

## TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ CỦA DÂY NANO PENTA-GRAPHENE BIÊN RĂNG CỬA SAI HỔNG DẠNG KHUYẾT

Nguyễn Thành Tiên<sup>1\*</sup>, Lê Võ Phương Thuần<sup>1</sup>, Đào Hoàng Chương<sup>1</sup> và Võ Thị Ngọc Huyền<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

<sup>2</sup>Khoa Sư phạm, Trường Đại học Cần Thơ

\*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Nguyễn Thành Tiên (email: [nttien@ctu.edu.vn](mailto:nttien@ctu.edu.vn))

### Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 15/04/2021

Ngày nhận bài sửa: 05/06/2021

Ngày duyệt đăng: 29/10/2021

### Title:

The electronic properties of defective sawtooth penta-graphene nanoribbons

### Từ khóa:

Dây nano penta-graphene, nguyên lý ban đầu, sai hỏng, tính chất điện tử

### Keywords:

Defect, electronic properties, first principles, penta-graphene nanoribbon

### ABSTRACT

In this paper, the electronic properties of defective Sawtooth Penta-Graphene Nanoribbons (DSSPGNRs) were investigated by calculating the binding energy, band structure, and density of states from first principles method. The types of defects considered here are monovacancy at either 4-coordinated C1 site or 3-coordinated C2 site and 2C double vacancy. The results showed that DSSPGNR has a significantly reduced band gap compared to the original sample. In which, the band gap of double DSSPGNR is more reducer than the one of single DSSPGNR. These findings are expected to provide important guidelines for the practical applications of penta-graphene.

### TÓM TẮT

Trong bài báo này, tính chất điện tử của các dây penta-graphene dạng răng cưa (SSPGNR) sai hỏng dạng khuyết (DSSPGNRs) được nghiên cứu bằng cách tính năng lượng liên kết, cấu trúc vùng điện tử và mật độ trạng thái bởi phương pháp nguyên lý ban đầu. Ba kiểu khuyết được khảo sát trong nghiên cứu này là khuyết đơn nguyên tử C1, C2 và khuyết đồng thời hai nguyên tử C2. Kết quả nghiên cứu cho thấy DSSPGNR có độ rộng vùng cấm giảm đáng kể so với mẫu không khuyết. Trong đó, DSSPGNRs khuyết đồng thời hai nguyên tử C2 có độ rộng vùng cấm giảm nhiều hơn so với DSSPGNRs khuyết đơn nguyên tử. Kết quả nghiên cứu này cung cấp thông tin quan trọng cho việc phát triển ứng dụng penta-graphene trong lĩnh vực vi điện tử.

## 1. GIỚI THIỆU

Trong số các vật liệu hai chiều, Graphene và các vật liệu tựa Graphene đã nhanh chóng thu hút sự chú ý của cộng đồng các nhà khoa học vật liệu do tính chất vật lý thay đổi đáng kể của chúng so với cấu trúc khối. Chúng có nhiều tiềm năng cho các ứng dụng trong các thiết bị điện tử thế hệ mới bởi vì tính chất vận chuyển điện tử độc đáo như: độ linh động hạt tải cao, dẫn nhiệt tốt và các hiệu ứng Hall lượng tử dị thường (Berger *et al.*, 2004; Bolotin *et al.*,

2008; Hirata *et al.*, 2004; Neto *et al.*, 2009). Sự lai hóa  $sp^2$  của liên kết Carbon và vùng cấm điện tử bằng 0 của graphene làm nó không hiệu quả đối với hấp phụ khí và ứng dụng phát triển transistor, sensors.

Gần đây, Penta-Graphene (PG), một cấu trúc các nguyên tử C đơn lớp xếp hình ngũ giác đã được đề xuất. Cấu trúc PG là tổ hợp của các nguyên tử C1 (lai hóa  $sp^3$ ) và các nguyên tử C2 (lai hóa  $sp^2$ ) (Zhang *et al.*, 2015). Các nghiên cứu tiên đoán

Graphene là một bán dẫn có vùng cấm gián tiếp với độ rộng vùng cấm là 3.25 eV (Wang *et al.*, 2016; Yu & Zhang 2015; Zhang *et al.*, 2015 ). Bên cạnh đó, Graphene có hệ số Poisson âm bất thường, độ bền siêu cao và khả năng chịu được nhiệt cao tới 1000 K, vượt trội Graphene. Những đặc tính vượt trội này làm cho nó trở thành một ứng cử viên tiềm năng cho nhiều ứng dụng đầy hứa hẹn. Nhiều nghiên cứu được thực hiện để cải thiện các tính chất vật lý của PG thông qua các phương pháp chức năng hóa khác nhau. Các nghiên cứu lý thuyết cho thấy PG có độ dẫn nhiệt gia tăng đáng kể sau khi hydro hóa, cao hơn nhiều so với PG thuần. Nguyên tử Hydro hấp phụ trên tấm PG được dự đoán sẽ tạo ra từ tính và có thể điều chỉnh hiệu quả các tính chất điện tử của PG như việc điều chỉnh PG từ một chất bán dẫn thành một chất bán kim. Ngoài ra, trong cấu trúc của PG có chứa cả liên kết Carbon  $sp^2$  và  $sp^3$  vì vậy PG không có cấu trúc phẳng lý tưởng, mà nó có cấu trúc vênh, cho thấy PG có nhiều vị trí sở hữu khả năng hấp phụ khí (Zhang *et al.*, 2015). Những đặc tính này khiến cho PG trở thành ứng cử viên tiềm năng để ứng dụng trong lĩnh vực vi điện tử.

