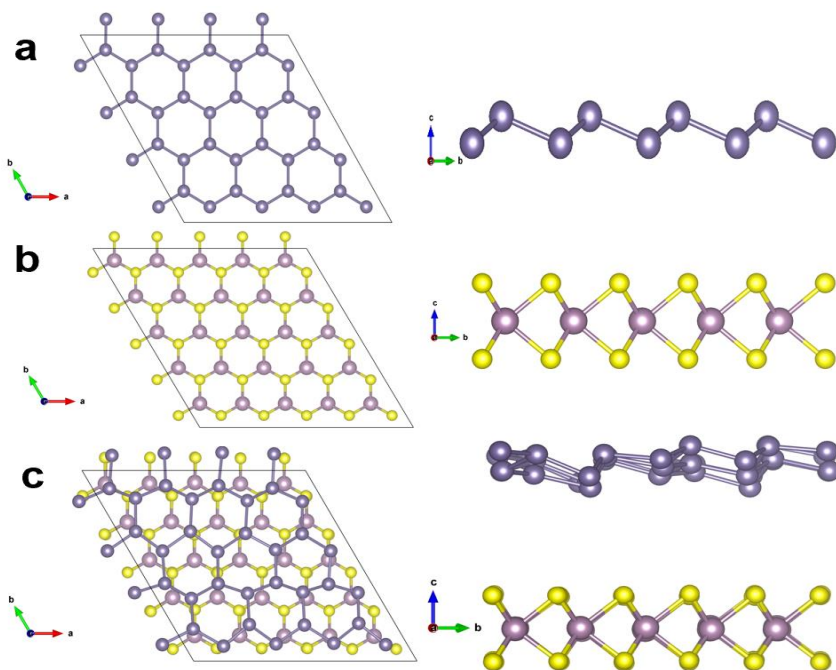
Trong đó p_e, p_f là trọng số của năng lượng và lực; $\mathcal{B}$ là kích thước batch. Khi huấn luyện các giá trị p_e được cài đặt tăng dần từ 0.02 đến 1 và p_f được cài đặt giảm dần từ 1000 đến 1.

2.2. Chuẩn bị dữ liệu và phương pháp huấn luyện

Ban đầu chúng tôi tạo hai mẫu vật liệu Germanene và MoS₂, và mẫu dị cấu trúc Germanene trên đế MoS₂ có số lượng nguyên tử lần lượt là 32, 75 và 107 (**Hình 1**). Các cấu trúc trước tiên được tối ưu bằng gói phần mềm Vienna Ab initio Simulation Package (VASP). Mẫu sau đó được sử dụng để chạy mô phỏng động lực học phân tử bằng phương pháp phiếm hàm mật độ. Mô phỏng sử dụng tập chính tắc NVT ở nhiệt độ 300K, 300 bước mô phỏng được thực hiện với bước thời gian là 3.0 fs.

Thông tin về cấu hình tọa độ nguyên tử và năng lượng được lưu trữ trong file OUTCAR, sẽ được dùng làm dữ liệu huấn luyện mô hình. Tập dữ liệu cho mỗi mẫu của chúng tôi gồm có 300 bước mô phỏng động lực học phân tử từ nguyên lý đầu tiên, 80% tức 240 frame sẽ được sử dụng làm tập huấn luyện và 20% còn lại tức 60 frame được dùng làm tập kiểm định

độc lập, độ chính xác của các mô hình về mặt dự đoán lực và năng lượng sẽ được đánh giá qua hệ số chính xác R^2 .



Hình 1. Góc nhìn từ trên xuống và cạnh bên của a) Germanene đơn lớp, b) MoS₂ đơn lớp và c) hệ dị chất Ge/MoS₂ sau tối ưu.

