

DOI:10.22144/ctu.jsi.2020.104

# NGHIÊN CỨU ĐẶC TÍNH ĐIỆN TỬ VÀ TÍNH CHẤT VẬN CHUYỂN ĐIỆN TỬ CỦA PENTA-GRAPHENE NANORIBBON DẠNG BIÊN RĂNG CỦA ĐƯỢC PHA TẠP CÁC NGUYÊN TỐ NHÓM III

Phạm Thị Bích Thảo\*, Trần Thị Ngọc Thảo và Nguyễn Thành Tiên

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: 04/03/2020

Ngày nhận bài sửa: 15/05/2020

Ngày duyệt đăng: 29/06/2020

## Title:

Study of electronic and transport properties of the sawtooth penta-graphene nanoribbon doping by group III elements

## Từ khóa:

Đặc tính điện tử, lý thuyết nhiễu loạn mật độ, penta-graphene nanoribbon, tính chất vận chuyển điện tử

## Keywords:

Density-functional theory, electronic properties, penta-graphene nanoribbon, transport properties

## ABSTRACT

In this work, electronic and transport properties of the sawtooth penta-graphene nanoribbon doping by boron (B), aluminium (Al), and gallium (Ga) 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, I-V curve and transmission spectrum of all samples are studied in detail. Our result shows that electronic and transport properties of the sawtooth penta-graphene nanoribbon not only depend on doped element but also doped position. Especially, all studied devices have the current intensity more than 8 orders compared to that of SSPGNR.

## TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, đặc tính điện tử và tính chất vận chuyển điện tử của penta-graphene nanoribbon dạng biên răng của pha tạp lần lượt boron (B), nhôm (Al), và gallium (Ga) tại hai 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, đặc tuyến I(V) và phổ truyền qua của tất cả các mẫu được nghiên cứu một cách chi tiết. Kết quả cho thấy đặc tính điện tử và tính chất vận chuyển điện tử của penta-graphene nanoribbon dạng biên răng của được pha tạp không những phụ thuộc vào nguyên tố được pha tạp mà còn phụ thuộc vào vị trí được pha tạp. Đặc biệt, tất cả các mô hình được khảo sát có cường độ dòng tăng gấp 8 lần so với penta-graphene nanoribbon dạng biên răng của thuần.

Trích dẫn: Phạm Thị Bích Thảo, Trần Thị Ngọc Thảo và Nguyễn Thành Tiên, 2020. Nghiên cứu đặc tính điện tử và tính chất vận chuyển điện tử của penta-graphene nanoribbon dạng biên răng của được pha tạp các nguyên tố nhóm III. Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ. 56(Số chuyên đề: Khoa học tự nhiên)(1): 157-166.

## 1 ĐẶT VẤN ĐỀ

Cho đến những năm giữa thế kỉ XX, hai dạng thù hình phổ biến của carbon trong tự nhiên được biết đến là kim cương và than chì. Mặc dù có nhiều ứng

dụng hữu ích trong các lĩnh vực khác nhau, kim cương có tính dẫn điện kém do chỉ tồn tại liên kết sp<sup>3</sup> nên không có electron tự do. Khác với kim cương, than chì chỉ có 2 trong 3 orbitalan p tạo liên

kết, một quỹ đạo không ghép đôi (quỹ đạo  $p_z$ ) có thể được sử dụng trong vận chuyển điện tử. Do đó, than chì là một chất dẫn điện tốt hơn nhiều so với kim cương. Năm 1970, một dạng cấu trúc 2D của than chì là graphene lần đầu được tổng hợp thành công trên bề mặt kim loại. Bằng sự phân tách pha tinh thể niken pha tạp carbon, Eizenberg and Blakely (1979) đã tạo ra được các lớp than chì đơn. Sau đó, lần lượt hai dạng thù hình mới của carbon là Buckminster Fullerenes được phát hiện bởi Richard Smalley và cộng sự vào năm 1984 (Kroto *et al.*, 1985) và ống nano carbon được Iijima phát hiện đầu năm 1991 (Iijima, 1991).

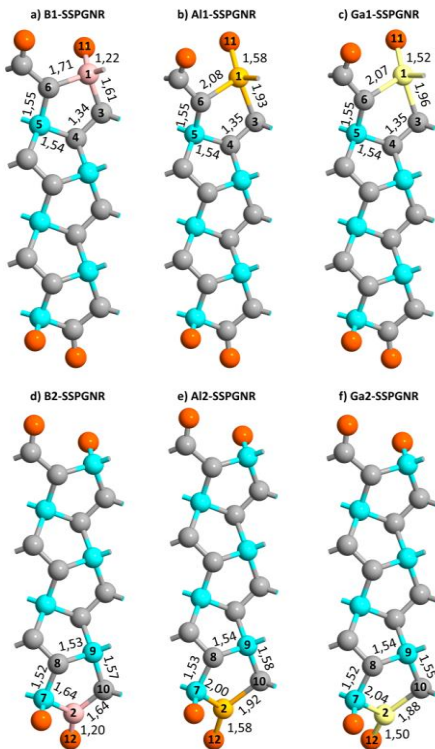
Nghiên cứu chuyên sâu về graphene, một vật liệu hai chiều (2D) bao gồm các nguyên tử carbon trong mạng lục giác tuần hoàn, bắt đầu từ năm 2004 (Novoselov *et al.*, 2004; Novoselov *et al.*, 2005). Cho đến nay, graphene là loại tinh thể mỏng nhất được biết với độ cứng cực lớn, độ đàn hồi và độ dẫn nhiệt vượt trội. Với cấu trúc hai chiều và diện tích bề mặt lớn (khoảng  $2675 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$ ), graphene có nhiều tính chất vật lý độc đáo. Không giống như tinh thể ba chiều, tất cả các nguyên tử trong graphene đều là các nguyên tử bề mặt, tức chúng có thể tham gia vào các phản ứng hóa học và các tương tác khác nhau. Trong những năm qua, nhiều nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm cho graphene đã được thực hiện. Cụ thể, bằng phương pháp hóa học việc tổng hợp graphene đơn lớp, đa lớp hay graphene nanoribbon trên đế kim loại đã được thực hiện (Bostwick *et al.*, 2009; Jiang, 2011; Batzill, 2012). Các tính chất điện tử, hóa học, từ tính và đặc tính điện hóa của graphene cũng được xem xét (Neto *et al.*, 2009; Wang *et al.*, 2010; Yazyev *et al.*, 2010; Molitor *et al.*, 2011; Rao *et al.*, 2012). Ngoài ra, vật liệu dựa trên graphene để chuyển đổi năng lượng mặt trời, quang xúc tác, điện cực pin lithium, điện tử lượng tử cũng như các cảm biến điện hóa và sinh học đã được phân tích (Dragoman *et al.*, 2009; Shao *et al.*, 2010; An *et al.*, 2011; Guo *et al.*, 2011; Sun *et al.*, 2011). Mặc dù có nhiều tính chất vật lý và hóa học tuyệt vời, graphene lại là một vật liệu không có vùng cấm, điều này gây khó khăn cho việc ứng dụng nó trong bóng bán dẫn hiệu ứng trường và các thiết bị điện tử khác.

