

DOI:10.22144/ctu.jvn.2022.010

## NGHIÊN CỨU ĐẶC TÍNH ĐIỆN TỬ VÀ PHỔ HẤP THỤ CỦA CHẤM LƯỢNG TỬ PENTA-GRAPHENE

Phạm Thị Bích Thảo\*, Nguyễn Thị Tường Vy, Huỳnh Nhật Hào và Trần Minh Luân  
 Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

\*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Phạm Thị Bích Thảo (email: ptbthao@ctu.edu.vn)

### Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 12/09/2021

Ngày nhận bài sửa: 12/11/2021

Ngày duyệt đăng: 26/02/2022

### Title:

Study of electronic and optical properties of the penta-graphene quantum dots

### Từ khóa:

Chấm lượng tử penta-graphene, đặc tính điện tử, lý thuyết nhiễu loạn mật độ, tính chất quang

### Keywords:

Absorption spectra, Density functional theory, electronic properties, penta-graphene quantum dots

### ABSTRACT

In this study, electronic and optical properties of the penta-graphene quantum dots with different sizes or doping by boron (B), nitrogen (N), boron – nitrogen (BN) at various positions are systematically investigated by using the density functional theory in combination with the non-equilibrium Green's function formalism. Specifically, band structure, density of states, and absorption spectra of all samples are studied in detail. The result shows that electronic and optical properties of the penta-graphene quantum dots not only depend on quantum dot sizes but also dopants. The diversity of electronic and optical properties of the studied samples demonstrates the penta-graphene quantum dots as an excellent candidate for developing electro-optic device.

### TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, đặc tính điện tử và tính chất quang của chấm lượng tử penta-graphene với kích thước khác nhau hoặc được pha tạp boron (B), nitrogen (N) và đồng pha tạp boron - nitrogen (BN) tại các vị trí khác nhau được khảo sát một cách có hệ thống bằng cách sử dụng lý thuyết nhiễu loạn mật độ và hàm Green không cân bằng. Cụ thể, cấu trúc vùng, mật độ trạng thái, phổ hấp thụ của tất cả mẫu được nghiên cứu một cách chi tiết. Kết quả cho thấy đặc tính điện tử và tính chất quang của chấm lượng tử penta-graphene không những phụ thuộc vào kích thước mà còn phụ thuộc vào loại nguyên tố và vị trí pha tạp. Sự đa dạng về đặc tính điện tử và tính chất quang của các mẫu nghiên cứu cho thấy chấm lượng tử penta-graphene là một ứng viên sáng giá cho sự phát triển các thiết bị quang điện tử.

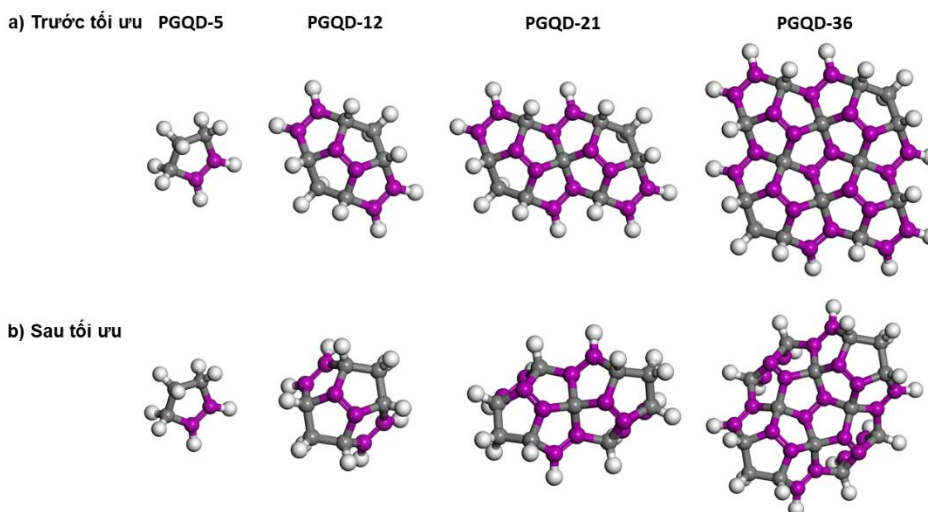
### 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Ngày nay, vật liệu cấu trúc nano là một trong những vật liệu chính được sử dụng trong thiết kế cảm biến điện hóa và sinh học (Schedin et al., 2007; Myung et al., 2012). Việc phát triển các vật liệu cấu trúc nano với mục tiêu giảm kích thước và tăng hiệu suất linh kiện luôn là vấn đề được quan tâm. Trong số những dạng vật liệu đã được phát triển, carbon và các dạng thù hình của chúng đóng một vai trò quan

trọng. Năm 2004, việc chế tạo graphene từ đơn lớp graphite được thực hiện thành công bởi Novoselov và Geim (Novoselov, 2004; Novosolov et al., 2005). Hai nhà khoa học làm việc tại đại học Manchester với giải thưởng Nobel Vật lý cho công trình trên. Công trình này đã mở ra một bước phát triển mới cho ngành khoa học vật liệu và nhiều hoạt động nghiên cứu đối với vật liệu này vẫn đang được tiếp tục một cách mạnh mẽ trên thế giới cho đến thời điểm hiện tại. Mặc dù có nhiều ứng dụng khác nhau,