Quá trình huấn luyện được thực hiện theo phương pháp hold-out, đối với mỗi tập dữ liệu chúng tôi sẽ chọn ngẫu nhiên các frame theo tỉ lệ 80/20 lần lượt cho tập huấn luyện và kiểm định. Để giảm thiểu sự ngẫu nhiên của dữ liệu và dữ liệu bị hạn chế, với mỗi cấu hình neuron, quá trình huấn luyện sẽ được lặp lại 10 lần để lấy trung bình độ chính xác của lực (độ chính xác của lực của mỗi lần lại được lấy trung bình độ chính xác của ba hướng x, y và z) và năng lượng, riêng cấu trúc Ge/MoS₂ mỗi cấu hình neuron được lấy trung bình của 5 lần lặp.

Các cấu hình neuron của mạng fitting được chúng tôi sử dụng là [20,20,20]; [25,25,25]; [30,30,30]; [35,35,35]; ...; [60,60,60]; [65,65,65]; [70,70,70] tổng cộng là 11 cấu hình. Quá trình chọn lọc mô hình được đặt số bước huấn luyện ở 10.000 bước. Khi đã có cấu trúc mạng neuron tối ưu chúng tôi sẽ huấn luyện mô phỏng tăng cường ở 100.000 bước.

Số neuron của mạng descriptors là [5,10,20] cho cấu trúc Germanene và [10,20,40] cho các cấu trúc MoS₂ và Ge/MoS₂. Bán kính cắt (cutoff radius) được cài đặt bằng 6 Å. Việc cài đặt này giúp tính đến các tương tác tầm xa. Đặc biệt là tương tác Van der Waals giữa hai lớp Germanene và MoS₂ trong cấu trúc dị chất. Hàm kích hoạt là hàm tanh, tốc độ học được khởi tạo ở giá trị 0.001 giảm dần đến giá trị 3.51×10^{-8} . Kích thước batch được đặt auto.

Quá trình huấn luyện được thực hiện end-to-end bằng gói phần mềm DeepMD-kit (Zeng & cs., 2023) và được chạy trên môi trường Notebook Colab. Learning curve của quá trình huấn luyện được ghi nhận lại để đánh giá độ chưa khớp (underfitting) và quá khớp (overfitting). Sau khi huấn luyện quá trình kiểm định được thực hiện. Các mô hình huấn luyện đạt chất lượng

tốt nhất có thể được sử dụng như một bộ thể học máy. Các gói phần mềm LAMMPS và Phonopy được dùng để tìm đồ thị phonon (Thompson & cs., 2022; Togo & cs., 2023).