Năm 2015, một dạng thù hình mới của carbon được dự đoán bởi Shunhong và cộng sự, gọi là

penta-graphene (Shunhong *et al.*, 2015). Penta-graphene thể hiện sự ổn định cơ học và động học ngay cả khi nhiệt độ đạt 1000 K. Thêm vào đó, penta-graphene hai chiều có độ rộng vùng cấm khoảng 3,25 eV, cao hơn so với các dạng thù hình khác của carbon (Shunhong *et al.*, 2015). Với các tính chất vật lý độc đáo, penta-graphene được dự đoán sẽ là ứng viên tiềm năng trong việc ứng dụng cho các thiết bị điện tử nano và điện tử quang học (Berdiorov *et al.*, 2016; Li *et al.*, 2018). Tương tự graphene, từ penta-graphene có thể tạo thành 4 loại penta-graphene nanoribbon khác nhau: penta-graphene nanoribbon dạng biên zig zắc (ZZPGNR), penta-graphene nanoribbon dạng biên aimchair (AAPGNR), penta-graphene nanoribbon dạng biên zig zắc aimchair (ZAPGNR) và penta-graphene nanoribbon dạng răng cưa (SSPGNR) (Yuan *et al.*, 2017). Việc khảo sát cấu trúc và đặc tính điện tử của bốn dạng penta-graphene nanoribbon nói trên cho thấy SSPGNR là cấu trúc bền nhất khi khảo sát năng lượng liên kết ở cùng độ rộng chuỗi và thể hiện đặc tính bán dẫn, trong khi các penta-graphene nanoribbon còn lại thể hiện đặc tính kim loại (Yuan *et al.*, 2017). Tuy nhiên, những nghiên cứu về hiện tượng vận chuyển của các penta-graphene nanoribbon còn rất hạn chế. Thêm vào đó, theo Tien *et al.* (2019), penta-graphene nanoribbon dạng biên răng cưa có cường độ dòng rất thấp nhưng cường độ dòng lại tăng mạnh (khoảng 8 bậc độ lớn) khi được pha tạp nitrogen (N) và phosphorus (P). Kết quả này là do N và P là các nguyên tố thuộc nhóm V của bảng tuần hoàn nên khi pha tạp vào SSPGNR sẽ tạo thành các mẫu N-SSPGNR và P-SSPGNR thể hiện đặc tính tương tự bán dẫn pha tạp loại n. Nhằm tiếp tục tìm ra những mẫu vật liệu dựa trên SSPGNR mới với những tính chất độc đáo, có nhiều tiềm năng ứng dụng trong các thiết bị điện tử, nghiên cứu này thực hiện việc khảo sát cấu trúc và đặc tính điện tử của mẫu SSPGNR pha tạp các nguyên tố nhóm III là boron (B), nhôm (Al) và gallium (Ga).

## 2 THIẾT LẬP MÔ HÌNH VÀ TÍNH TOÁN

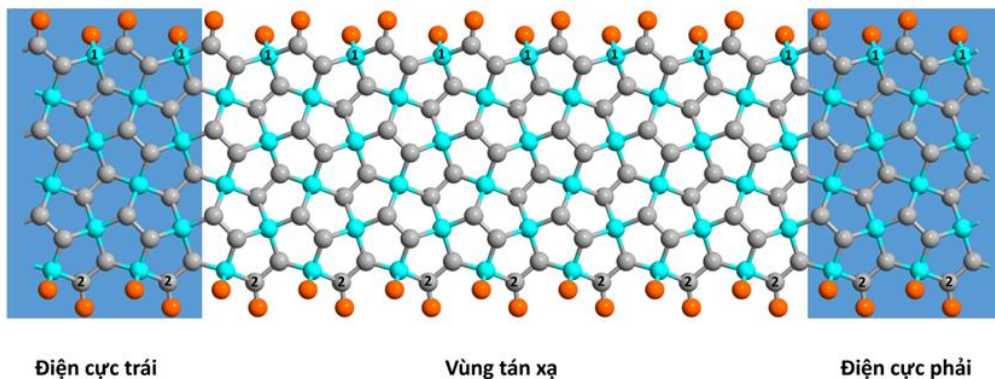
Hình cầu màu xám và màu xanh lần lượt tương ứng với các nguyên tử carbon lai hóa  $sp^2$  và  $sp^3$ . Hình cầu màu đỏ tương ứng với nguyên tố hydro. Các hình cầu màu hồng, cam và vàng lần lượt tương ứng với các nguyên tố B, Al và Ga