graphene là một dạng vật liệu hai chiều không có độ rộng vùng cấm (Abdelati et al., 2021). Vì vậy, để có thể ứng dụng trong các thiết bị quang điện tử, việc nghiên cứu graphene được mở rộng cho các dạng cấu trúc khác nhau để tìm kiếm những đặc tính điện tử và quang học mới. Cụ thể, các nghiên cứu về cấu trúc và tính chất được thực hiện trên vật liệu graphene hai chiều có sai hỏng (khuyết), thay đổi sự tôỉ hóa biên, được pha tạp, ... (Banhart et al., 2011; Weerasinghe et al., 2018; Kaykılarlı et al., 2020). Cấu trúc graphene một chiều cũng thu hút được nhiều sự quan tâm với các nghiên cứu tương ứng với vật liệu graphen hai chiều (Kang et al., 2019; Narin et al., 2019; Rui et al., 2021). Gần đây, các nghiên cứu lý thuyết cho thấy chấm lượng tử graphene có thể được ứng dụng rộng rãi trong lĩnh vực quang điện tử và điện hóa (Hosseini et al., 2015; Kermani et al., 2017; Mehrzad-Samarin et al., 2017; Salehnia et al., 2017; Sohal et al., 2021). Như một cấu trúc không chiều, chấm lượng tử graphene bền về mặt hóa học và sở hữu hiệu ứng giam cầm lượng tử. Sự thay đổi độ rộng vùng cấm trong chấm lượng tử graphene có thể được thực hiện khi thay đổi kích thước, tôỉ hóa biên, ... (Sohal et al., 2021). Đặc tính này mở rộng những ứng dụng của chấm lượng tử graphene trong các linh kiện quang điện tử. Thêm vào đó, việc chế tạo thành công chấm lượng tử graphene trong thực nghiệm bằng nhiều phương pháp và vật liệu nền khác nhau đã tạo động lực phát triển cho vật liệu chấm lượng tử tương tự graphene (Sohal et al., 2021).

Năm 2015, vật liệu penta-graphene, một dạng thù hình mới nhất của carbon được tìm thấy với một số tính chất điện, nhiệt và quang độc đáo đã và đang thu hút được nhiều sự quan tâm (Shunhong et al., 2015). Khác với graphene, penta-graphene có độ rộng vùng cấm khoảng 3,25 eV và chứa cả hai loại lai hóa  $sp^2$  và  $sp^3$ . Các nghiên cứu trong và ngoài nước về cấu trúc và tính chất của vật liệu penta-graphene được thực hiện cho cấu trúc hai chiều và một chiều bằng cách thay đổi độ rộng chuỗi, pha tạp, sai hỏng, thay đổi tôỉ hóa biên, ... cho thấy sự đa dạng trong đặc tính điện tử và tính chất vận chuyển của cấu trúc này (Shahrokhi, 2017; Tien et al., 2019; Dos Santos et al., 2020; Tien et al., 2020). Hiện nay, các cấu trúc penta thể hệ tiếp theo như penta-CN<sub>2</sub> (pCN<sub>2</sub>), penta-CB<sub>2</sub> (pCB<sub>2</sub>), penta-SiC<sub>2</sub> (pSiC<sub>2</sub>), penta-SiN<sub>2</sub> (pSiN<sub>2</sub>) đang được các nhóm nghiên cứu lý thuyết khảo sát đặc tính điện tử, tập trung vào cấu trúc hai chiều và một chiều (Liu et al., 2016; Kumar et al., 2021) và sự thành công trong việc tổng hợp vật liệu penta PdSe<sub>2</sub> (Kuklin et al., 2020) đã mở ra những hướng phát triển mới cho nhóm vật liệu penta. Trong nghiên cứu này, đặc tính điện tử và tính chất quang của chấm lượng tử penta-graphene được thay đổi kích thước và pha tạp B, N hoặc đồng pha tạp BN được khảo sát. Kết quả thu được cho thấy độ rộng vùng cấm của chấm lượng tử penta-graphene thay đổi theo kích thước. Thêm vào đó, sự đa dạng về tính điện tử và tính chất quang của chấm lượng tử penta-graphene phụ thuộc vào nguyên tố và vị trí tạp đã được thu nhận.



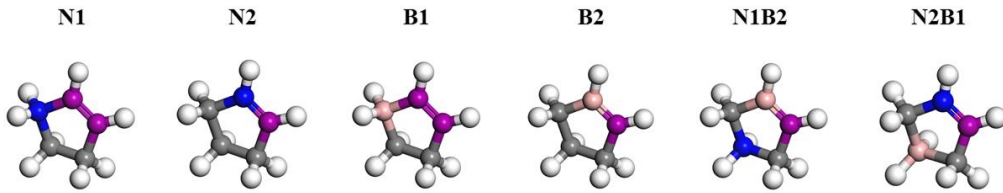
**Hình 1. Cấu trúc của các chấm lượng tử penta-graphene với kích thước thay đổi**

(Hình cầu màu xám và màu tím lần lượt tương ứng với các nguyên tử carbon lai hóa  $sp^3$  và  $sp^2$ . Hình cầu màu trắng tương ứng với nguyên tố hydro.)

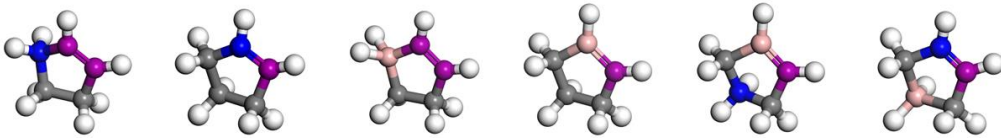
**2. THIẾT LẬP MÔ HÌNH VÀ TÍNH TOÁN**

Từ cấu trúc penta-graphene 2D, chấm lượng tử penta-graphene (PGQDs) với bốn kích thước khác nhau (PGQD-5, PGQD-12, PGQD-21 và PGQD-36) được tạo thành. Tiếp theo, các cấu trúc này được tối ưu qua phần mềm CASTEP bằng phương pháp DFT sử dụng gần đúng gradient tổng quát của Perdew Burkner Ernzerhof (PBE) với điều kiện: k-point 1x1x3 và cutoff energy 600 eV. Trong cấu trúc đã tối ưu, cấu trúc PGQD-5 được pha tạp lần lượt

a) Trước tối ưu



b) Sau tối ưu



**Hình 2. Cấu trúc của các mẫu PGQD-5 được pha tạp N, B và đồng pha tạp BN**

(Hình cầu màu xám và màu tím lần lượt tương ứng với các nguyên tử carbon lai hóa  $sp^3$  và  $sp^2$ . Hình cầu màu trắng, màu xanh dương và màu da lần lượt là nguyên tử hydro, nitrogen và boron.)