3. Kết quả và thảo luận

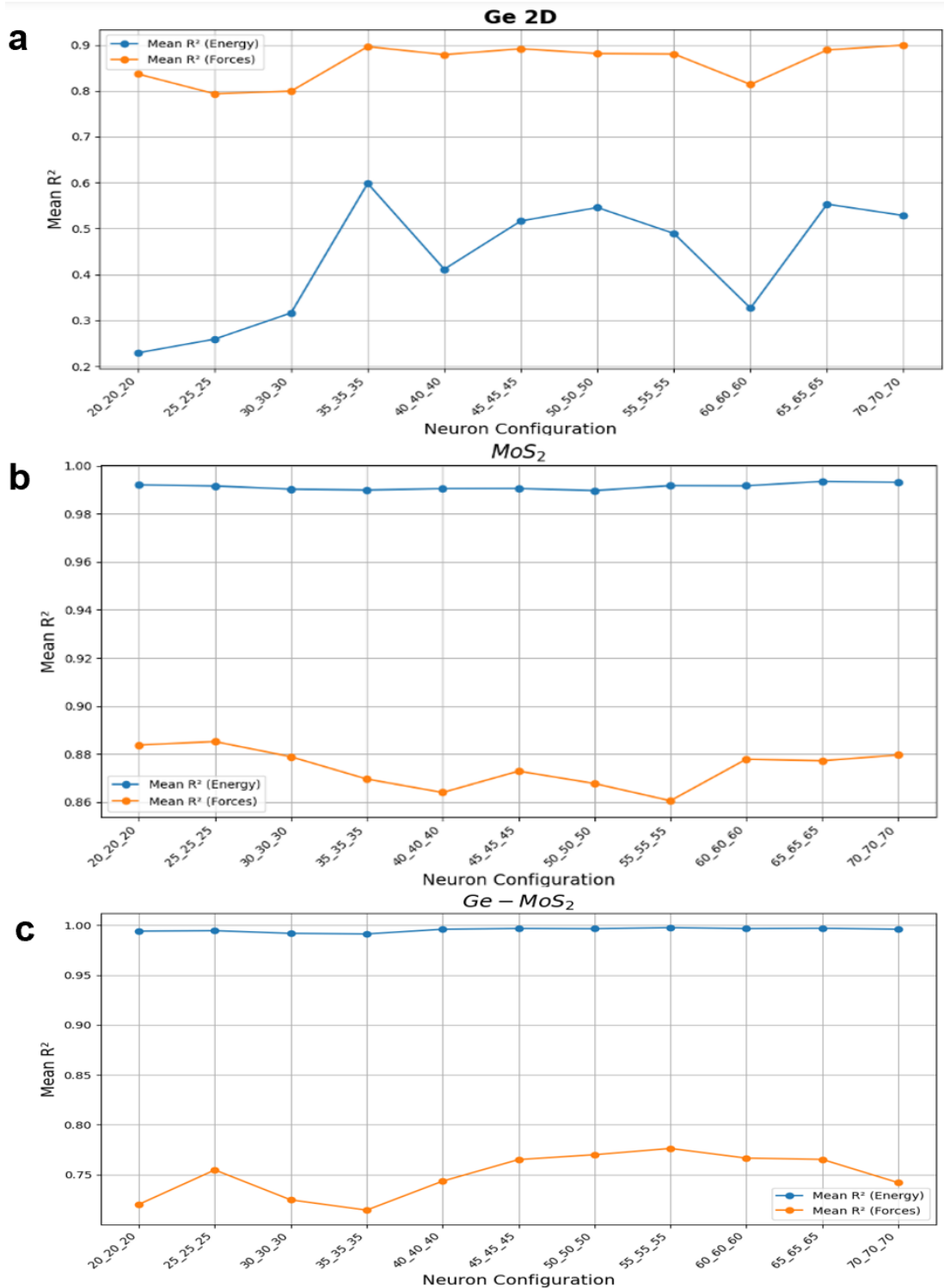
Quan sát biểu đồ về mối quan hệ của độ chính xác lực và năng lượng vào cấu trúc mạng khốp (**Hình 2**). Ta thấy đối với cấu trúc Germanene (**Hình 2a**) độ chính xác trung bình của lực ổn định với cấu trúc mạng fitting, ngược lại độ chính xác trung bình của năng lượng lại biến thiên theo cấu trúc mạng fitting. Các giá trị trung bình lực được học hiệu quả và nhanh chóng đạt được độ chính xác cao (0.8~0.9), trong khi đó với độ chính xác biến thiên lớn và thấp (0.2~0.6) ta thấy năng lượng chưa được học hiệu quả. Từ đồ thị ta thấy cấu hình neuron để đạt được độ chính xác tối ưu nhất là [35, 35, 35].

Đối với cấu trúc MoS₂ (**Hình 2b**) độ chính xác của năng lượng cao hơn và ổn định hơn so với lực. Mô hình học hiệu quả dữ liệu năng lượng với độ chính xác nhanh chóng đạt ở mức ~0.99, tuy nhiên độ chính xác từ dữ liệu lực thấp và kém ổn định hơn (biến thiên trong khoảng 0.86~0.89). Cấu hình neuron tối ưu nhất cho độ chính xác của lực và năng lượng là [25,25,25].

Đối với mô hình cho cấu trúc dị chất Ge/MoS₂ (**Hình 2c**), độ chính xác của năng lượng cao hơn và ổn định hơn so với lực. Mô hình học rất hiệu quả từ dữ liệu năng lượng với độ chính xác nhanh chóng đạt ~0.999, dữ liệu của năng lượng được học chậm hơn với độ chính xác biến thiên ở khoảng ~0.75. Cấu hình neuron tối ưu cho độ chính xác của lực và năng lượng là [55,55,55].