**Hình 1: Cấu trúc của các mẫu nghiên cứu sau khi tối ưu**

Từ cấu trúc penta-graphene 2D, cấu trúc penta-graphene nanoribbon dạng biên răng cưa (SSPGNR) được tạo ra. Tiếp theo, cấu trúc này được tối ưu qua phần mềm Atomistix ToolKit (ATK) (Taylor *et al.*, 2001; Brandbyge *et al.*, 2002) bằng phương pháp DFT sử dụng gần đúng gradient tổng quát của Perdew Burkner Ernzerhof (PBE) với điều kiện: k-point 1x1x21 và cutoff energy 780 eV. Cấu trúc SSPGNR đã tối ưu được pha tạp lần lượt các nguyên tố nhóm III: boron (B), nhôm (Al) và gallium (Ga) tại vị trí carbon lai hóa  $sp^3$  và  $sp^2$  với ký hiệu tương ứng như Hình 1: B1-SSPGNR, Al1-SSPGNR, Ga1-SSPGNR, B2-SSPGNR, Al2-SSPGNR và Ga2-SSPGNR. Sáu cấu trúc trên được tối ưu với cùng điều kiện như cấu trúc SSPGNR. Tất cả các cấu trúc khảo sát được thụ động hóa biên bằng hydro.

Mô hình linh kiện sử dụng các mẫu pha tạp được minh họa trong Hình 2 với điện cực trái và điện cực phải là những ô cơ sở bán vô hạn được lặp lại tuần hoàn theo trục z. Đặc tính điện tử và tính chất vận chuyển của các mẫu nghiên cứu được khảo sát bằng mô hình Hückel mở rộng trong phần mềm ATK (Taylor *et al.*, 2001; Brandbyge *et al.*, 2002) với số k-point 1x1x21 trong vùng Brillouin và cutoff energy 780 eV. Để tránh tương tác giữa các “ảnh” của cấu trúc, vùng chân không 15 Å được áp vào phương vuông góc với trục tịnh tiến của các mẫu nghiên cứu.



**Hình 2: Mô hình linh kiện sử dụng SSPGNR với các vị trí 1 và 2 là nơi pha tạp các nguyên tố B, Al và Ga**

Việc khảo sát đặc tính vận chuyển của SSPGNR pha tạp B, Al và Ga được thực hiện thông qua việc xác định hệ số truyền qua và dòng điện trong vùng tán xạ. Cụ thể như sau:

Từ phương trình Landauer Büttiker, cường độ dòng được xác định:

$$I(V_b) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E, V_b) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] dE \quad (1)$$

với  $T(E, V_b)$  là phổ truyền qua tại năng lượng  $E$  và thế  $V_b$  (Datta, 1997).

$$T(E, V_b) = Tr[\Gamma_L(E, V_b) G(E, V_b) \Gamma_R(E, V_b) G'(E, V_b)] \quad (2)$$

và hàm phân bố Fermi của thế hóa cho điện cực trái và điện cực phải tương ứng  $f(E - \mu_L)$ ,  $f(E - \mu_R)$ :

$$\begin{aligned} \mu_L &= E_F + eV_b/2 \\ \mu_R &= E_F - eV_b/2 \end{aligned} \quad (3)$$

$E_F$  là năng lượng Fermi tại điện thế bằng 0. Trong phương trình 2, hàm Green sớm và hàm Green trễ của vùng tán xạ được mô tả bởi  $G'$  và  $G$  trong khi hàm coupling từ điện cực trái và phải được ký hiệu  $\Gamma_{L/R}$ .

### 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:

$$E_B = \frac{(E_{total} - n_C E_C - n_H E_H - n_X E_X)}{n_C + n_H + n_X} \quad (4)$$

với  $E_{total}$  là năng lượng tổng cho mỗi “unit cell”;  $E_C$ ,  $E_H$  và  $E_X$  lần lượt là năng lượng riêng của các nguyên tử C, H và X (B, Al, Ga);  $n_C$ ,  $n_H$  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 B1-SSPGNR, Al1-SSPGNR, Ga1-SSPGNR, B2-SSPGNR, Al2-SSPGNR và Ga2-SSPGNR lần lượt

là -7,7 eV, -7,61 eV, -3,64 eV, -7,79 eV, -7,61 eV và -3,66 eV. Kết quả cho thấy, năng lượng liên kết khi SSPGNR được pha tạp cùng một nguyên tố ở các vị trí carbon lai hóa  $sp^3$  hay carbon lai hóa  $sp^2$  trong mẫu thuần có sự khác biệt không đáng kể. Ngoài ra, trong các mẫu được khảo sát mẫu SSPGNR pha tạp Al có độ bền cao nhất.

Bảng 1 cung cấp thông số về độ dài liên kết từ vị trí được pha tạp đến các nguyên tử hydro và carbon lân cận. Có thể nhận thấy, độ dài liên kết giữa các vị trí pha tạp đến các nguyên tử hydro hay carbon có sự thay đổi đáng kể, trong khi độ dài liên kết giữa các nguyên tử carbon khác gần như không đổi. Ngoài ra, độ dài liên kết còn phụ thuộc vào nguyên tố được pha tạp. Cụ thể, đối với các mẫu được pha tạp ở vị trí 1 (tương ứng với vị trí carbon lai hóa  $sp^3$  trong mẫu thuần), độ dài liên kết tăng dần theo thứ tự sau: B<sub>1</sub>H < Ga<sub>1</sub>H < Al<sub>1</sub>H. Kết quả thu được cũng tương tự khi pha tạp ở vị trí 2 (tương ứng với vị trí carbon lai hóa  $sp^2$  trong mẫu thuần). Độ dài liên kết từ nguyên tử pha tạp B đến các nguyên tử carbon lân cận trong cả hai trường hợp đều là nhỏ nhất, trong khi sự khác biệt giữa các mẫu được pha tạp Al và Ga là không đáng kể. So sánh với các độ dài liên kết tương ứng trong mẫu SSPGNR thuần (Tien *et al.*, 2019), tất cả các độ dài liên kết tính từ vị trí tạp đến nguyên tử hydro hay carbon lân cận đều tăng. Điều này là do độ dài liên kết phụ thuộc vào bán kính nguyên tử và sự lai hóa obitan.

