Title	**Simulation Study of How Stretching Affects the Structural Properties of Monolayer SiC**
Supervisor	Dr. Safia Alharbi Dr. Hanan Akhdar
Students	Heba Al-Askar Aldanah Alotaibi
Abstract	This study presents a detailed first-principles investigation of the structural response of monolayer silicon carbide (SiC) to mechanical strain, motivated by the material's exceptional mechanical strength, thermal stability, and semiconducting characteristics that make it a promising candidate for next-generation nano-electronic and optoelectronic technologies. The pristine monolayer SiC, composed of alternating silicon and carbon atoms arranged in a planar hexagonal lattice, was fully optimized using Density Functional Theory (DFT) within the Quantum ESPRESSO framework. Calculations employed PAW pseudopotentials from the PSL library and the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) Generalized Gradient Approximation (GGA), with a 10×10×1 Monkhorst–Pack k-point mesh, an 80 Ry plane-wave cutoff, and strict convergence criteria. Structural relaxation yielded an equilibrium lattice constant of 3.0969 Å and a bond length of 1.787 Å, confirming the planar and mechanically stable nature of the monolayer. To explore strain engineering, biaxial strains ranging from −7% to +7% were systematically applied while maintaining the hexagonal symmetry. The resulting energy–strain curve exhibited a characteristic parabolic profile, with the minimum total energy (−65.0725 Ry) occurring at zero strain, validating the pristine configuration as the most stable state. Tensile strain increased Si–C bond lengths and gradually weakened covalent interactions, producing an upward shift in total energy while maintaining structural integrity. Conversely, compressive strain shortened the bonds, enhanced orbital overlap, and sharply increased total energy due to stronger repulsive forces, indicating reduced stability under high compression. Within the full ±7% range, the monolayer remained planar and free from structural distortions, demonstrating robust elasticity. Overall, the findings highlight the effectiveness of strain as a non-destructive tool for tuning the structural characteristics of monolayer SiC and establishing a reliable computational framework for strain-dependent studies in two-dimensional materials. These insights support the potential of SiC for applications in flexible nanoelectronics, optoelectronics, and strain-engineered devices, and lay the groundwork for future investigations into its electronic, vibrational, and thermal properties.

الملخص باللغة العربية

تُقدم هذه الدراسة بحثًا مفصلاً، من حيث المبادئ الأولية، للاستجابة الهيكلية لكربيد السيليكون أحادي الطبقة (SiC) للإجهاد الميكانيكي، مستوحىً من قوته الميكانيكية الاستثنائية، واستقراره الحراري، وخصائصه شبه الموصلة التي تجعله مرشحًا واعدًا لتقنيات الجيل التالي من النانو الإلكترونية والبصرية. تم تحسين كربيد السيليكون أحادي الطبقة النقي، المكون من ذرات سيليكون وكربون متناوبة مرتبة في شبكة سداسية مستوية، بشكل كامل باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) ضمن إطار عمل Quantum ESPRESSO. استخدمت الحسابات جهد PAW الزائفة من مكتبة PSL وتقريب التدرج المعمم لبيرديو-بيرك-إرنزرهوف(GGA) (PBE) ، مع شبكة مونخورست-باك1×10×10 k-point ، ونقطة قطع موجة مستوية 80 راي، ومعايير تقارب صارمة. أدى الاسترخاء الهيكلي إلى ثابت شبكية متوازن قدره 3.0969 Å وطول رابطة قدره 1.787Å ، مما يؤكد الطبيعة المستوية والمستقرة ميكانيكيًا للطبقة الأحادية.

لاستكشاف هندسة الاجهاد، طُبق جهد ثنائي المحور يتراوح من -7% إلى +7% بشكل منهجي مع الحفاظ على التناظر السداسي. أظهر منحنى الطاقة-الاجهاد الناتج نمطًا مكافئًا مميزًا، مع حدوث الحد الأدنى من الطاقة الكلية (-65.0725 Ry) عند اجهاد صفري، مما يؤكد صحة التكوين الأصلي كأكثر حالة استقرار. زاد اجهاد الشد من أطوال روابط Si-C وأضعف التفاعلات التساهمية تدريجيًا، مما أدى إلى تحول تصاعدي في الطاقة الكلية مع الحفاظ على السلامة الهيكلية. على العكس من ذلك، أدى الاجهاد الانضغاطي إلى تقصير الروابط، وتعزيز التداخل المداري، وزيادة حادة في الطاقة الكلية بسبب قوى التنافر الأقوى، مما يشير إلى انخفاض الاستقرار تحت ضغط عالٍ. ضمن نطاق ±7% الكامل، ظلت الطبقة الأحادية مستوية وخالية من التشوهات الهيكلية، مما يُظهر مرونة قوية.

بشكل عام، تُبرز النتائج فعالية الاجهاد كأداة غير مُدمرة لضبط الخصائص الهيكلية لكربيد السيليكون أحادي الطبقة، ولإنشاء إطار حسابي موثوق للدراسات المعتمدة على الانفعال في المواد ثنائية الأبعاد. تدعم هذه الرؤى إمكانات كربيد السيليكون في تطبيقات الإلكترونيات النانوية المرنة، والإلكترونيات البصرية، والأجهزة المُهندسة بالانفعال، وتُمهّد الطريق لدراسات مستقبلية في خصائصه الإلكترونية والاهتزازية والحرارية.