Các cấu hình neuron tối ưu cho các cấu trúc Germanene, MoS₂ và Ge/MoS₂ sẽ được huấn luyện ở 100.000 bước. Quá trình học tập của ba mẫu được ghi nhận lại trong đồ thị ở **Hình 3c**. Kết quả huấn luyện cho thấy các mô hình đều cho kết quả kiểm định ấn tượng. Điều này chứng các mô hình có khả năng học hiệu quả từ dữ liệu đầu vào, nếu sử dụng cấu trúc mạng neuron và các thông số hợp lý. Với độ chính xác (R^2) của về năng lượng và lực (trung bình theo 3 phương x, y, z) của mô hình cho cấu trúc Germanene là 0.902 và 0.965 (**Hình 3a, 3b**); cho cấu trúc MoS₂ là 0.999 và 0.987 (**Hình 4a, 4b**); cho cấu trúc Ge/MoS₂ là 0.999 và 0.941 (**Hình 5a, 5b**).

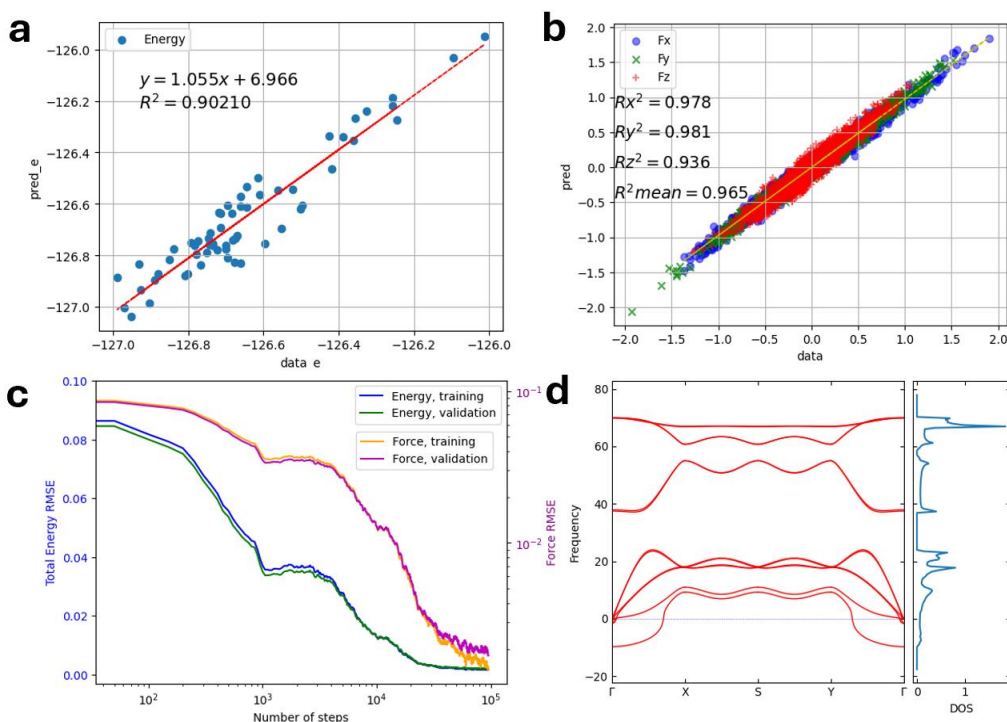
Quan sát đồ thị kiểm định năng lượng của cấu trúc Germanene (**Hình 3a**), tuy độ chính xác cho giá trị kiểm định của năng lượng là 0.902, giá trị này khá thấp khi so với hai cấu trúc còn lại ~ 0.999 (**Hình 4a, 5a**), tương ứng với sai số tuyệt đối vào khoảng 1.95meV (**Bảng 1**). Hơn nữa quan sát đồ thị learning curve (**Hình 3c**), giá trị của hàm lỗi cho năng lượng (đường xanh dương và xanh lá) đã bắt đầu đi ngang rất ổn định nhưng chưa bị quá khốp. Tuy nhiên quá trình học của lực cho thấy sự quá khốp nhẹ, khi đường màu tím cao hơn đường màu vàng, giá trị sai số tuyệt đối của lực cho ở khoảng 64.7 meV/ Å (**Bảng 1**). Điều này chứng tỏ, nếu tăng số bước huấn luyện thêm thì độ chính xác về năng lượng không tăng và độ chính xác về lực lại còn giảm. Điều này không bất ngờ khi ở quá trình chọn lọc mô hình, các mô hình cho cấu trúc Germanene thể hiện giá trị kiểm định năng lượng thấp hơn giá trị kiểm định lực (**Hình 2**). Hiện tượng này có thể đến từ bản chất dữ liệu năng lượng của cấu trúc Germanene. Quan sát đồ thị kiểm định lực của cấu trúc Germanene (**Hình 3b**), khả năng học của mô hình cũng khá tốt khi cho độ chính xác 0.965.