**Bảng 1: Độ dài liên kết xung quanh các vị trí pha tạp của các mẫu nghiên cứu (tính bằng đơn vị Å). Ký hiệu M tương ứng với các nguyên tố B, Al, và Ga. Vị trí các nguyên tử được đánh số tương ứng ở Hình 1**

Mẫu Liên kết	B1-SSPGNR	Al1-SSPGNR	Ga1-SSPGNR	B2-SSPGNR	Al2-SSPGNR	Ga2-SSPGNR
M <sub>1</sub> H <sub>11</sub>	1,22	1,58	1,52	-	-	-
M <sub>1</sub> C <sub>3</sub>	1,61	1,93	1,96	-	-	-
C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	1,34	1,35	1,35	-	-	-
C <sub>4</sub> C <sub>5</sub>	1,54	1,54	1,54	-	-	-
C <sub>5</sub> C <sub>6</sub>	1,55	1,55	1,55	-	-	-
C <sub>6</sub> M <sub>1</sub>	1,71	2,08	2,07	-	-	-
M <sub>2</sub> H <sub>12</sub>	-	-	-	1,20	1,58	1,50
M <sub>2</sub> C <sub>7</sub>	-	-	-	1,64	2,00	2,04
C <sub>7</sub> C <sub>8</sub>	-	-	-	1,52	1,53	1,52
C <sub>8</sub> C <sub>9</sub>	-	-	-	1,53	1,54	1,54
C <sub>9</sub> C <sub>10</sub>	-	-	-	1,57	1,58	1,55
C <sub>10</sub> M <sub>2</sub>	-	-	-	1,50	1,92	1,88

Cấu trúc vùng của các mẫu nghiên cứu được trình bày trong Hình 3. Có thể thấy rõ, tất cả các mẫu SSPGNR pha tạp B, Al, và Ga đều thể hiện đặc tính kim loại do có một vùng con xuyên qua mức Fermi. Trong tất cả các mẫu khảo sát, mức Fermi đều dịch chuyển về vùng hóa trị và tương tác giữa nguyên tử

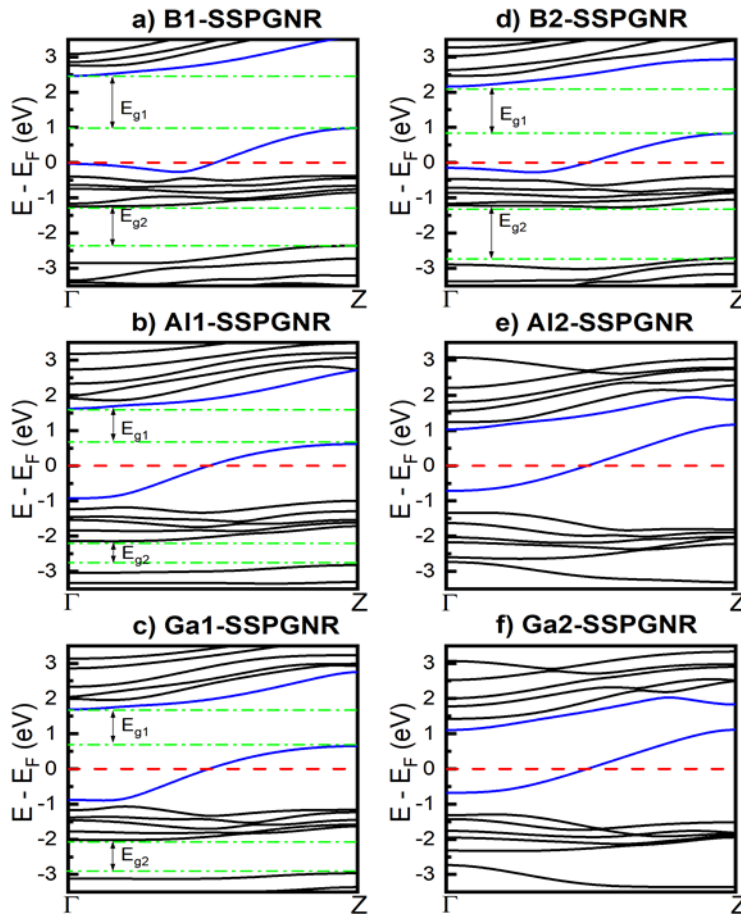
pha tạp với carbon dẫn đến những vùng con mới gần vùng dẫn so với mẫu SSPGNR thuần (Tien *et al.*, 2019). Điều này là do B, Al và Ga đều thuộc nhóm III với cùng số electron lớp ngoài cùng, vì vậy SSPGNR được pha tạp B, Al, Ga sẽ tương ứng với bán dẫn loại p. Mật độ trạng thái tổng trong Hình 4



