

DOI:10.22144/ctu.jvn.2022.094

# NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC VÀ TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ CỦA DÂY NANO P<sub>2</sub>C DẠNG NGŨ GIÁC BIÊN RĂNG CỬA BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG PHIẾM HÀM MẬT ĐỘ

Trần Yến Mi<sup>1\*</sup>, Nguyễn Lê Hoài Phương<sup>2</sup> và Nguyễn Thành Tiên<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Bộ môn Vật lý, Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

<sup>2</sup>Khoa Khoa học Cơ bản, Trường Đại học Tây Đô

\*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Trần Yến Mi (email: yenmi@ctu.edu.vn)

## Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 12/05/2022

Ngày nhận bài sửa: 24/05/2022

Ngày duyệt đăng: 26/05/2022

## Title:

Structural and electronic properties of p-P<sub>2</sub>C-SS: A DFT study

## Từ khóa:

Cấu trúc và tính chất điện tử, nanoribbon ngũ giác, p-P<sub>2</sub>C-SS

## Keywords:

Pentagonal nanoribbon, p-P<sub>2</sub>C-SS, structural and electronic properties

## ABSTRACT

By using DFT simulation method, we generate p-P<sub>2</sub>C-SS nanoribbon sample from two-dimensional pentagonal p-P<sub>2</sub>C model. This nanoribbon model has two sawtooth edges and their edge residual bonds are neutralized by H atoms. Its viability is confirmed by phonon scattering spectroscopy. Our result shows that the p-P<sub>2</sub>C-SS only exists if it is composed by at least 10 atomic lines. Due to quantum confinement effects, nanoribbon's band gap is larger than that of 2D material, and its spatial distribution of band edge states are also limited. P-P<sub>2</sub>C-SS model is a type of semiconductor material with indirect energy gap and non-magnetic.

## TÓM TẮT

Bằng phương pháp mô phỏng DFT, dây nano P<sub>2</sub>C dạng ngũ giác biên răng cửa (p-P<sub>2</sub>C-SS) được tạo ra bằng cách cắt tấm p-P<sub>2</sub>C ngũ giác hai chiều. Đây là dây nano có hai biên dạng răng cửa và các liên kết dư ở biên được trung hòa bởi các nguyên tử H. Khả năng tồn tại của cấu trúc được khẳng định thông qua phổ tán xạ phonon. Kết quả cho thấy rằng dây nano p-P<sub>2</sub>C-SS chỉ có thể tồn tại khi nó được tạo thành tối thiểu bởi 10 dây nguyên tử. Do ảnh hưởng của hiệu ứng giam cầm lượng tử nên khe năng lượng của dây nano lớn hơn so với trường hợp của cấu trúc hai chiều, và sự phân bố của các trạng thái điện tử lân cận mức Fermi theo không gian trong dây nano cũng bị giới hạn. Mẫu p-P<sub>2</sub>C-SS là loại vật liệu bán dẫn có khe năng lượng gián tiếp và không mang từ tính.

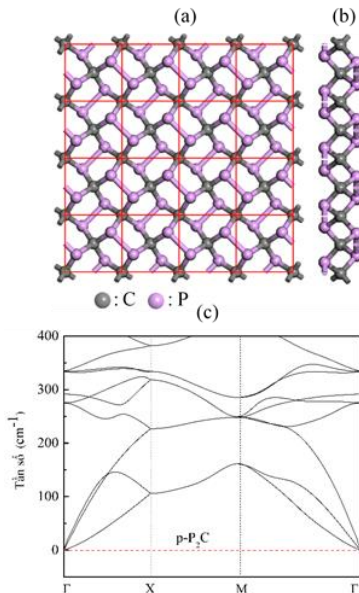
## 1. GIỚI THIỆU

Xuất phát từ sự bế tắc trong việc ứng dụng Graphene vào transistor và cảm biến khí, một số mẫu vật liệu ngũ giác mới đã được đề xuất thông qua phương pháp mô phỏng, chẳng hạn như Penta-graphene (PG) (Zhang et al., 2015; Zhuang, 2019), Pentagonal silicene-dicarbide (p-SiC<sub>2</sub>) (Lopez-Bezanilla & Littlewood, 2015; Tang et al., 2020), hay Penta-P<sub>2</sub>C (p-P<sub>2</sub>C) (Naseri et al., 2018; Sun et