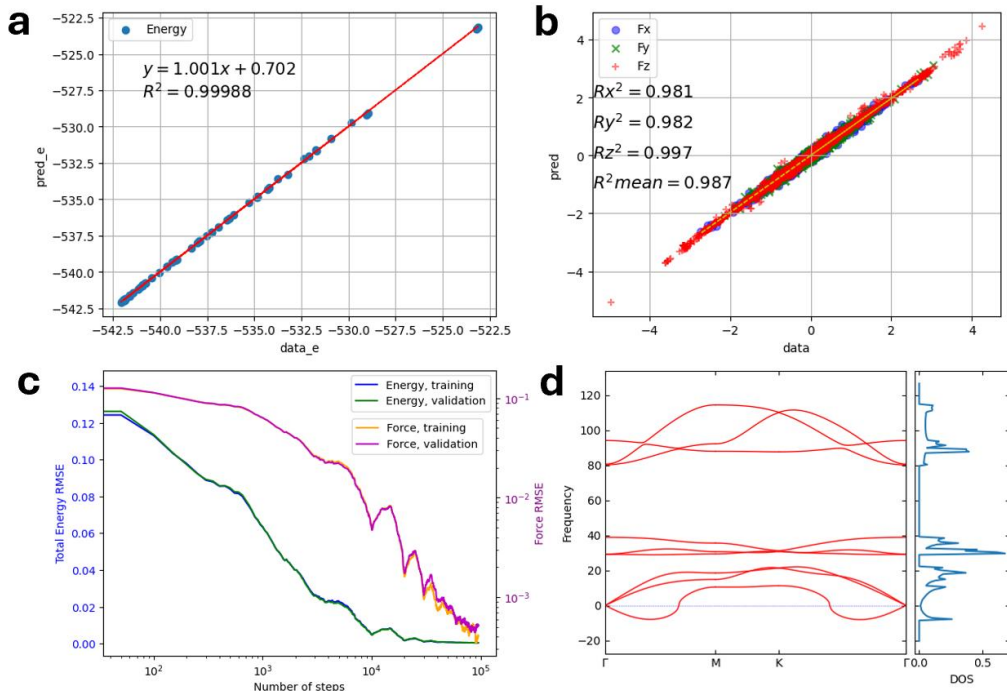
Hình 2. Sự phụ thuộc tương đối của độ chính xác của lực và năng lượng với các cấu hình mạng neuron của a) Germanene, b) MoS₂ và c) Ge/MoS₂.