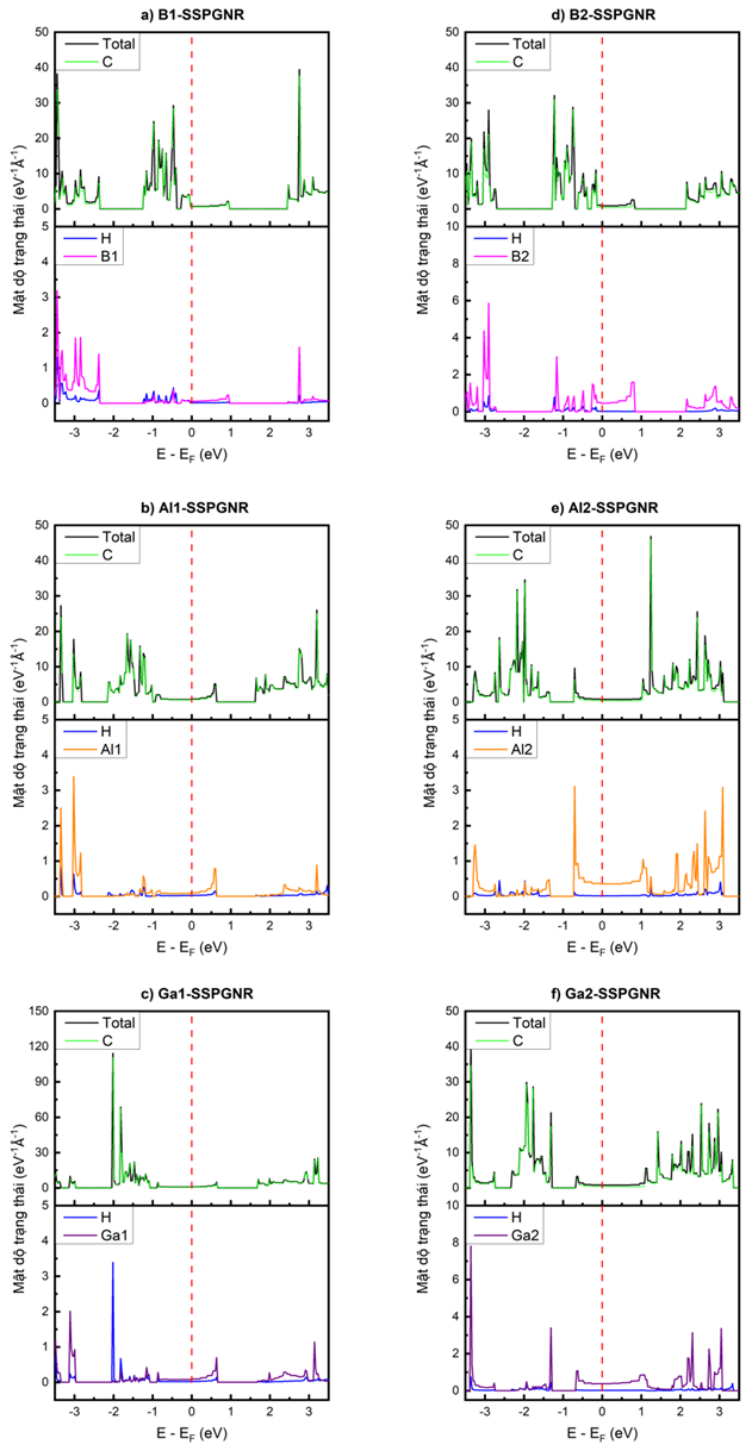
xác nhận sự có mặt của các trạng thái dưới mức Fermi. Một điểm đặc biệt là khi pha tạp B, Al, Ga tương ứng với vị trí carbon lai hóa  $sp^3$  trong mẫu thuần, cấu trúc vùng của B1-SSPGNR, Al1-SSPGNR, Ga1-SSPGNR xuất hiện hai khe năng lượng xiên quanh mức Fermi. Với mẫu B1-SSPGNR, hai khe năng lượng này gần mức Fermi hơn, gần như đối xứng qua mức Fermi và có giá trị xấp xỉ  $E_{g1} = 1,4$  eV và  $E_{g2} = 1,1$  eV. Kết quả trên tương đồng với kết quả nghiên cứu của Mausodi *et al.* (2019). Trong nghiên cứu này, mẫu graphene nanoribbon dạng biên armchair (AGNR) được pha tạp B, kết quả cho thấy B-AGNR cũng hình thành 2

khe năng lượng quanh mức Fermi. Tuy nhiên, B-AGNR thể hiện đặc tính bán dẫn. Đối với mẫu Al1-SSPGNR,  $E_{g1} (0,9$  eV) >  $E_{g2} (0,5$  eV) và Ga1-SSPGNR,  $E_{g1} \approx E_{g2} \approx 0,85$  eV. Cả hai mẫu này, vị trí khe năng lượng thứ 1 gần mức Fermi hơn so với vị trí khe năng lượng thứ 2.

Với ba mẫu được pha tạp ở vị trí carbon lai hóa  $sp^2$  trong mẫu thuần, sự hình thành hai khe năng lượng chỉ xuất hiện ở cấu trúc vùng của mẫu B2-SSPGNR, ngược lại ở cấu trúc vùng của Al2-SSPGNR và Ga2-SSPGNR không xuất hiện các khe năng lượng.



Hình 3: Cấu trúc vùng của các mẫu nghiên cứu



**Hình 4: Mật độ trạng thái tổng và mật độ trạng thái riêng của các mẫu nghiên cứu**

Kết quả khảo sát cấu trúc vùng đã cho thấy việc pha tạp B, Al và Ga vào SSPGNR sẽ làm thay đổi

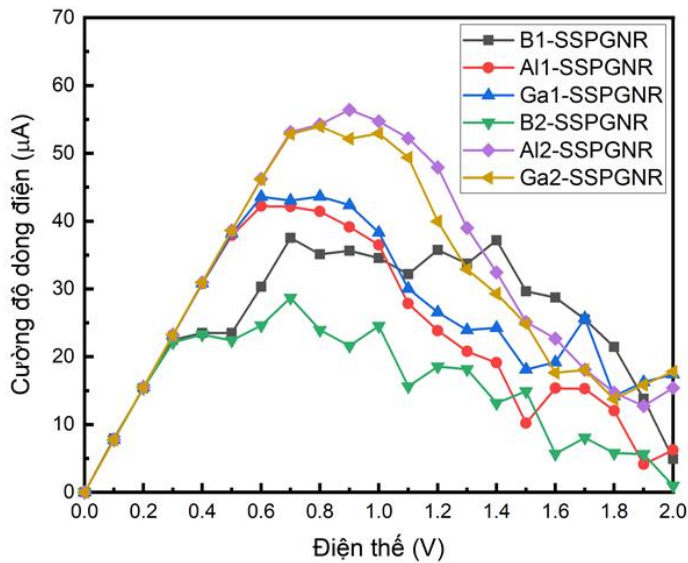
tính chất vận chuyển điện tử so với cấu trúc thuần. Để hiểu rõ thêm ảnh hưởng của pha tạp lên cấu trúc