al., 2019; Liu et al., 2020). Để cải thiện và làm tăng khả năng điều khiển tính chất điện tử của các mẫu này, các nhà khoa học đã lần lượt cắt chúng theo nhiều hướng khác nhau để tạo ra các dây nano có nhiều tính chất điện tử mới lạ (Rajbanshi et al., 2016; Li et al., 2018; Correa et al., 2020; ; Tien et al., 2020; Mi et al., 2020; Mi et al., 2021). Tuy nhiên, cho đến hiện tại thì vẫn chưa có một công bố nào cho thấy sự tồn tại và các đặc trưng điện tử của

dây nano được cắt ra từ p-P<sub>2</sub>C, đây là cơ sở để thực hiện bài nghiên cứu này.

Cụ thể, mục tiêu của nghiên cứu này là mô phỏng lại cấu trúc hai chiều p-P<sub>2</sub>C và khẳng định sự tồn tại của nó bằng phổ tán xạ phonon. Tiếp theo, mô hình 2D được cắt thành các dây nano p-P<sub>2</sub>C-SS có độ rộng khác nhau, nhưng chúng có cùng kiểu biên răng cưa, và các liên kết dư ở các biên đều được trung hòa bằng các nguyên tử H. Sau đó, các phổ tán xạ phonon của các dây nano lần lượt được khảo sát, kết quả thu được cho thấy điều kiện để mẫu có thể tồn tại là chứa tối thiểu 10 dây nguyên tử. Phần còn lại của quá trình nghiên cứu là so sánh tính chất điện tử giữa p-P<sub>2</sub>C và p-P<sub>2</sub>C-SS. Thông qua việc phân tích cấu trúc vùng năng lượng, sự phân bố mật độ trạng thái và sự phân bố theo không gian của các trạng thái điện tử tại lân cận mức Fermi, kết quả cho thấy rằng do hiệu ứng giam cầm lượng tử mà tính chất điện tử giữa hai loại vật liệu này có sự khác nhau rõ rệt, cụ thể là về khe năng lượng và sự phân bố trạng thái điện tử trong không gian. Đồng thời, nghiên cứu này cũng chứng tỏ được rằng p-P<sub>2</sub>C-SS là loại vật liệu bán dẫn có khe năng lượng gián tiếp và không mang từ tính.



**Hình 1. Cấu trúc hình học của p-P<sub>2</sub>C được nhìn theo phương vuông góc (a) và theo phương song song (b) với bề mặt của mẫu, (c) là phổ tán xạ phonon**

Các quả cầu màu xám và tím lần lượt đại diện cho các nguyên tử C và P. Mỗi ô vuông màu đỏ giới hạn một đơn vị cấu trúc của mô hình. Đường đứt nét màu đỏ ở hình (c) đại diện cho giá trị 0 của tần số, với  $\Gamma$ , X, và M là các điểm đối xứng cao trong không gian đảo.

## 2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Nghiên cứu này được thực hiện bằng phương pháp mô phỏng DFT thông qua phần mềm Atomistix ToolKit (ATK) (phiên bản 2017.1) (Smidstrup et al., 2019). Một số thông tin quan trọng về chương trình mô phỏng bao gồm: năng lượng tương quan trao đổi giữa các electron được dự đoán bằng phiếm hàm GGA/PBE (Perdew et al., 1996); bộ cơ sở plane wave; giả thế norm-conserving pseudopotential (Oliveira & Nogueira, 2008); lưới k-point Monkhorst-Pack (Monkhorst & Pack, 1976)  $3 \times 3 \times 1$  (đối với p-P<sub>2</sub>C) và  $1 \times 1 \times 27$  (đối với p-P<sub>2</sub>C-SS); điều kiện hội tụ để các hệ đạt trạng thái cân bằng đối với năng lượng, lực, độ dịch chuyển và áp suất lần lượt là  $10^{-6}$  eV/atom, 0,02 eV/Å, 0,001 Å và  $10^{-4}$  Gpa đối với p-P<sub>2</sub>C, và  $10^{-8}$  eV/atom, 0,02 eV/Å, 0,001 Å và  $2 \cdot 10^{-12}$  Gpa đối với p-P<sub>2</sub>C-SS. Bên cạnh đó, vùng chân không được dùng cho các mẫu theo hướng vuông góc bề mặt là khoảng 21 Å. Ngoài ra, cấu hình điện tử spin ban đầu được chọn cho p-P<sub>2</sub>C-SS để khảo sát từ tính của hệ.