Kết quả khả quan hơn ở hai cấu trúc MoS_2 và Ge/MoS_2 , giá trị kiểm định năng lượng của hai mẫu này cho thấy độ chính xác rất cao ~ 0.999 (Hình 4a, 5a) tương ứng với sai số tuyệt đối lần lượt là 0.486 meV và 0.543 meV (Bảng 1). Đồ thị learning curve (Hình 4c, 5c) cũng cho thấy hiệu suất học năng lượng đã đạt tối đa khi đường học đã ổn định và đi ngang (đường màu xanh dương và xanh lá). Độ chính xác cao của đồ thị năng lượng thể hiện khả năng học tốt về năng lượng ở hai mẫu này (Hình 2). Đối với giá trị kiểm định lực tuy đã đạt độ chính xác khá cao (0.987 cho MoS_2 và 0.941 cho Ge/MoS_2) nhưng đồ thị learning curve của hai mẫu vẫn còn đang giảm và chưa đi ngang (Hình 4c, 5c – đường màu tím và vàng) chứng tỏ quá trình học chưa đạt giá trị thống kê mong muốn. Quan sát đồ thị kiểm định lực hai cấu trúc MoS_2 và Ge/MoS_2 (Hình 4b, 5b) cho độ chính xác lần lượt là 0.987 và 0.941. Giá trị sai số tuyệt đối về lực của hai mô hình đạt 30.3 meV/Å và 35.2 meV/Å lần lượt cho cấu trúc MoS_2 và Ge/MoS_2 (Bảng 1) vẫn còn tương đối lớn.

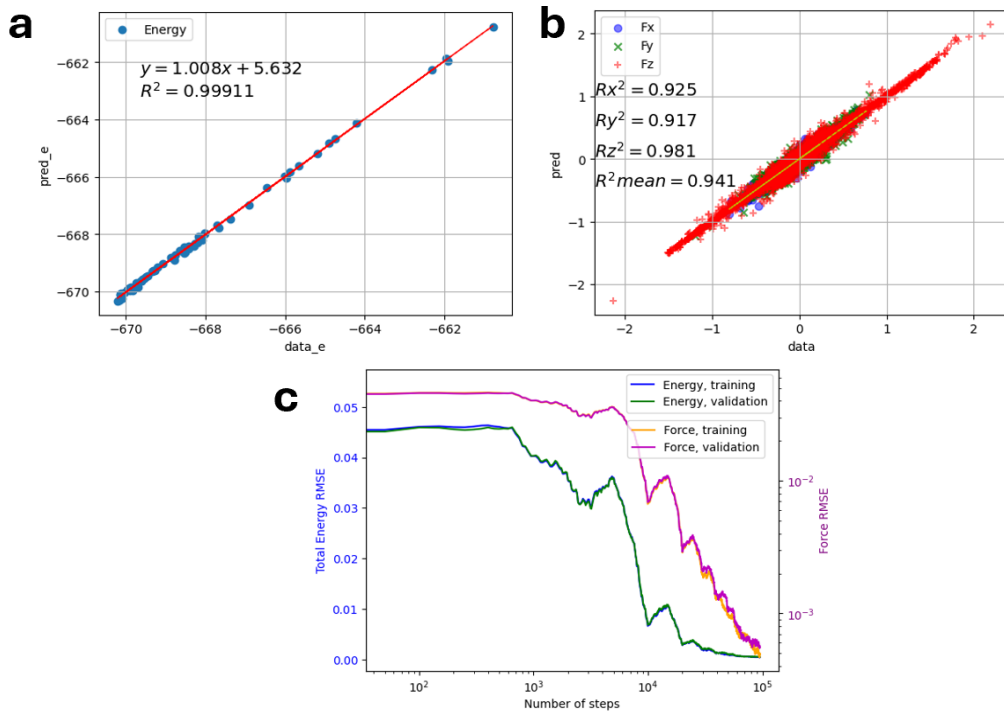
Hệ quả là quan sát đồ thị phonon của cấu trúc Germanene và MoS_2 (Hình 3d, 4d) ta thấy kết quả giá trị tần số phonon được tính từ bộ thể học máy xuất hiện các nhánh ảo, đồng thời sai lệch rất lớn so với các nghiên cứu tính trước đây (Jiang & cs., 2013; Peng & cs., 2016). Điều này cho thấy các dự đoán về độ lớn của lực của mô hình là chưa đáng tin cậy, gây ra sự sai lệch lớn trong giá trị phonon vốn được tính từ giá trị lực được dự đoán thông qua bộ thể học máy. Nguyên nhân có thể đến từ việc dữ liệu chưa được phong phú để mô hình có thể đưa các tính toán có ý nghĩa của lực.