vùng, chúng tôi tiến hành khảo sát mật độ trạng thái riêng (PDOS) của tất cả các mẫu nghiên cứu, kết quả được trình bày trong Hình 4. Có thể thấy rõ, mật độ trạng thái tổng được đóng góp chủ yếu bởi các nguyên tử carbon. Tuy nhiên, sự hiện diện của của các nguyên tử pha tạp (B, Al, Ga) đã làm thay đổi đặc tính điện tử của các mẫu. Cụ thể, so sánh với mẫu thuần (Tien *et al.*, 2019), ở đây có thêm sự xuất hiện của các trạng thái điện tử quanh mức Fermi. Do vậy, từ mẫu SSPGNR thuần ban đầu là bán dẫn có vùng cấm trực tiếp đã chuyển thành kim loại khi được pha tạp B, Al, và Ga. Ngoài ra, việc pha tạp các nguyên tố ở nhóm III, IV, V dẫn đến sự dịch chuyển mức Fermi và phân bố các vùng con là khác nhau.

**3.2 Tính chất vận chuyển điện tử**

Hình 5 mô tả phổ I(V) của B1-SSPGNR, Al1-SSPGNR, Ga1-SSPGNR, B2-SSPGNR, Al2-SSPGNR và Ga2-SSPGNR. Kết quả cho thấy, cường độ dòng điện trong tất cả các mẫu khảo sát tăng khoảng 8 bậc độ lớn so với mẫu thuần SSPGNR (Tien *et al.*, 2019). Đối với mẫu được pha tạp B ở vị trí carbon lai hóa sp<sup>3</sup> (B1-SSPGNR), giá trị cường độ dòng khi điện thế từ 0,5 V trở đi lớn hơn so với mẫu được pha tạp B ở vị trí cacbon lai hóa sp<sup>2</sup> (B2-SSPGNR). Trong khi đó, một xu hướng ngược lại khi xem xét giá trị cường độ dòng cho Al1-SSPGNR, Ga1-SSPGNR, Al2-SSPGNR và Ga2-SSPGNR. Cụ thể, cường độ dòng của cả bốn mẫu

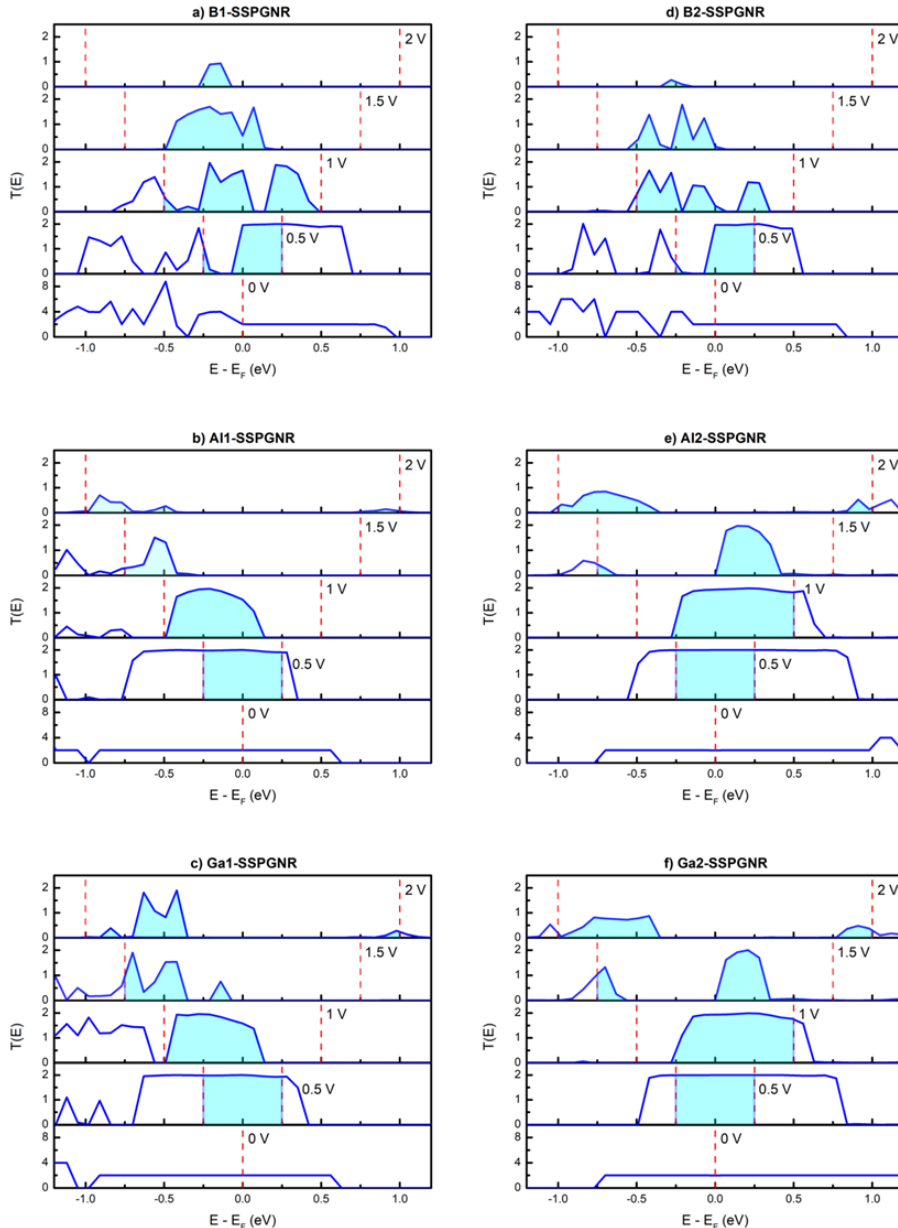
trên tăng tuyến tính như nhau khi điện thế thay đổi từ 0 đến 0,5 V. Sau đó, đạt cực đại 42 μA, 54 μA và 54 μA khi điện thế bằng 0,8 V, lần lượt cho Al1-SSPGNR, Ga1-SSPGNR, Ga2-SSPGNR. Cường độ dòng cực đại của Al2-SSPGNR quan sát được tại điện thế bằng 0,9 V là 57 μA. Sự gia tăng cường độ dòng của các mẫu SSPGNR được pha tạp Al và Ga tại vị trí carbon lai hóa sp<sup>2</sup> trong mẫu thuần là do khi pha tạp, độ dài liên kết từ hai nguyên tử này đến carbon số 10 thay đổi lần lượt từ 1,34 Å lên 1,92 Å và 1,88 Å. Điều này, có thể có hiện tượng chuyển từ liên kết π trong mẫu thuần thành liên kết ion trong mẫu pha tạp Al và Ga ở liên kết tạp. Theo qui tắc bát tử, điện tử linh động sẽ gia tăng, dẫn đến sự gia tăng cường độ dòng của hệ. Đối với các mẫu được pha tạp B ở hai vị trí carbon lai hóa sp<sup>3</sup> và carbon lai hóa sp<sup>2</sup>, cường độ dòng đạt giá trị cực đại lần lượt bằng 38 μA và 28 μA tại điện thế 0,7 V. Đối với hai mẫu pha tạp B, giá trị cường độ dòng của B1-SSPGNR lớn hơn so với của B2-SSPGNR bắt đầu từ điện thế 0,5 V. Bảng 1 cho thấy độ dài liên kết C<sub>10</sub>B<sub>2</sub> = 1,50 Å, nên liên kết này vẫn là liên kết pi (π), vì vậy xung quanh vị trí tạp trong mẫu B2-SSPGNR có liên kết (π) và liên kết sigma (σ), trong khi xung quanh nguyên tử B trong mẫu B1-SSPGNR chỉ tồn tại liên kết sigma (σ). Điều này dẫn đến sự linh động của điện tử trong mẫu B2-SSPGNR kém hơn so với B1-SSPGNR, kết quả là cường độ dòng trong mẫu B2-SSPGNR thấp hơn khi xét ở cùng một điện thế.