Nhằm mục đích giảm kích thước linh kiện, tấm PG được cắt thành các cấu trúc giả một chiều được gọi là Penta-Graphene nanoribbon (PGNR). PGNR có 4 loại: ZZ, AA, ZA, SS. Trong đó, SS là loại đáng chú ý nhất không chỉ bởi vì nó là bán dẫn mà còn vì nó là cấu trúc bền nhất trong bốn loại PGNR. Sự hấp phụ các phân tử khí CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub> trên bề mặt cấu trúc này được nghiên cứu, xác định được đặc tính hấp phụ của chúng (Nguyễn Thành Tiên và *ctv.*, 2020). Nghiên cứu tính chất vận chuyển điện tử của

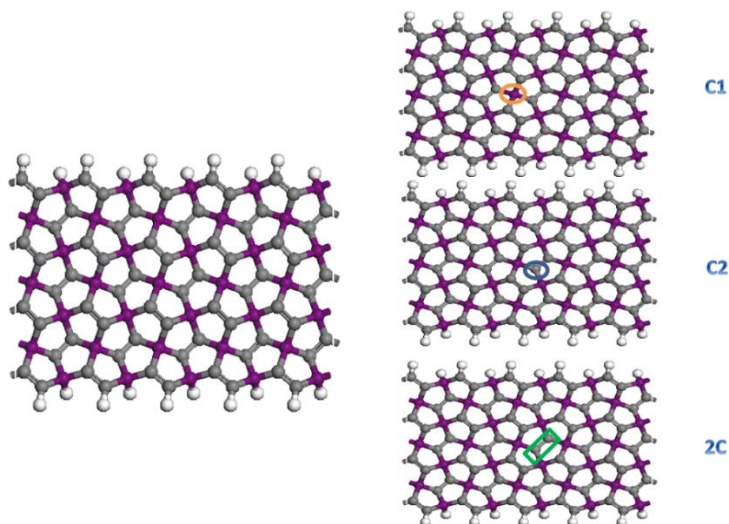
SSPGNR pha tạp thay thế (Si, P, N) đã được thực hiện, kết quả cho thấy cấu trúc vùng năng lượng và đặc trưng I-V của N:SSPGNR thay đổi đáng kể so với mẫu nguyên sơ (Tien *et al.*, 2019). Tuy nhiên, ta biết rằng, các cấu trúc thấp chiều nói chung dễ bị sai hỏng khuyết khi tổng hợp chúng (Banhart *et al.*, 2011; Han *et al.*, 2021). Vì thế, việc nghiên cứu đặc tính điện tử các cấu trúc khuyết là rất cần thiết, có thêm thông tin về cấu trúc thực. Trong nghiên cứu này, dựa trên cơ sở lý thuyết phiếm hàm mật độ, sự tồn tại và đặc tính điện tử của các SSPGNR sai hỏng khuyết được nghiên cứu.

## 2. PHƯƠNG PHÁP

Sự ổn định cấu trúc và đặc tính điện tử của các mẫu SSPGNR khuyết được đánh giá bằng phương pháp nguyên lý ban đầu dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ DFT (Kohn & Sham, 1965). Mẫu nghiên cứu có độ rộng thay đổi từ năm đến tám chuỗi được cắt theo biên răng cưa. Các mẫu SSPGNR với các vị trí khuyết khác nhau được tối ưu bằng cách sử dụng tính toán DFT trong phép tính gần đúng gradient tổng quát (GGA) của Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) (Perdew *et al.*, 1996) trong gói phần mềm Castep để tìm được các cấu trúc ổn định. Số k-point trong vùng Brillouin được chọn là  $1 \times 1 \times 5$  lần lượt theo ba phương x, y, z với năng lượng cutoff là 680 eV và nhiệt độ động học của hệ điện tử là 300 K. Trong quá trình tối ưu, tiêu chí hội tụ về lực và ứng suất tối đa có giá trị lần lượt là 0,05 eV/Å và 0,1 Gpa.