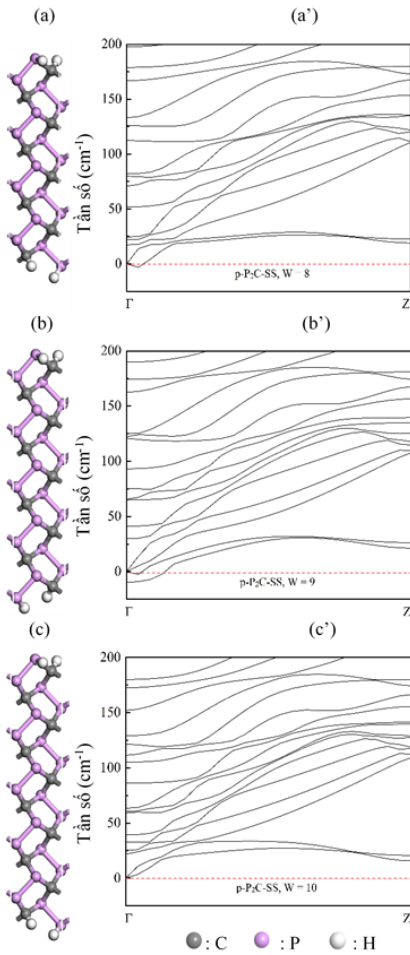
## 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

### 3.1. Cấu trúc hình học của p-P<sub>2</sub>C và p-P<sub>2</sub>C-SS

Bằng phương pháp mô phỏng DFT, p-P<sub>2</sub>C ngũ giác hai chiều được hình thành và trình bày như Hình 1(a) theo góc nhìn thẳng và Hình 1(b) theo góc nhìn song song với bề mặt của mẫu. Mô hình này thuộc nhóm đối xứng P-421m, với các hằng số mạng là  $a = b = 4,13$  Å. Mỗi đơn vị cấu trúc (được giới hạn bởi hình vuông màu đỏ) có 4 nguyên tử P và 2 nguyên tử C, với các chiều dài liên kết vào khoảng P – P = 2,28 Å và C – P = 1,89 Å (Sun et al., 2019). Ngoài ra, hình 1(b) cho thấy p-P<sub>2</sub>C được tạo thành bởi 2 lớp ngoài cùng chứa các nguyên tử P và lớp giữa còn lại chỉ bao gồm các nguyên tử C, do đó mẫu có độ gò gề (khoảng cách giữa hai lớp nguyên tử ngoài cùng) là khoảng  $h = 2,29$  Å. Khả năng tồn tại của p-P<sub>2</sub>C được khẳng định thông qua phổ tán xạ phonon, Hình 1(c), với bằng chứng là không tồn tại các tần số âm.

Từ mô hình trên, p-P<sub>2</sub>C lần lượt được cắt thành các dây nano p-P<sub>2</sub>C-SS. Các dây này có cùng đặc trưng là biên răng cưa (sawtooth-SS) và các liên kết dư tại biên được trung hòa bởi các nguyên tử H. Tuy nhiên, chúng có chiều rộng (W) khác nhau, mỗi chiều rộng được tính bằng tổng số dây nguyên tử, với mỗi dây nguyên tử tương ứng với một cặp nguyên tử P liên kết nhau. Hình 2(a), Hình 2(b) và Hình 2(c) cho thấy các dây nano p-P<sub>2</sub>C-SS với các chiều rộng lần lượt là  $W = 8, 9$  và  $10$ . Đồng thời, các