Tính chất quang của vật liệu được xác định thông qua hàm phức điện môi (Singh et al., 2016):

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega), \tag{1}$$

với  $\varepsilon_1(\omega)$ ,  $\varepsilon_2(\omega)$  là phần thực và phần ảo của hàm điện môi.

Sự liên hệ giữa hàm điện môi và hàm đáp ứng được thể hiện qua phương trình:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \chi(\omega), \tag{2}$$

trong phương trình  $\omega$  là tần số photon ánh sáng tới. Hàm  $\chi(\omega)$  được xác định bởi hệ thức Kubo-Greenwood (Monshi et al., 2018). Từ việc xác định hàm điện môi, chúng ta có thể xác định hệ số tắt dần, từ đó xác định hệ số hấp thụ của vật liệu qua các phương trình sau:

$$\kappa = \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2}{2}} - \frac{\varepsilon_1}{2}, \tag{3}$$

các nguyên tố nhóm III: nitrogen (N), boron (B) hoặc đồng pha tạp nitrogen, boron (NB) tại vị trí carbon lai hóa  $sp^3$  và  $sp^2$  với ký hiệu tương ứng như Hình 2, lần lượt là: N1, N2, B1, B2, N1B2 và N2B1. Sáu cấu trúc trên được tối ưu với cùng điều kiện như cấu trúc PGQD-5. Tất cả các cấu trúc khảo sát được thụ động hóa biên bằng hydro. Để tránh tương tác giữa các “ảnh” của cấu trúc, vùng chân không 15 Å được áp vào theo ba phương x, y, z của các mẫu nghiên cứu.

$$\alpha = \frac{2\omega\kappa}{c}, \tag{4}$$

với  $c$  là vận tốc ánh sáng trong chân không.

**3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN**

**3.1. Đặc tính điện tử**

Để khảo sát sự bền vững của các cấu trúc, năng lượng liên kết  $E_B$  của các mẫu nghiên cứu được xác định theo công thức sau (Yuan et al., 2017):

$$E_B = \frac{(E_{total} - n_C E_C - n_H E_H - n_X E_X)}{n_C + n_H + n_X} \tag{7}$$

với  $E_{total}$  là năng lượng tổng cho mỗi chấm lượng tử đang xét;  $E_C$ ,  $E_H$  và  $E_X$  lần lượt là năng lượng của các nguyên tử C, H và X (B, N);  $n_C$ ,  $n_H$  và  $n_X$  lần lượt là số nguyên tử C, H và X tương ứng.

Kết quả tính số cho thấy năng lượng liên kết của PGQD-5, PGQD-12, PGQD-21 và PGQD-36 lần lượt là -5,879 eV, -6,481 eV, -6,831 eV và -7,216

eV. Đối với các mẫu PGQD-5 được pha tạp B, N hoặc đồng pha tạp BN, giá trị này lần lượt như sau -5,93 eV, -5,99 eV, -6,5 eV, -6,59 eV, -6,90 eV và -7,20 eV tương ứng các mẫu N1, N2, B1, B2, N1B2 và N2B1. Từ các giá trị trên, có thể thấy rõ, khi kích thước của chấm lượng tử tăng thì năng lượng liên kết giảm và PGQD-36 là cấu trúc ổn định nhất về mặt nhiệt động học với năng lượng liên kết xấp xỉ -7,20 eV. Đối với các chấm lượng tử được pha tạp B và N, năng lượng liên kết ở các mẫu pha tạp tại hai vị trí tương ứng carbon có lai hóa  $sp^2$  và  $sp^3$  có sự khác biệt không đáng kể. Các mẫu chấm lượng tử đồng pha tạp N1B2 và N2B1 thể hiện sự ổn định hơn so với các mẫu pha tạp đơn.

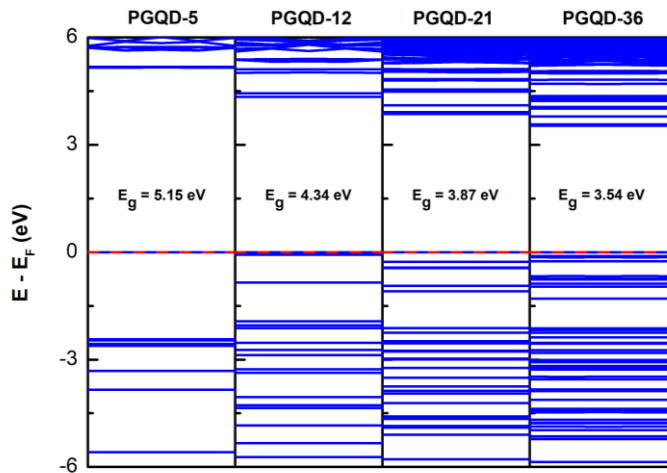
Bảng 1 cung cấp thông số về độ dài liên kết trung bình của từng loại liên kết trong mẫu. Cụ thể, độ dài trung bình của từng loại liên kết được xác định bằng trung bình cộng của tất cả các liên kết đó trong mẫu. Độ dài liên kết trung bình giữa hai carbon có lai hóa  $sp^2$ , giữa hai carbon có lai hóa  $sp^3$ , giữa carbon có lai hóa  $sp^2$  và  $sp^3$ , giữa carbon có lai hóa  $sp^2$  và hydro ở biên, giữa carbon có lai hóa  $sp^3$  và hydro ở biên trước và sau tối ưu được ký hiệu lần lượt là  $sp^2-sp^2$ ,  $sp^3-sp^3$ ,  $sp^2-sp^3$ ,  $sp^2$ -biên và  $sp^3$ -biên. Có thể nhận thấy, độ dài liên kết trung bình của  $sp^2-sp^3$  và  $sp^2$ -biên có sự thay đổi đáng kể so với các độ dài trung bình còn lại khi kích thước chấm lượng tử thay đổi.