## 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

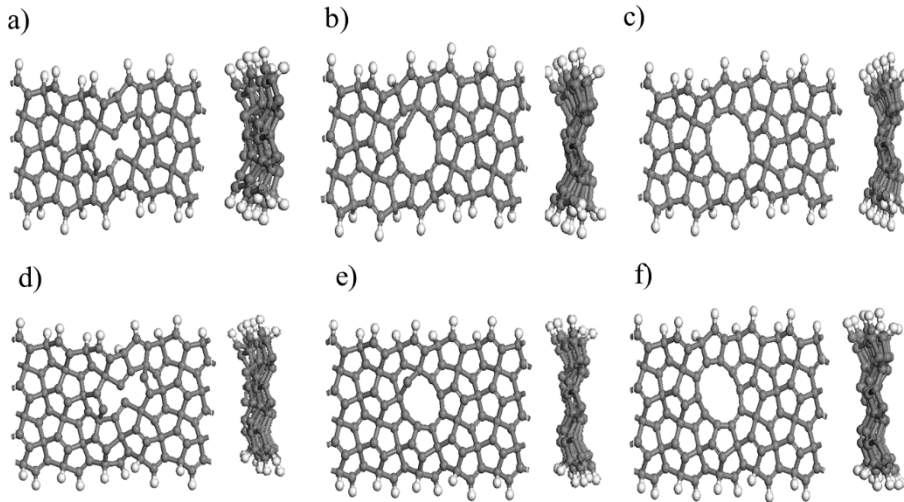
### 3.1. Sự ổn định cấu trúc



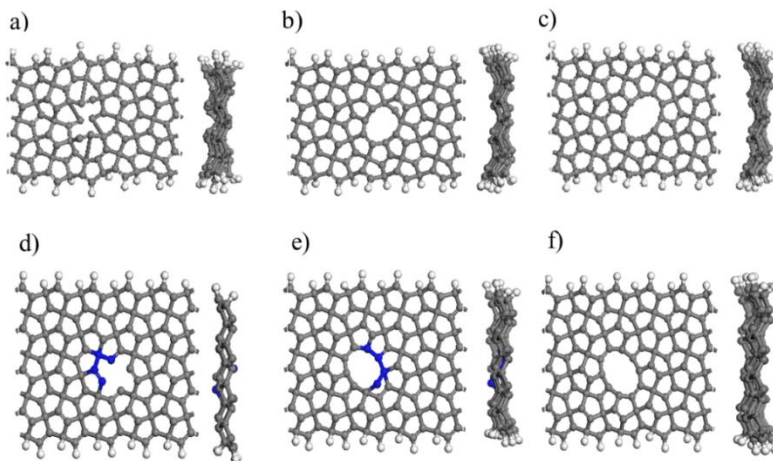
**Hình 1. Hình bên trái : Mô hình SSPGNR không khuyết; Hình bên phải: Mô hình SSPGNR với vị trí của nguyên tử có khả năng bị khuyết: C1, C2 và hai nguyên tử C2 (2C)**

Đầu tiên, cấu hình ổn định nhất được tìm trong các trường hợp khuyết khả dĩ trên SSPGNR giả một chiều. Để tìm được các vị trí khuyết khả dĩ, các mẫu SSPGNR được khảo sát với độ rộng dây thay đổi từ 5 đến 8 dây, trên mỗi mẫu đã tìm thấy có 3 cấu trúc

khuyết khả dĩ (được trình bày trong Hình 1). Hai cấu trúc khả dĩ đầu tiên của SSPGNR là khuyết một nguyên tử Carbon C1 và C2. Cấu trúc khả dĩ thứ ba là khuyết hai nguyên tử C2. Các cấu trúc khuyết khả dĩ sau tối ưu được mô tả trong Hình 2 (độ rộng 5, 6 dây) và Hình 3 (độ rộng 7, 8 dây).



**Hình 2.** Các cấu hình bị khuyết khả dĩ của các SSPGNR có độ rộng 5 và 6 dây: (a), (d) cấu hình khuyết nguyên tử C1 (SS5\_C1 và SS6\_C1), (b), (e) cấu hình khuyết nguyên tử C2 (SS5\_C2 và SS6\_C2) và (c), (f) cấu hình khuyết cả hai nguyên tử C2 (SS5\_2C và SS6\_2C) trên SSPGNR



**Hình 3.** Các cấu hình bị khuyết khả dĩ của các SSPGNR có độ rộng 7 và 8 dây: (a), (d) cấu hình khuyết nguyên tử C1 (SS7\_C1 và SS8\_C1), (b), (e) cấu hình khuyết nguyên tử C2 (SS7\_C2 và SS8\_C2) và (c), (f) cấu hình khuyết cả hai nguyên tử C2 (SS7\_2C và SS8\_2C) trên SSPGNR

Các mẫu được tối ưu trên cơ sở ổn định năng lượng tổng của hệ (năng lượng hệ thấp nhất). Để đánh giá cấu trúc ổn định nhất trong tất cả các trường hợp nghiên cứu, năng lượng liên kết  $E_{bind}$  của