hình này cũng đại diện cho một đơn vị cấu trúc của mỗi loại dây nano tương ứng. Quan sát các Hình 2(a'), Hình 2(b') và Hình 2(c') lần lượt là các phổ tán xạ phonon tương ứng với mỗi dây nano ở Hình 2(a), Hình 2(b) và Hình 2(c), ta dễ dàng nhận thấy rằng các mẫu p-P<sub>2</sub>C-SS có biên W = 8 và 9 đều không có khả năng tồn tại do đã xuất hiện các tần số âm, ngoại trừ mẫu p-P<sub>2</sub>C-SS có W = 10. Do đó, W = 10 được tin tưởng là chiều rộng tối thiểu để có được vật liệu p-P<sub>2</sub>C-SS. Về các thông số cấu trúc của p-P<sub>2</sub>C-SS có W = 10, nó có các chiều dài liên kết không khác nhiều so với trường hợp của p-P<sub>2</sub>C, cụ thể là P – P = 2,27 Å và C – P = 1,88 Å và h = 2,30 Å.

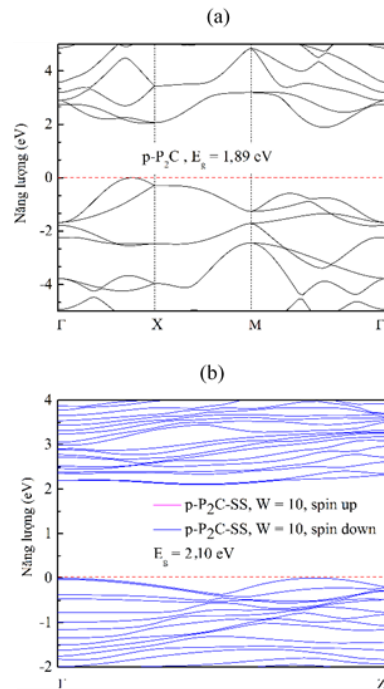


**Hình 2. Cấu trúc hình học của p-P<sub>2</sub>C-SS với các độ rộng lần lượt là W = 8, (a), W = 9, (b), W = 10, (c), với các phổ tán xạ phonon tương ứng được trình bày ở hình (a'), (b') và (c')**

Đường đứt nét màu đỏ ở các hình (a'), (b') và (c') đại diện cho giá trị 0 của tần số, với  $\Gamma$  và Z là các điểm đối xứng cao trong không gian đảo.

### 3.2. Tính chất điện tử của p-P<sub>2</sub>C-SS có W = 10

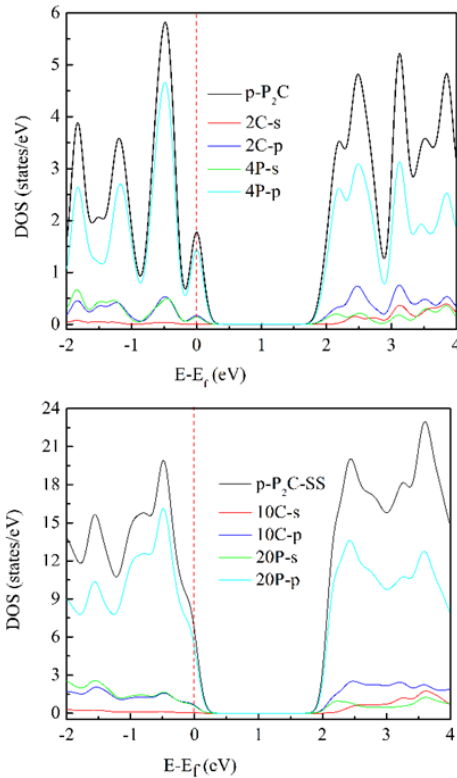
Để thấy được ảnh hưởng của kích thước lên tính chất điện tử của mô hình p-P<sub>2</sub>C-SS, lần lượt các cấu trúc vùng năng lượng, mật độ trạng thái và sự phân bố theo không gian của các trạng thái điện tử lân cận mức Fermi giữa mẫu ngũ giác hai chiều p-P<sub>2</sub>C và dây nano ngũ giác p-P<sub>2</sub>C-SS có W = 10 (từ đây về sau, p-P<sub>2</sub>C-SS có W = 10 được gọi là p-P<sub>2</sub>C-SS) được so sánh với nhau. Đầu tiên, Hình 3 cho thấy sự khác biệt về giá trị khe năng lượng giữa trường hợp p-P<sub>2</sub>C, Hình 3(a), có giá trị vào cỡ  $E_g = 1,89$  eV và trường hợp của p-P<sub>2</sub>C-SS, Hình 3(b), có giá trị vào cỡ  $E_g = 2,10$  eV, mặc dù chúng vẫn là loại bán dẫn có khe năng lượng gián tiếp, điều này hoàn toàn phù hợp với quy luật chung về mối quan hệ giữa kích thước và khe năng lượng của vật liệu nano nói chung (Rajbanshi et al., 2016). Ngoài ra, Hình 3(b) còn cho thấy p-P<sub>2</sub>C-SS là loại vật liệu không mang từ tính do có sự trùng lấp hoàn toàn giữa hai cấu trúc vùng năng lượng tương ứng với hai cấu hình spin, đây là một ưu điểm đặc biệt giúp chế tạo các loại linh kiện điện tử dựa vào p-P<sub>2</sub>C-SS mà không bị ảnh hưởng của từ trường.