**Bảng 1. Độ dài liên kết trung bình của các chấm lượng tử penta-graphene có kích thước thay đổi (tính bằng đơn vị Å)**

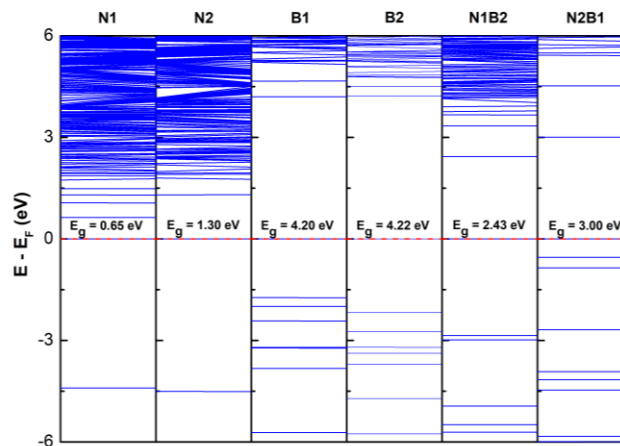
Mẫu	PGQD-5	PGQD-12	PGQD-21	PGQD-36
<b>Liên kết</b>				
<b>Trước tối ưu</b>				
sp2-sp2	1,350	1,346	1,346	1,346
sp2-sp3	1,556	1,548	1,547	1,541
sp3-sp3	1,539	1,552	1,552	1,542
sp2-biên	1,140	1,140	1,140	1,140
sp3-biên	1,140	1,140	1,140	1,140
<b>Sau tối ưu</b>				
sp2-sp2	1,339	1,342	1,345	1,346
sp2-sp3	1,511	1,503	1,527	1,500
sp3-sp3	1,555	1,569	1,566	1,583
sp2-biên	1,091	1,092	1,092	1,091
sp3-biên	1,102	1,102	1,103	1,103

**Bảng 2. Độ dài liên kết trung bình của các mẫu PGQD-5 được pha tạp N, B hoặc đồng pha tạp BN (tính bằng đơn vị Å)**

Mẫu	N1	N2	B1	B2	N1B2	N2B1
<b>Liên kết</b>						
<b>Trước tối ưu</b>						
sp2-sp2	1,346	1,346	1,346	1,346	1,346	1,346
sp2-sp3	1,539	1,539	1,539	1,539	1,539	1,539
sp3-sp3	1,543	1,543	1,543	1,543	1,543	1,543
sp2-biên	1,558	1,558	1,558	1,558	1,558	1,558
sp3-biên	1,553	1,553	1,553	1,553	1,553	1,553
<b>Sau tối ưu</b>						
sp2-sp2	1,390	1,378	1,527	1,457	1,302	1,390
sp2-sp3	1,479	1,514	1,5285	1,555	1,4695	1,479
sp3-sp3	1,547	1,575	1,547	1,527	1,677	1,548
sp2-biên	1,053	1,098	1,150	1,147	1,060	1,053
sp3-biên	1,102	1,160	1,109	1,081	1,142	1,103



Hình 3. Cấu trúc vùng của các chấm lượng tử penta-graphene với kích thước thay đổi