Hình 3. Đồ thị kiểm định năng lượng (a); đồ thị kiểm định lực (b); đồ thị learning curve (c); đồ thị Band-dos phonon của Germanene (d)



Hình 4. Đồ thị kiểm định năng lượng (a); đồ thị kiểm định lực (b); đồ thị learning curve (c); đồ thị Band-dos phonon của MoS₂ (d)



Hình 5. Đồ thị kiểm định năng lượng (a); đồ thị kiểm định lực (b) và đồ thị learning curve (c) của Ge/MoS₂

Bảng 1. Sai số tuyệt đối trung bình (MAE) lực và năng lượng trên mỗi nguyên tử của các mô hình

	E (meV)	F (meV/ Å)
Germanene	1.95	64.7
MoS ₂	0.486	30.3
Ge/MoS ₂	0.543	35.2

4. Kết luận

Kết quả huấn luyện cho thấy các mô hình có độ chính xác về lực và năng lượng cao trên tập dữ liệu độc lập. Với cấu hình neuron tối ưu để huấn luyện các mô hình của các cấu trúc Germanene, MoS₂ và Ge/MoS₂ với khả năng học tốt từ dữ liệu DFT, phương pháp thể học máy cho thấy tiềm năng trong việc nghiên cứu các tính chất nhiệt động của vật liệu 2D với chi phí tính toán tối ưu hơn so với các phương pháp truyền thống. Các phương pháp học sâu đạt độ tin cậy cao hơn khi mô tả quá trình biến đổi của hệ về mặt năng lượng nhưng lại thể hiện sai số tương đối lớn khi cần dự đoán chính xác về lực. Để nâng cao khả năng dự đoán về lực cho các nhu cầu tính toán phonon hay mô phỏng động lực học phân tử ta cần phải có một tập dữ liệu phong phú hơn để có thể mô tả chính xác được gradient của mặt thể năng lượng.

Lời cảm ơn: Đề tài này được tài trợ bởi Trường Đại học Cần Thơ, Mã số: TSV2025-186.

Tài liệu tham khảo

- Badini, S., Regondi, S., & Pugliese, R. (2023). Unleashing the Power of Artificial Intelligence in Materials Design. *Materials*, 16(17), 5927. <https://doi.org/10.3390/ma16175927>
- Behler, J., & Parrinello, M. (2007). Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces. *Physical Review Letters*, 98(14), 146401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.146401>
- Coello-Fiallos, D., Tene, T., Guayllas, J. L., Haro, D., Haro, A., & Vacacela Gomez, C. (2017). DFT comparison of structural and electronic properties of graphene and germanene: monolayer and bilayer systems. *Materials Today: Proceedings*, 4(7), 6835–6841. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2017.07.011>
- Dang, M. T., Long, N. T., Thi Phung, V. B., Trang, N. T. B., Nguyen, T. A., Tran, T. N., Duy, N. V. A., Van, N. T., Nghia, N. Van, & Schall, P. (2025). Resolving adsorption mechanism of sodium polysulfides on Ti_{m+1}C_mO₂ MXenes for application in sodium-sulfur batteries: A first-principles study. *Applied Surface Science*, 687, 162210. <https://doi.org/10.1016/J.APSUSC.2024.162210>
- Jiang, J. W., Park, H. S., & Rabczuk, T. (2013). Molecular dynamics simulations of single-layer molybdenum disulphide (MoS₂): Stillinger-Weber parametrization, mechanical properties, and thermal conductivity. *Journal of Applied Physics*, 114(6). <https://doi.org/10.1063/1.4818414/372441>

- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 624(7990), 80–85. <https://doi.org/10.1038/S41586-023-06735-9>
- Pang, Q., Xin, H., Gao, D. li, Zhao, J., Chai, R. peng, & Song, Y. ling. (2021). Strain effect on the electronic and optical properties of Germanene/MoS2 heterobilayer. *Materials Today Communications*, 26, 101845. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101845>
- Peng, B., Zhang, H., Shao, H., Xu, Y., Ni, G., Zhang, R., & Zhu, H. (2016). Phonon transport properties of two-dimensional group-IV materials from ab initio calculations. *Physical Review B*, 94(24), 245420. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.94.245420/FIGURES/9/THUMBNAI>
- Rai, D. P., Vu, T. V., Laref, A., Joshi, H., & Patra, P. K. (2020). Promising optoelectronic response of 2D monolayer MoS2: A first principles study. *Chemical Physics*, 538, 110824. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2020.110824>
- Saxena, D., & Cao, J. (2021). Generative Adversarial Networks (GANs). *ACM Computing Surveys*, 54(3). <https://doi.org/10.1145/3446374>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K., Zeng, Y., & Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials. *Nature*, 624(7990), 86–91. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>
- Thompson, A. P., Aktulga, H. M., Berger, R., Bolintineanu, D. S., Brown, W. M., Crozier, P. S., in 't Veld, P. J., Kohlmeyer, A., Moore, S. G., Nguyen, T. D., Shan, R., Stevens, M. J., Tranchida, J., Trott, C., & Plimpton, S. J. (2022). LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*, 271, 108171. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
- Togo, A., Chaput, L., Tadano, T., & Tanaka, I. (2023). Implementation strategies in phonopy and phono3py. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 35(35), 353001. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/acd831>
- Tran, T. N., Dang, M. T., Tran, Q. H., Luong, T. T., & Dinh, V. A. (2022). Band valley modification under strain in monolayer WSe₂. *AIP Advances*, 12(11). <https://doi.org/10.1063/5.0127204/2819777>
- van der Laan, M., Heemskerk, E., Kienhuis, F., Diepeveen, N., Poonia, D., Kinge, S., Dang, M. T., Dinh, V. A., Siebbeles, L. D. A., Isaeva, A., van de Groep, J., & Schall, P. (2023). Stacking-Order-Dependent Excitonic Properties Reveal Interlayer Interactions in Bulk ReS₂. *ACS Photonics*, 10(9), 3115–3123. https://doi.org/10.1021/ACSPHOTONICS.3C00477/ASSET/IMAGES/LARGE/PH3C00477_0005.JPEG
- Wang, Q. H., Kalantar-Zadeh, K., Kis, A., Coleman, J. N., & Strano, M. S. (2012). Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Nature Nanotechnology*, 7(11), 699–712. <https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193>

- Zeng, J., Zhang, D., Lu, D., Mo, P., Li, Z., Chen, Y., Rynik, M., Huang, L., Li, Z., Shi, S., Wang, Y., Ye, H., Tuo, P., Yang, J., Ding, Y., Li, Y., Tisi, D., Zeng, Q., Bao, H., ... Wang, H. (2023). DeePMD-kit v2: A software package for deep potential models. *Journal of Chemical Physics*, 159(5), 54801. <https://doi.org/10.1063/5.0155600>
- Zhang, L., Han, J., Wang, H., Car, R., & Weinan, E. (2018). Deep Potential Molecular Dynamics: A Scalable Model with the Accuracy of Quantum Mechanics. *Physical Review Letters*, 120(14), 143001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.143001>
- Zhang, L., Han, J., Wang, H., Saidi, W., Car, R., & E, W. (2018). End-to-end Symmetry Preserving Inter-atomic Potential Energy Model for Finite and Extended Systems. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 31.
- Zhang, Z. (2023). Automated Graph Neural Networks Accelerate the Screening of Optoelectronic Properties of Metal-Organic Frameworks. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 14(5), 1239–1245. <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.3c00187>