SSPGNR bị khuyết được tính toán. Năng lượng  $E_{bind}$  được tính dựa trên công thức sau:

$$E_{bind} = \frac{E_{total} - N_C E_C - N_H E_H}{N_C + N_H}$$

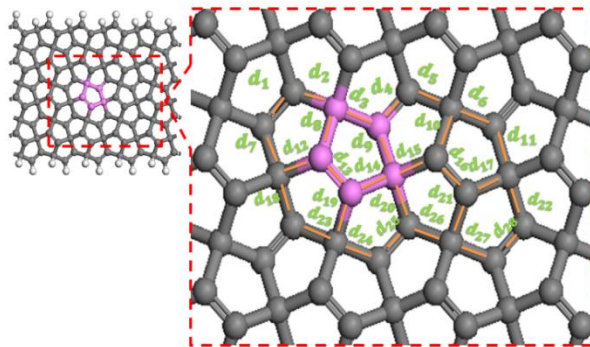
trong đó  $E_{total}$ ,  $E_C$  và  $E_H$  lần lượt là tổng năng lượng của hệ, năng lượng của nguyên tử Carbon, năng lượng của nguyên tử Hydro cô lập.  $N_C$  và  $N_H$  lần lượt là số nguyên tử Carbon và Hydro trong hệ. Năng lượng liên kết càng nhỏ thì cấu hình khuyết tương ứng được xem là càng ổn định. Kết quả tính năng lượng liên kết được trình bày trong Bảng 1. Kết quả tính toán cho thấy các mẫu khuyết SS8 có năng

lượng liên kết thấp nhất. Giá trị năng lượng liên kết của mẫu khuyết SS8 giảm dần theo thứ tự:  $E_{bind}(SS8\_C1) = -7,374 \text{ eV} > E_{bind}(SS7\_2C) = -7,381 \text{ eV} > E_{bind}(SS7\_C2) = -7,421 \text{ eV}$ . Tuy nhiên, nếu xét cùng loại nguyên tử khuyết thì mẫu SS7\_C1 ổn định hơn các mẫu khuyết C1 còn lại vì mẫu này đối xứng hơn và rộng hơn.

**Bảng 1. Năng lượng liên kết ( $E_{bind}$ ) của các DSSPGNRs**

Mẫu	Vị trí	$E_{bind}$ (eV)				
		SS5	SS6	SS7	SS8	PG
C1	C1 ( $sp^3$ )	-7,102	-7,189	-7,383	-7,374	-6,964
C2	C2 ( $sp^2$ )	-7,123	-7,207	-7,295	-7,421	-7,033
2C	C2 + C2	-7,157	-7,246	-7,363	-7,381	

**3.2. Các thông số hình học của cấu trúc**



**Hình 4. Mô hình minh họa độ dài các liên kết của SSPGNR quanh vị trí khuyết**

Sau khi tối ưu, các thông số hình học được xác định. Hình 4 ký hiệu các vị trí liên kết xung quanh nguyên tử khuyết. Bảng 2, Bảng 3, Bảng 4 và Bảng 5 trình bày các thông số hình học là các độ dài liên kết của các DSSPGNR sau khi tối ưu cấu trúc. Có thể thấy rằng, độ dài liên kết giữa các nguyên tử

xung quanh nguyên tử khuyết có sự thay đổi đáng kể. Trong đó, các mẫu bị khuyết tại vị trí C1 có liên kết bị kéo dài nhiều nhất và mẫu 2C có liên kết ít thay đổi nhất. Đây cũng là nguyên nhân chính khiến năng lượng liên kết trong các mẫu C1 là lớn nhất, trừ mẫu SS7\_C1.

**Bảng 2. Các độ dài liên kết của SS5 không khuyết và khuyết**

	SS5	SS5_C1	SS5_C2	SS5_2C		SS5	SS5_C1	SS5_C2	SS5_2C
<b>d1</b>	1,337	1,343	1,448	1,436	<b>d15</b>	1,541	...	1,431	1,433
<b>d2</b>	1,539	1,561	1,392	1,358	<b>d16</b>	1,337	1,337	1,358	1,358
<b>d3</b>	1,541	1,619	1,425	1,398	<b>d17</b>	1,539	1,579	1,564	1,565
<b>d4</b>	1,337	1,455	1,378	1,529	<b>d18</b>	1,554	1,521	1,492	1,381
<b>d5</b>	1,539	1,529	1,536	1,526	<b>d19</b>	1,547	1,502	...	...
<b>d6</b>	1,541	1,446	1,557	1,340	<b>d20</b>	1,553	...	1,381	1,464
<b>d7</b>	1,553	1,514	1,480	1,464	<b>d21</b>	1,547	1,587	1,632	1,548
<b>d8</b>	1,552	1,588	2,598	...	<b>d22</b>	1,553	1,514	1,537	1,564
<b>d9</b>	1,552	...	1,446	1,381	<b>d23</b>	1,539	1,440	1,435	1,398
<b>d10</b>	1,552	1,502	1,552	1,631	<b>d24</b>	1,548	1,529	1,357	1,358
<b>d11</b>	1,553	1,521	1,567	1,535	<b>d25</b>	1,338	1,455	1,398	1,436
<b>d12</b>	1,541	1,580	1,507	...	<b>d26</b>	1,539	1,619	1,530	1,372
<b>d13</b>	1,337	1,337	...	...	<b>d27</b>	1,548	1,561	1,526	1,537
<b>d14</b>	1,539	...	...	...	<b>d28</b>	1,338	1,343	1,340	1,555