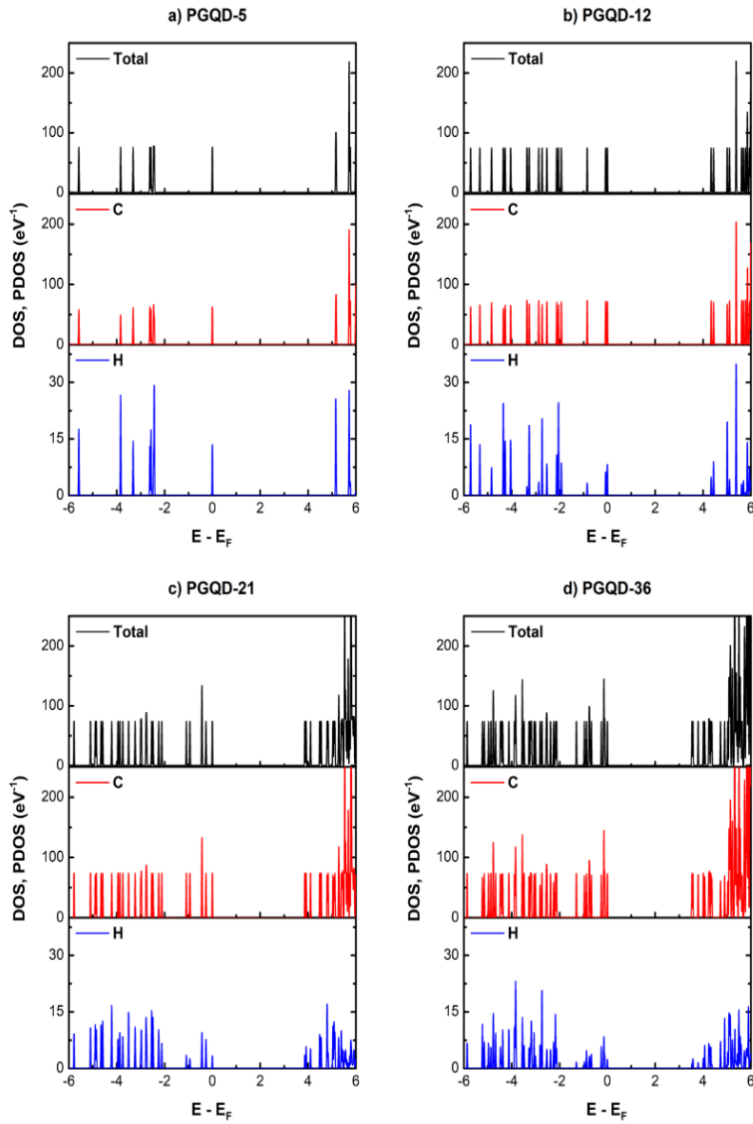


Hình 4. Cấu trúc vùng của các mẫu PGQD-5 được pha tạp N, B và đồng pha tạp BN

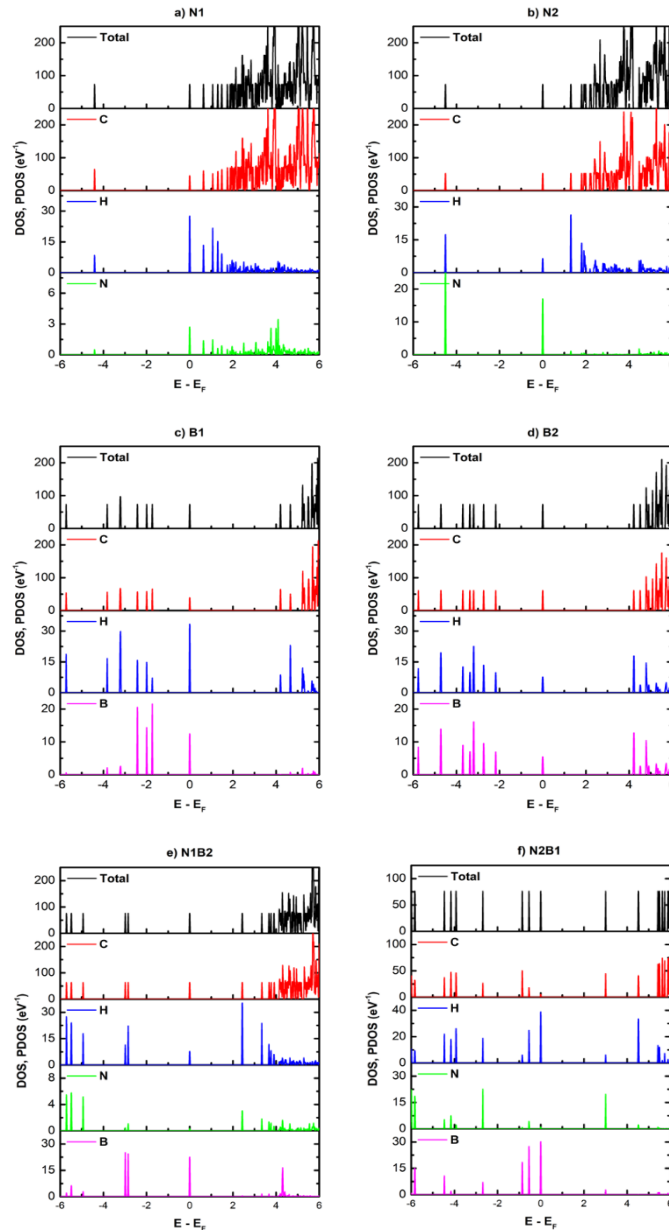
Ảnh hưởng của nguyên tố tạp và vị trí tạp lên cấu trúc vùng của PGQD-5 được trình bày trong Hình 4. Chúng ta có thể quan sát được sự khác biệt rõ rệt về độ rộng vùng cấm cũng như số trạng thái quanh mức Fermi. Cụ thể, ở hai mẫu PGQD-5 được pha tạp N (N1, N2), độ rộng vùng cấm khi pha tạp ở vị trí carbon  $sp^2$  lớn hơn khi pha tạp ở vị trí carbon. Tuy nhiên, ở hai mẫu pha tạp B (B1 và B2), độ rộng vùng cấm lại gần như tương đồng. Việc đồng pha tạp N và B, làm cho độ rộng vùng cấm xấp xỉ giá trị trung bình cộng của độ rộng vùng cấm khi pha tạp đơn. Điều này được dự đoán do nguyên tố B thuộc nhóm III trong khi nguyên tố N lại thuộc nhóm V. Do đó, khi đồng pha tạp với lượng nguyên tử tương ứng vào PGQDs sẽ thu được giá trị khe năng lượng như kết quả khảo sát. Ngoài ra, đồ thị mật độ trạng thái tổng và mật độ trạng thái riêng của các mẫu ở Hình 5 và

Hình 6 cũng góp phần lý giải hình ảnh cấu trúc vùng. Đồ thị Hình 6 cho thấy khi thay đổi vị trí pha tạp, sự đóng góp của N và B khác nhau dẫn đến sự khác biệt trong cấu trúc vùng ở các mẫu N1, N2, B1 và B2. Đối với cấu trúc của hai mẫu đồng pha tạp N1B2 và N2B1, sự đóng góp của B vào các mức trạng thái quanh mức Fermi luôn vượt trội hơn so với sự đóng góp của N.

Như vậy, kết quả khảo sát cho thấy kích thước, loại nguyên tố pha tạp và vị trí tạp đều có ảnh hưởng đến cấu trúc vùng của PGQDs. Những ảnh hưởng này được làm rõ thêm ở các đồ thị mật độ trạng thái tổng và mật độ trạng thái riêng. Việc thay đổi đặc tính điện tử này được dự đoán sẽ ảnh hưởng lên tính chất vận chuyển và tính chất quang của vật liệu.