**Hình 5: Phổ I(V) của các mẫu nghiên cứu**

Để hiểu thêm về phổ  $I(V)$  của các hệ khảo sát, chúng tôi nghiên cứu phổ truyền qua theo điện thế công và năng lượng điện tử, kết quả thể hiện ở Hình 6. So với mẫu thuần SSPGNR (Tien *et al.*, 2019), ta có thể thấy rõ  $T(E)$  của tất cả các hệ được khảo sát có hệ số truyền qua lớn hơn khoảng 8 bậc độ lớn so với mẫu thuần. Điều này góp phần giải thích sự gia

tăng cường độ dòng của mẫu được pha tạp so với mẫu thuần. Ngoài ra, điện tích hình phẳng giới hạn bởi phổ truyền qua, trục hoành và điện thế giúp ta giải thích sự khác biệt trong đường cong cường độ dòng theo điện thế công cho từng điểm điện thế và cho các mẫu khác nhau.



**Hình 6: Phổ  $T(E)$  của các mẫu nghiên cứu**

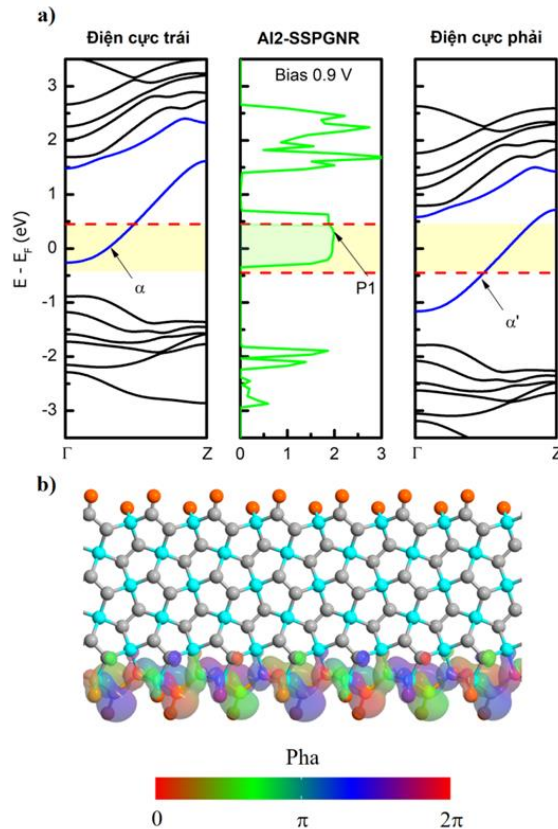
Để nghiên cứu sự hình thành của giá trị cường độ dòng cực đại, chúng tôi tiến hành phân tích phổ

truyền qua tại điện thế công tương ứng với giá trị đó cùng với cấu trúc vùng của mỗi điện cực. Bài báo



này tập trung nghiên cứu giá trị cường độ dòng cực đại của Al2-SSPGNR do sự ổn định và cường độ dòng vượt trội so với các mẫu còn lại. Hình 7a trình bày phổ truyền qua theo điện thế cổng và cấu trúc vùng của mỗi điện cực ở điện thế 0,9 V (giá trị điện thế cổng ứng với cường độ dòng cực đại của Al2-SSPGNR). Chúng ta thấy rằng cấu trúc vùng điện cực trái dịch chuyển xuống và cấu trúc vùng điện cực phải dịch chuyển lên, “vùng con” ( $\alpha$ ) của điện cực trái chồng chập “vùng con” ( $\alpha'$ ) của điện cực

phải. Điều này chứng minh điện tử được phép di chuyển giữa chúng và hệ số truyền qua có giá trị gần bằng 2 trong toàn điện thế cổng dẫn đến cường độ dòng của Al2-SSPGNR đạt cực đại tại điện thế cổng bằng 0,9 V. Trị riêng của Al2-SSPGNR ở 0,9 V (P1) được trình bày trong hình 7b. Ta có thể thấy, dòng điện địa phương xuất hiện chủ yếu ở biên của hệ và hàm sóng 3D với pha nhỏ hơn  $\pi$  rad chiếm ưu thế, tương ứng với sự chiếm ưu thế của tán xạ trước.