**Hình 3. Cấu trúc vùng năng lượng của (a) p-P<sub>2</sub>C và (b) p-P<sub>2</sub>C-SS có W = 10**

Các đường cong màu xanh dương và màu tím trong hình (b) tương ứng với hai trạng thái spin của mẫu p-P<sub>2</sub>C-SS. Các chữ  $\Gamma$ , X, M và Z là các điểm đối xứng cao trong không gian đảo.

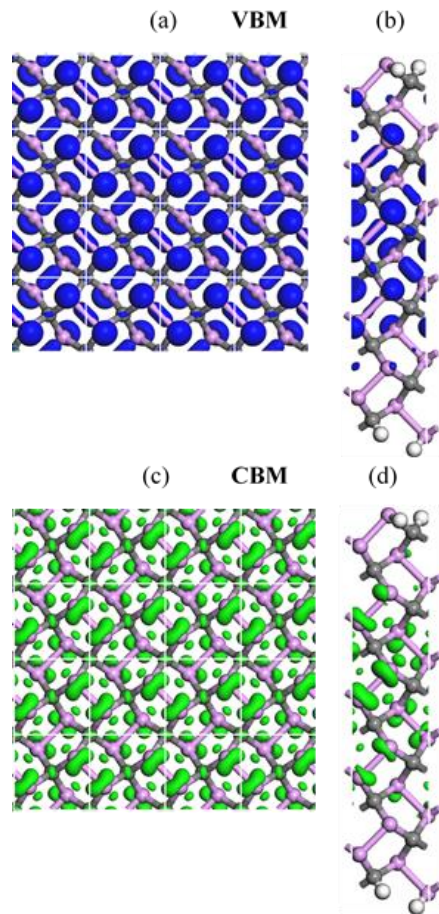
Hình 4 cho thấy sự phân bố các trạng thái điện tử tại các mức năng lượng lân cận mức Fermi của cả hai mô hình p-P<sub>2</sub>C, Hình 4(a), và p-P<sub>2</sub>C-SS, Hình 4(b). Do hiệu ứng giam cầm lượng tử diễn ra mạnh mẽ ở cấu trúc dây nên có sự khác biệt về đồ thị DOS giữa hai hình 4(a) và 4(b). Nhìn chung, trạng thái điện tử ứng với quỹ đạo p của các nguyên tử P luôn đóng vai trò chủ đạo cho tính chất điện tử của các mẫu. Do đó, chính loại trạng thái điện tử này cũng chịu sự thay đổi lớn khi có sự tăng cường của hiệu ứng giam cầm lượng tử, và sự thay đổi này đã tạo ra sự khác biệt về khe năng lượng giữa p-P<sub>2</sub>C và p-P<sub>2</sub>C-SS. Đây cũng là xu thế chung của các loại vật liệu ngũ giác khi chuyển từ cấu trúc hai chiều sang cấu trúc dây nano, trong khi thứ tự đóng góp của các loại trạng thái điện tử không đổi, thì chỉ xảy ra sự thay đổi ở mức năng lượng mà mỗi trạng thái đóng góp, từ đó làm thay đổi giá trị khe năng lượng.