**Hình 5. Mật độ trạng thái tổng (DOS) và mật độ trạng thái riêng (PDOS) của các chấm lượng tử penta-graphene có kích thước thay đổi**

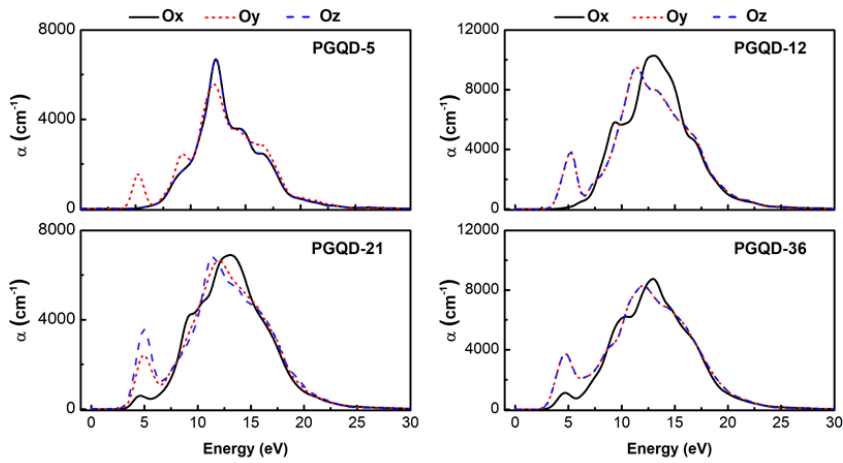


**Hình 6. Mật độ trạng thái tổng (DOS) và mật độ trạng thái riêng (PDOS) của các mẫu PGQD-5 được pha tạp N (a, b), B (c, d) và đồng pha tạp BN (e, f)**

### 3.2. Phổ hấp thụ

Phổ hấp thụ của các chấm lượng tử penta-graphene có kích thước thay đổi được mô tả trong Hình 7. Kết quả tính số cho thấy tất cả các chấm lượng tử được khảo sát đỉnh hấp thụ mạnh nằm trong khoảng 12,5 eV. Tất cả các chấm lượng tử trên cũng xuất hiện đỉnh hấp thụ khởi phát tương ứng với năng lượng xấp xỉ 5 eV. Tuy nhiên, đỉnh hấp thụ khởi phát

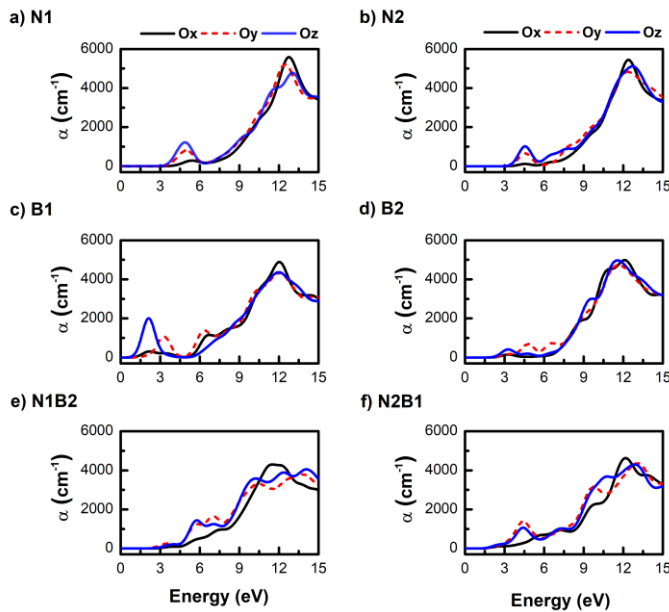
này lại không xuất hiện trên cùng một phương. Cụ thể, ở mẫu PGQD-5, đỉnh hấp thụ khởi phát chỉ quan sát được theo phương  $Oy$ ; ở mẫu PGQD-12, đỉnh hấp thụ khởi phát lại xuất hiện trên hai phương  $Oy$  và  $Oz$ ; trong khi với hai mẫu PGQD-21 và PGQD-36, đỉnh hấp thụ này lại quan sát được trên cả ba phương  $Ox$ ,  $Oy$  lẫn  $Oz$ . Điều này cũng cho thấy các mẫu khảo sát có tính dị hướng khi quan sát phổ hấp thụ.



**Hình 7. Phổ hấp thụ của các chấm lượng tử penta-graphene có kích thước thay đổi**

Khi chấm lượng tử PGQD-5 được pha tạp B, N hoặc đồng pha tạp BN, ta vẫn quan sát được đỉnh hấp thụ chính trong khoảng năng lượng 12,5 eV (Hình 8). Tuy nhiên, các đỉnh hấp thụ khởi phát xuất hiện các đỉnh phổ thuộc vùng khả kiến và sự bất đẳng hướng được thể hiện trên cả ba phương. Cụ thể, đối với các mẫu PGQD-5 có nguyên tố tạp B ở vị trí carbon lai hóa  $sp^3$  (B1), ta có thể quan sát được đỉnh phổ với bước sóng khoảng 580 nm theo phương Oy và Oz, trong khi đó mẫu chứa B ở vị trí carbon

lai hóa  $sp^2$  (B2), phổ hấp thụ với bước sóng xấp xỉ 380 nm xuất hiện theo hai phương tương ứng (Hình 9). Đối với hai mẫu đồng pha tạp N1B2 và N2B1, các đỉnh phổ với bước sóng ở vùng tử ngoại gần cũng được quan sát thấy trên hai phương Oy và Oz. Đối với các chấm lượng tử được pha tạp N, đỉnh phổ khởi phát được ghi nhận ở vùng tử ngoại, với bước sóng ngắn nhất trong các mẫu pha tạp được khảo sát, dao động trong khoảng từ 230 nm đến 280 nm.