**Bảng 3. Các độ dài liên kết của SS6 không khuyết và khuyết**

	SS6	SS6_C1	SS6_C2	SS6_2C		SS6	SS6_C1	SS6_C2	SS6_2C
d1	1,337	1,340	1,368	1,387	d15	1,541	...	1,431	1,438
d2	1,539	1,562	1,465	1,359	d16	1,337	1,340	1,352	1,354
d3	1,541	1,654	1,497	1,448	d17	1,539	1,573	1,543	1,542
d4	1,337	1,453	1,363	1,376	d18	1,554	1,509	1,512	1,454
d5	1,539	1,535	1,548	1,540	d19	1,547	1,446	...	...
d6	1,541	1,446	1,571	1,564	d20	1,553	...	1,379	1,394
d7	1,553	1,509	1,525	1,373	d21	1,547	1,581	1,603	1,601
d8	1,552	1,547	1,617	...	d22	1,553	1,507	1,533	1,531
d9	1,552	...	1,470	1,482	d23	1,539	1,441	1,459	1,444
d10	1,552	1,502	1,545	1,549	d24	1,548	1,499	1,370	1,367
d11	1,553	1,526	1,571	1,567	d25	1,338	1,477	1,395	1,410
d12	1,541	1,606	1,579	...	d26	1,539	1,640	1,522	1,542
d13	1,337	1,343	...	...	d27	1,548	1,662	1,575	1,593
d14	1,539	...	...	...	d28	1,338	1,344	1,341	1,343

**Bảng 4. Các độ dài liên kết của SS7 không khuyết và khuyết**

	SS7	SS7_C1	SS7_C2	SS7_2C		SS7	SS7_C1	SS7_C2	SS7_2C
d1	1,539	1,469	1,552	1,545	d15	1,540	...	...	...
d2	1,548	1,398	1,571	1,558	d16	1,337	1,356	...	...
d3	1,337	1,234	1,364	1,375	d17	1,539	1,727	1,551	...
d4	1,539	1,482	1,504	1,454	d18	1,551	1,564	1,534	1,531
d5	1,547	1,524	1,526	1,371	d19	1,546	1,599	1,597	1,600
d6	1,337	1,332	1,372	1,398	d20	1,551	...	1,382	1,387
d7	1,551	1,552	1,564	1,559	d21	1,546	2,890	...	...
d8	1,546	2,890	1,507	1,515	d22	1,551	1,552	1,522	1,469
d9	1,551	...	1,469	1,469	d23	1,337	1,332	1,339	1,341
d10	1,546	1,599	1,548	...	d24	1,547	1,525	1,573	1,587
d11	1,551	1,563	1,539	1,386	d25	1,539	1,482	1,521	1,530
d12	1,540	1,729	1,552	1,549	d26	1,337	1,234	1,391	1,398
d13	1,337	1,356	1,354	1,351	d27	1,547	1,397	1,373	1,371
d14	1,539	...	1,424	1,427	d28	1,539	1,469	1,463	1,454