**Hình 7: Cấu trúc vùng điện cực trái, điện cực phải và phổ truyền qua của Al2-SSPGNR tại 0,9 V (a) và trạng thái tán xạ tại giá trị năng lượng tương ứng với “isovalue” bằng 0,02 (b)**

#### 4 KẾT LUẬN

Tóm lại, trong nghiên cứu này, đặc tính điện tử và tính chất vận chuyển điện tử của penta-graphene nanoribbon dạng biên răng cưa được pha tạp các nguyên tố nhóm III là B, Al, và Ga ở hai vị trí carbon lai hóa  $sp^3$  và  $sp^2$  đã được khảo sát chi tiết. Kết quả cho thấy tất cả các mẫu pha tạp đều thể hiện đặc tính kim loại với một vùng con xuyên qua mức Fermi. Đặc biệt, các mẫu khảo sát có cường độ dòng tăng 8 bậc độ lớn so với cường độ dòng của mẫu thuần. Ngoài ra, dạng của phổ  $I(V)$  không những phụ thuộc vào nguyên tố pha tạp mà còn phụ thuộc vào vị trí

pha tạp. Kết quả khảo sát phổ truyền qua hoàn toàn phù hợp với đặc tính  $I(V)$ . Với những đặc điểm nổi bật về cấu trúc và tính chất vận chuyển điện tử như trên, penta-graphene nanoribbon dạng biên răng cưa là một trong những ứng viên tiềm năng phù hợp cho ứng dụng trong các thiết bị điện tử nano.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

An, X., and Jimmy, C. Y., 2011. Graphene-based photocatalytic composites. RSC Advances. 1(8): 1426-1434.

- Batzill, M., 2012. The surface science of graphene: Metal interfaces, CVD synthesis, nanoribbons, chemical modifications, and defects. *Surface Science Reports*. 67(3-4): 83-115.
- Berdiyrov, G. R., Dixit, G., and Madjet, M. E., 2016. Band gap engineering in penta-graphene by substitutional doping: first-principles calculations. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 28(47): 475001.
- Bostwick, A., McChesney, J., Ohta, T., Rotenberg, E., Seyller, T., and Horn, K., 2009. Experimental studies of the electronic structure of graphene. *Progress in Surface Science*. 84(11-12): 380-413.
- Brandbyge, M., Mozos, J. L., Ordejón, P., Taylor, J., and Stokbro, K., 2002. Density-functional method for nonequilibrium electron transport. *Physical Review B*. 65: 165401.
- Datta, S., 1997. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press.
- Dragoman, M., and Dragoman, D., 2009. Graphene-based quantum electronics. *Progress in Quantum Electronics*. 33(6): 165-214.
- Eizenberg, M. and Blakely, J. M., 1979. Carbon monolayer phase condensation on Ni (111). *Surface Science*. 82(1): 228-236.
- Guo, C. X., Guai, G. H., and Li, C. M., 2011. Graphene based materials: enhancing solar energy harvesting. *Advanced Energy Materials*. 1(3): 448-452.
- Iijima, S., 1991. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*. 354(6348): 56-58.
- Jiang, H., 2011. Chemical preparation of graphene-based nanomaterials and their applications in chemical and biological sensors. *Small*. 7(17): 2413-2427.
- Kroto, H. W., Heath, J. R., O'Brien, S. C., Curl, R. F. and Smalley, R. E., 1985. C60: Buckminsterfullerene. *Nature*. 318(6042): 162-163.
- Landauer, R., 1988. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development*. 32(3): 306-316.
- Li, Y. H., Yuan, P. F., Fan, Z. Q. and Zhang, Z. H., 2018. Electronic properties and carrier mobility for penta-graphene nanoribbons with nonmetallic-atom-terminations. *Organic Electronics*. 59: 306-313.
- Molitor, F., Güttinger, J., Stampfer, C., *et al.*, 2011. Electronic properties of graphene nanostructures. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 23(24): 243201.
- Neto, A. C., Guinea, F., Peres, N. M., Novoselov, K. S. and Geim, A. K., 2009. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*. 81(1): 109.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., *et al.*, 2004. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*. 306(5696): 666-669.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S., *et al.*, 2005. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*. 438(7065): 197-200.
- Rao, C. N. R., Matte, H. R., Subrahmanyam, K. S., and Maitra, U., 2012. Unusual magnetic properties of graphene and related materials. *Chemical Science*. 3(1): 45-52.
- Shao, Y., Wang, J., Wu, H., Liu, J., Aksay, I. A., and Lin, Y., 2010. Graphene based electrochemical sensors and biosensors: a review. *Electroanalysis: An International Journal Devoted to Fundamental and Practical Aspects of Electroanalysis*. 22(10): 1027-1036.
- Shunhong, Z., Jian, Z., Qian, W., Xiaoshuang, C., Yoshiyuki, K., and Puru, J., 2015. Penta-graphene: A new carbon allotrope. *Radioelectronics. Nanosystems. Information Technologies*. 7(2): 191-207.
- Sun, Y., Wu, Q., and Shi, G., 2011. Graphene based new energy materials. *Energy & Environmental Science*. 4(4): 1113-1132.
- Taylor, J., Guo, H., and Wang, J., 2001. Ab initio modeling of quantum transport properties of molecular electronic devices. *Physical Review B*. 63: 245407.
- Tien, N. T., Thao, P. T. B., Phuc, V. T. and 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, M., and Li, C. M., 2010. Magnetism in graphene oxide. *New Journal of Physics*. 12(8): 083040.
- Yazyev, O. V., 2010. Emergence of magnetism in graphene materials and nanostructures. *Reports on Progress in Physics*. 73(5): 056501.
- Yuan, P. F., Zhang, Z. H., Fan, Z. Q. and Qiu, M., 2017. Electronic structure and magnetic properties of penta-graphene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 19(14): 9528-9536.