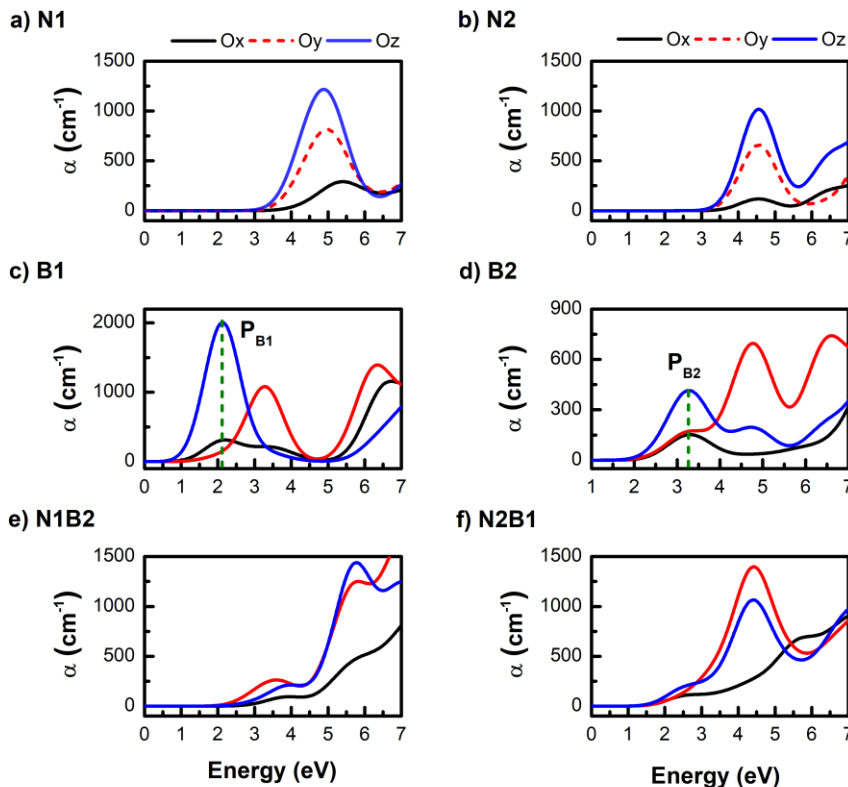


**Hình 8. Phổ hấp thụ của các chấm lượng tử penta-graphene được pha tạp N (a, b), B (c, d) và đồng pha tạp BN (e, f)**



Các kết quả thu được đã thể hiện sự ảnh hưởng của nguyên tố và vị trí tạp đến tính chất điện tử và tính chất quang của chấm lượng tử penta-graphene. Sự thu hẹp cấu trúc vùng khi pha tạp làm cho sự chuyển dời từ vùng hóa trị lên vùng dẫn của điện tử nhạy hơn, dẫn đến có thể làm tăng những chuyển dời

khả dĩ, từ đó tăng số đỉnh phổ quan sát được. Ngoài ra, những thay đổi trong tính chất điện tử của các mẫu PGQD chứa tạp N, B hoặc NB cũng cho ta thu được sự dịch chuyển đỉnh phổ về vùng khả kiến từ vùng tử ngoại của mẫu PGQD-5 thuần (Hình 9).



**Hình 9.** Vị trí đỉnh phổ hấp thụ của các chấm lượng tử penta-graphene được pha tạp N (a, b), B (c, d) và đồng pha tạp BN (e, f)

**4. KẾT LUẬN**

Tóm lại, trong nghiên cứu này, đặc tính điện tử và tính chất quang của chấm lượng tử penta-graphene với kích thước khác nhau, hoặc được pha tạp N, B ở hai vị trí carbon lai hóa  $sp^3$  và  $sp^2$  hay đồng pha tạp NB ở hai vị trí này đã được khảo sát chi tiết. Kết quả cho thấy độ rộng vùng cấm giảm khi kích thước mẫu tăng. Đối với các mẫu PGQD-5 pha tạp, độ rộng vùng cấm luôn giảm so với mẫu thuần. Những phân tích mật độ trạng thái và mật độ trạng thái riêng đã góp phần kiến giải những thay đổi trong cấu trúc vùng. Từ phổ hấp thụ, việc pha

tạp hoặc đồng pha tạp đã làm xuất hiện các đỉnh phổ ở vùng khả kiến với bước sóng từ 380 nm đến 580 nm tùy thuộc vào vị trí và nguyên tố tạp. Những thay đổi trong đặc tính điện tử và tính chất quang của chấm lượng tử penta-graphene khi thay đổi kích thước, nguyên tố và vị trí tạp có thể làm nền tảng cho những nghiên cứu tiếp theo hoặc định hướng ứng dụng PGQDs cho những thiết bị quang điện tử.