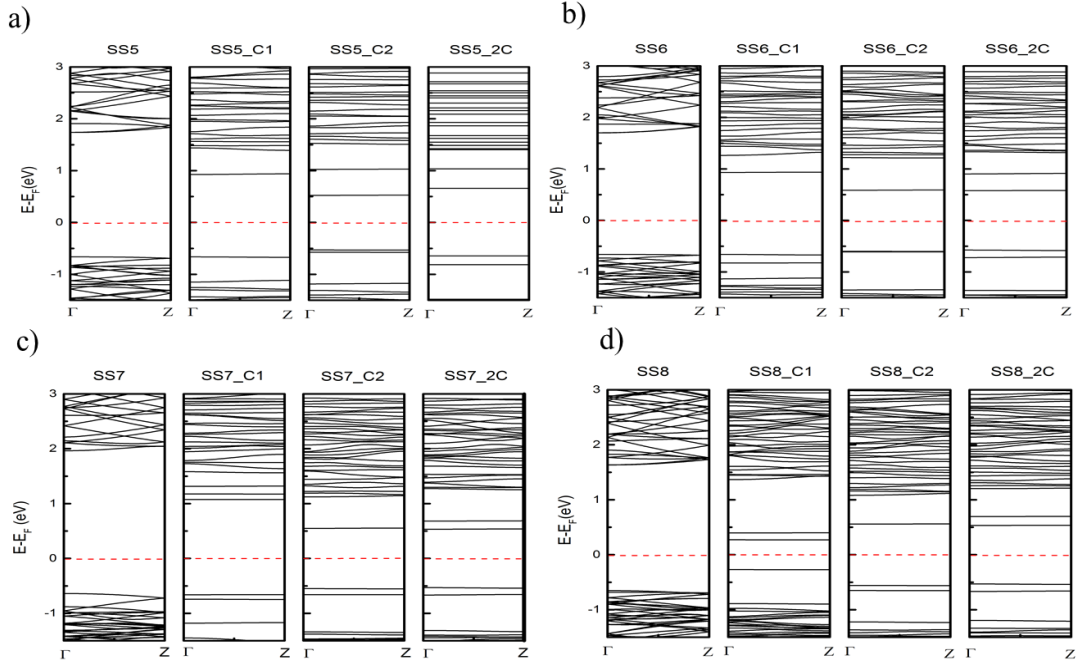
**Bảng 5. Các độ dài liên kết của SS8 không khuyết và khuyết**

	SS8	SS8_C1	SS8_C2	SS8_2C		SS8	SS8_C1	SS8_C2	SS8_2C
d1	1,337	1,335	1,389	1,400	d15	1,541	...	1,544	1,428
d2	1,539	1,532	1,369	1,369	d16	1,337	1,324	1,341	1,351
d3	1,541	1,550	1,459	1,456	d17	1,539	1,595	1,537	1,552
d4	1,337	1,328	1,368	1,377	d18	1,554	1,524	1,465	1,473
d5	1,539	1,527	1,544	1,546	d19	1,547	1,547	1,550	...
d6	1,541	1,535	...	1,543	d20	1,553	...	1,535	1,389
d7	1,553	1,538	1,380	1,389	d21	1,547	1,535	1,554	1,599
d8	1,552	1,540	...	...	d22	1,553	1,539	1,549	1,536
d9	1,552	...	1,519	1,472	d23	1,539	1,533	1,501	1,456
d10	1,552	1,546	1,551	1,518	d24	1,548	1,531	1,525	1,372
d11	1,553	1,525	1,550	1,564	d25	1,338	1,323	1,372	1,400
d12	1,541	1,596	...	...	d26	1,539	1,549	1,545	1,531
d13	1,337	1,324	...	...	d27	1,548	1,542	1,552	1,583
d14	1,539	...	1,551	...	d28	1,338	1,337	1,338	1,342

### 3.3. Cấu trúc vùng năng lượng (BS)

Để đánh giá sự ảnh hưởng của các vị trí khuyết khác nhau lên đặc tính điện tử của SSPGNR, sự thay

đổi của cấu trúc vùng năng lượng của SSPGNR và DSSPGNR cần được xem xét. Hình 5 mô tả cấu trúc vùng năng lượng của các mẫu: (a) SS5, (b) SS6, (c) SS7 và (d) SS8 trước và sau khi khuyết.



**Hình 5. Cấu trúc vùng năng lượng của các cấu trúc SSPGNR không khuyết và khuyết: (a) SS5, (b) SS6, (c) SS7 và (d) SS8. Đường không liền nét biểu diễn mức năng lượng Fermi**

Kết quả cho thấy sau khi bị khuyết tất cả các mẫu đều có độ rộng vùng cấm bị giảm đi đáng kể. Trước khi bị khuyết, SSPGNR có độ rộng vùng cấm vào khoảng 2,2 eV đến 2,4 eV tùy vào độ rộng dây của cấu trúc nhưng sau khi bị khuyết độ rộng vùng cấm đa số mẫu giảm xuống cỡ khoảng 1 eV. Trong đó, mẫu SS6 và SS7 bị khuyết tại vị trí 2C có độ rộng vùng cấm giảm nhiều nhất. Mẫu SS5 bị khuyết tại vị trí C2 có vùng cấm giảm nhiều nhất. Tuy nhiên, với mẫu độ rộng dây  $W=8$  khuyết tại vị trí C1 có độ rộng vùng cấm giảm nhiều hơn (0,541 eV). Điều này tương tự với kết quả của nghiên cứu trước về mẫu PG hai chiều khuyết (DPG) (Lima et al., 2021).

Theo kết quả tính từ Bảng 6, các mẫu khuyết vẫn thuộc vật liệu bán dẫn nhưng có độ rộng vùng cấm giảm đi. Một đặc điểm đáng chú ý, các vùng con của các mẫu khuyết quanh mức Fermi có dạng phẳng, điều này thể hiện hiệu ứng giam cầm điện tử định xứ quanh vị trí khuyết, điện tử có năng lượng này thể hiện đặc tính giả không chiều. Vậy đặc tính động học điện tử trong khoảng năng lượng lân cận năng lượng Fermi của các mẫu khuyết có tính chất giả

không chiều. Điều này hứa hẹn một số tính chất vật lý mới của mẫu khuyết so với mẫu không khuyết.

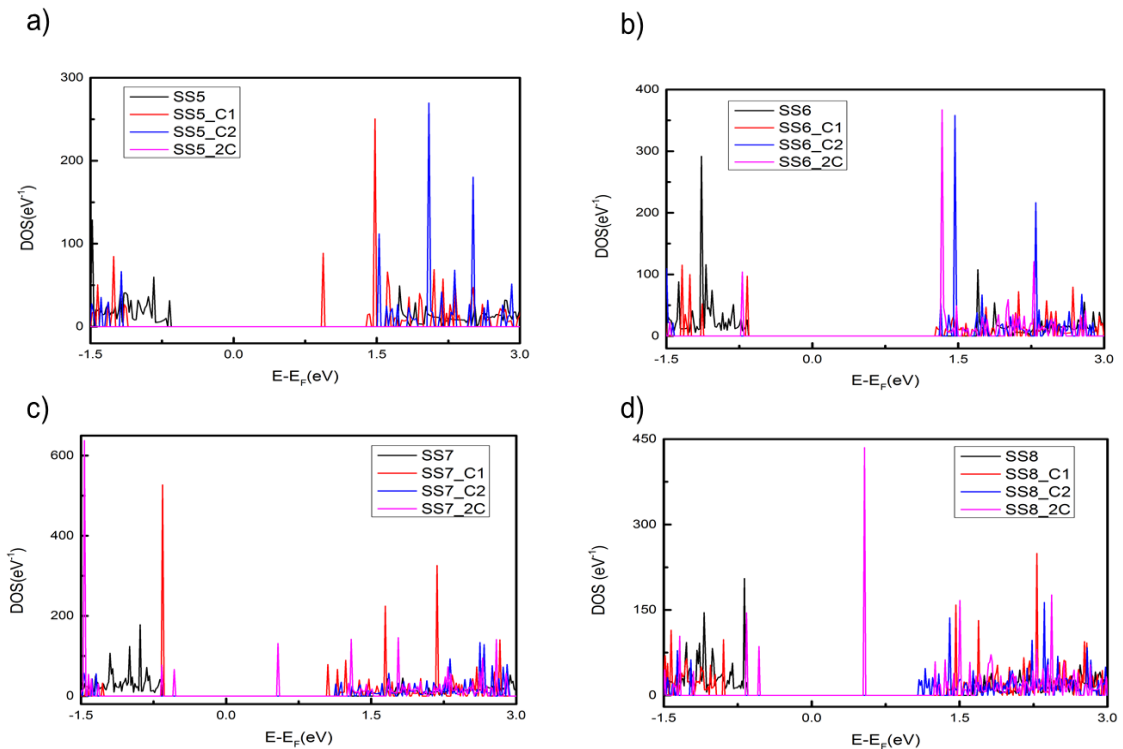
**Bảng 6. Độ rộng vùng cấm ( $E_g$ ) của DSSPGNR**

Mẫu	Vị trí khuyết	$E_g$ (eV)
PG	Không khuyết	2,369
	C1	0,491
	C2	1,094
SS5	Không khuyết	2,401
	C1	1,590
	C2	1,053
SS6	2C	1,303
	Không khuyết	2,359
	C1	1,592
SS7	C2	1,185
	2C	1,154
	Không khuyết	2,325
SS8	C1	1,414
	C2	1,098
	2C	1,065
SS8	Không khuyết	2,286
	C1	0,541
	C2	1,116
	2C	1,065

**3.4. Mật độ trạng thái (DOS) của DSSPGNR**

Trong Hình 6, mật độ trạng thái của các mẫu DSSPGNR được tính với độ rộng dây khác nhau: (a) SS5, (b) SS6, (c) SS7 và (d) SS8. Nhìn chung, các mẫu DSSPGNR vẫn là các chất bán dẫn nhưng độ rộng vùng cấm có thay đổi theo xu hướng giảm. Rõ ràng sự tồn tại của sai hỏng khuyết ảnh hưởng đến độ rộng vùng cấm là đáng kể. Kết quả tính DOS phù hợp với kết quả tính BS. Trong đó, mẫu SS5 bị khuyết tại vị trí C2 có vùng cấm giảm nhiều nhất. Các mẫu SS6 và SS7 có độ rộng vùng cấm giảm

nhất khi mẫu bị khuyết cả hai nguyên tử Carbon 2C và giảm ít nhất khi mẫu bị khuyết nguyên tử C1. Đặc biệt, mẫu SS8 có độ rộng vùng cấm giảm nhiều nhất khi bị khuyết nguyên tử C1 và ít nhất khi bị khuyết nguyên tử C2. Đồ thị DOS thể hiện các mẫu DSSPGNR có mật độ trạng thái cao ở một số mức năng lượng quanh mức Fermi. Các mức năng lượng này có khả năng là cầu nối hữu hiệu khi chuyển dời quang điện tử với hiệu suất cao. Kết quả tính này cũng cho thấy mẫu DSSPGNR có đặc tính điện tử phong phú hơn DPG.