**LỜI CẢM ƠN**

Nghiên cứu này được tài trợ bởi đề tài nghiên cứu khoa học sinh viên mã số TSV2021-48.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Abdelati, M. A., Fadlallah, M. M., Gamal, Y. E. D., & Maarouf, A. A. (2021). Pristine and holey graphene quantum dots: Optical properties using time independent and dependent density functional theory. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 128, 114602. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114602>
- Banhart, F., Kotakoski, J., & Krasheninnikov, A. V. (2011). Structural defects in graphene. *ACS Nano*, 5(1), 26-41. <https://doi.org/10.1021/nn102598m>
- Dos Santos, R. M., de Sousa, L. E., Galvão, D. S., & Ribeiro, L. A. (2020). Tuning penta-Graphene electronic properties through engineered Line Defects. *Scientific Reports*, 10(1), 1-8. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-64791-x>
- Hosseini, M., Khabbaz, H., Dezfoli, A. S., Ganjali, M. R., & Dadmehr, M. (2015). Selective recognition of Glutamate based on fluorescence enhancement of graphene quantum dots. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular*, 136, 1962-1966. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2014.10.117>
- Kang, D., Zhang, C., & Li, H. (2019). Spin transport in zigzag graphene nanoribbon with a flower defect. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 32(12), 3927-3931. <https://doi.org/10.1007/s10948-019-05180-y>
- Kaykılarlı, C., Uzunsoy, D., Parmak, E. D. Ş., Fellah, M. F., & Çakır, Ö. Ç. (2020). Boron and nitrogen doping in graphene: an experimental and density functional theory (DFT) study. *Nano Express*, 1(1), 010027. <https://doi.org/10.1088/2632-959X/ab89e9>
- Kermani, H. A., Hosseini, M., Dadmehr, M., Hosseinkhani, S., & Ganjali, M. R. (2017). DNA methyltransferase activity detection based on graphene quantum dots using fluorescence and fluorescence anisotropy. *Sensors and Actuators B Chemical*, 241, 217-223. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2016.10.078>
- Kuklin, A. V., Ågren, H., & Avramov, P. V. (2020). Structural stability of single-layer PdSe<sub>2</sub> with pentagonal puckered morphology and its nanotubes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(16), 8289-8295. <https://doi.org/10.1039/D0CP00979B>
- Kumar, V., Dey, A., Thomas, S., Zaeem, M. A., & Roy, D. R. (2021). Hydrogen-induced tunable electronic and optical properties of a two-dimensional penta-Pt<sub>2</sub>N<sub>4</sub> monolayer. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(17), 10409-10417. <https://doi.org/10.1039/D1CP00681A>
- Liu, H., Qin, G., Lin, Y., & Hu, M. (2016). Disparate strain dependent thermal conductivity of two-dimensional penta-structures. *Nano Letters*, 16(6), 3831-3842. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b01311>
- Mehrzad-Samarin, M., Faridbod, F., Dezfali, A. S., & Ganjali, M. R. (2017). A novel metronidazole fluorescent nanosensor based on graphene quantum dots embedded silica molecularly imprinted polymer. *Biosensors and Bioelectronics*, 92, 618-623. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2016.10.047>
- Monshi, M. M., Aghaei, S. M., & Calizo, I. (2018). Band gap opening and optical absorption enhancement in graphene using ZnO nanocluster. *Physics Letters A*, 382(17), 1171-1175. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2018.03.001>
- Myung, S., Yin, P. T., Kim, C., Park, J., Solanki, A., Reyes, P. I., ... & Lee, K. B. (2012). Label-Free Polypeptide-Based Enzyme Detection Using a Graphene-Nanoparticle Hybrid Sensor. *Advanced Materials*, 24(45), 6081-6087. <https://doi.org/10.1002/adma.201202961>
- Narin, P. O. L. A. T., Abbas, J. A., Atmaca, G., Kutlu, E., Lisesivdin, S. B., & Ozbay, E. (2019). Ab initio study of electronic properties of armchair graphene nanoribbons passivated with heavy metal elements. *Solid State Communications*, 296, 8-11. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2019.04.005>
- Novoselov, K. S. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306, 666-669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Katsnelson, M. I., Grigorieva, I. V., Dubonov, S. V., & Firsov, A. A. (2005). Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, 438, 197-200. <https://doi.org/10.1038/nature04233>
- Rui, C., Shao, C., Liu, J., Chen, A., Zhu, K., & Shao, Q. (2021). Transport properties of B/P doped graphene nanoribbon field-effect transistor. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 130, 105826. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2021.105826>
- Salehnia, F., Faridbod, F., Dezfali, A.S., Ganjali, M.R., & Norouzi, P. (2017). Cerium (III) ion sensing based on graphene quantum dots fluorescent Turn-Off. *Journal of Fluorescence*, 27(1), 331-338. <https://doi.org/10.1007/s10895-016-1962-5>
- Schedin, F., Geim, A. K., Morozov, S. V., Hill, E. W., Blake, P., Katsnelson, M. I., & Novoselov, K. S. (2007). Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene. *Nature Materials*, 6(9), 652-655. <https://doi.org/10.1038/nmat1967>

- Shahrokhi, M. (2017). Tuning the band gap and optical spectra of monolayer penta-graphene under in-plane biaxial strains. *Optik*, 136, 205-214. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.02.033>
- Shunhong, Z., Jian, Z., Qian, W., Xiaoshuang, C., Yoshiyuki, K., & Puru, J. (2015). Penta-graphene: A new carbon allotrope. *Radioelectronics. Nano systems. Information Technologies*, 7(2), 191-207. <https://doi.org/10.17725/rensit.2015.07.191>
- Singh, D., Gupta, S. K., Sonvane, Y., & Lukačević, I. (2016). Antimonene: a monolayer material for ultraviolet optical nanodevices. *Journal of Materials Chemistry C*, 4(26), 6386-6390. <https://doi.org/10.1039/C6TC01913G>
- Sohal, N., Maity, B., & Basu, S. (2021). Recent advances in heteroatom-doped graphene quantum dots for sensing applications. *RSC Advances*, 11(41), 25586-25615. <https://doi.org/10.1039/D1RA04248C>
- Tien, N. T., Thao, P. T. B., Phuc, V. T., & Ahuja, R. (2019). Electronic and transport features of sawtooth penta-graphene nanoribbons via substitutional doping. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 114, 113572. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.113572>
- Tien, N. T., Thao, P. T. B., Phuc, V. T., & Ahuja, R. (2020). Influence of edge termination on the electronic and transport properties of sawtooth penta-graphene nanoribbons. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 146, 109528. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2020.109528>
- Weerasinghe, A., Ramasubramaniam, A., & Maroudas, D. (2018). Electronic structure of electron-irradiated graphene and effects of hydrogen passivation. *Materials Research Express*, 5(11), 115603. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/aadde>
- Yuan, P. F., Zhang, Z. H., Fan, Z. Q., & Qiu, M. (2017). Electronic structure and magnetic properties of penta-graphene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(14), 9528-9536. <https://doi.org/10.1039/C7CP00029D>