**Hình 6. DOS của các mẫu DSSPGNR: a) rộng 5 chuỗi, b) rộng 6 chuỗi, c) rộng 7 chuỗi và d) rộng 8 chuỗi**

**4. KẾT LUẬN**

Tóm lại, thông qua việc đánh giá sự ổn định cấu trúc và đặc tính điện tử của cấu trúc DSSPGNR với sự thay đổi độ rộng dây bằng phương pháp nguyên lý ban đầu, dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ, tính trên máy tính hiệu năng cao. Kết quả cho thấy rằng năng lượng liên kết của các mẫu SS8 nói chung có giá trị thấp nhất, chứng tỏ mẫu SS8 là ổn định nhất. Độ dài liên kết và góc liên kết ở tất cả các mẫu có sự thay đổi đáng kể xung quanh vị trí khuyết. Độ rộng vùng cấm của các mẫu DSSPGNR giảm đáng kể so với các mẫu SSPGNR cùng độ rộng dây. Đặc biệt, xuất hiện các trạng thái điện tử mới dạng phẳng trong vùng cấm lân cận mức Fermi. Kết quả nghiên cứu này định hướng quan trọng cho việc xác định

tính chất điện tử của cấu trúc SSPGNR không hoàn hảo; từ đó, định hướng cho việc phát triển các linh kiện quang điện tử dựa trên cấu trúc nghiên cứu.

**LỜI CẢM ƠN**

Nghiên cứu này được tài trợ bởi đề tài khoa học và công nghệ cấp Bộ, mã số: B2020-TCT-14 và hướng dẫn sinh viên nghiên cứu khoa học trong khuôn khổ đề tài mã số TSV2021-.

**TÀI LIỆU THAM KHẢO**

Berger, C., Song, Z., Li, T., Li, X., Ogbazghi, A. Y., Feng, R., ... & De Heer, W. A. (2004). Ultrathin epitaxial graphite: 2D electron gas properties and a route toward graphene-based

- nanoelectronics. *The Journal of Physical Chemistry B*, 108(52), 19912-19916.
- Bolotin, K. I., Sikes, K. J., Jiang, Z., Klima, M., Fudenberg, G., Hone, J., ... & Stormer, H. L. (2008). Ultrahigh electron mobility in suspended graphene. *Solid state communications*, 146(9-10), 351-355.
- Banhart, F., Kotakoski, J., & Krasheninnikov, A. V. (2011). Structural defects in graphene. *ACS nano*, 5(1), 26-41.
- Han, T., Wang, X., Zhang, X., Scarpa, F., & Tang, C. (2021). Mechanics of penta-graphene with vacancy defects under large amplitude tensile and shear loading. *Nanotechnology*, 32(27), 275706.
- Hirata, M., Gotou, T., Horiuchi, S., Fujiwara, M., & Ohba, M. (2004). Thin-film particles of graphite oxide 1: High-yield synthesis and flexibility of the particles. *Carbon*, 42(14), 2929-2937.
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A), A1133.
- Lima, K. A. L., Júnior, M. L. P., Monteiro, F. F., Roncaratti, L. F., & Júnior, L. A. R. (2021). O<sub>2</sub> adsorption on defective Penta-Graphene lattices: A DFT study. *Chemical Physics Letters*, 763, 138229.
- Neto, A. C., Guinea, F., Peres, N. M., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, 81(1), 109.
- Nguyễn Thành Tiên & Trần Yến Mi. (2020). Nghiên cứu hiện tượng hấp phụ phân tử khí trên dây nano Penta-graphene dạng răng cưa. *Tạp chí khoa học Trường Đại học Cần Thơ*, 56(2), 21-29.
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865.
- 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.
- Wang, Z., Dong, F., Shen, B., Zhang, R. J., Zheng, Y. X., Chen, L. Y., & Su, W. S. (2016). Electronic and optical properties of novel carbon allotropes. *Carbon*, 101, 77-85.
- Yu, Z. G., & Zhang, Y. W. (2015). A comparative density functional study on electrical properties of layered penta-graphene. *Journal of Applied Physics*, 118(16), 165706.
- Zhang, S., Zhou, J., Wang, Q., Chen, X., Kawazoe, Y., & Jena, P. (2015). Penta-graphene: A new carbon allotrope. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112(8), 2372-2377.