**Hình 4: Sự phân bố mật độ trạng thái của (a) p-P<sub>2</sub>C và (b) p-P<sub>2</sub>C-SS có W = 10**

Cuối cùng, việc so sánh sự phân bố theo không gian của các trạng thái điện tử lân cận mức Fermi giữa mẫu p-P<sub>2</sub>C, Hình 5(a) và Hình 5(c), và p-P<sub>2</sub>C-SS, Hình 5(b) và Hình 5(d), được thực hiện, các quả bóng màu xanh dương và màu xanh lục lần lượt đại diện cho các quỹ đạo tương ứng với trạng thái điện tử ngay dưới mức Fermi (VBM- Valence Band

Maximum, mức năng lượng cao nhất trong vùng hóa trị) và ngay trên mức Fermi (CBM- Conduction Band Minimum, mức năng lượng thấp nhất trong vùng dẫn) của mỗi mẫu. Hình 5(b) và Hình 5(d) cho thấy sự phân bố trạng thái theo không gian này bị giới hạn tại hai biên của mô hình p-P<sub>2</sub>C-SS, trong khi chúng luôn trải đều trên toàn không gian của mô hình hai chiều. Đây là tính chất nổi bật của nhóm vật liệu dây nano ngũ giác p-P<sub>2</sub>C-SS so với một số nhóm còn lại, như của penta-graphene nanoribbon biên răng cưa (PGNR-SS) (Rajbanshi et al., 2016), hay penta-sicicene dicarbide biên răng cưa (p-SiC<sub>2</sub>-SS) (Mi et al., 2021). Điều này cho thấy khả năng hấp thụ có chọn lọc của p-P<sub>2</sub>C-SS nói chung.



**Hình 5. Phân bố theo không gian của các trạng thái điện tử lân cận mức Fermi**

(a) và (b) cho thấy sự phân bố trạng thái điện tử ngay dưới mức Fermi (VBM- Valence Band Maximum, mức năng lượng cao nhất trong vùng hóa trị), (c) và (d) cho thấy sự phân bố trạng thái điện tử ngay trên mức Fermi (CBM- Conduction Band Minimum, mức năng lượng thấp nhất trong vùng dẫn)

#### 4. KẾT LUẬN

Thông qua phương pháp mô phỏng DFT, mô hình ngũ giác hai chiều p-P<sub>2</sub>C có các thông số kích thước và tính chất điện tử phù hợp với các kết quả nghiên cứu trước đó đã được xây dựng. Từ đây, p-P<sub>2</sub>C được cắt theo hướng phù hợp để tạo nên các dây nano ngũ giác p-P<sub>2</sub>C-SS có cùng biên răng cưa, có các liên kết dư tại biên được trung hòa bởi các nguyên tử H nhưng với các độ rộng khác nhau. Việc phân tích phổ tán xạ phonon của các dây nano, cho thấy một trong các điều kiện để loại vật liệu dây nano p-P<sub>2</sub>C-SS tồn tại là độ rộng tối thiểu phải bằng 10 dây nguyên tử. Tiếp tục so sánh và phân tích tính chất điện tử giữa p-P<sub>2</sub>C và p-P<sub>2</sub>C-SS cho thấy rằng chúng vẫn là loại vật liệu bán dẫn có khe năng lượng gián tiếp, nhưng độ rộng khe đã tăng lên khi mẫu chuyển từ cấu trúc hai chiều sang cấu trúc dây. Đặc biệt, kết quả nghiên cứu chỉ ra rằng p-P<sub>2</sub>C-SS là loại bán dẫn không mang từ tính, điều này tạo nên một lợi thế to lớn cho việc chế tạo các linh kiện điện tử

dựa trên cấu trúc p-P<sub>2</sub>C-SS khi hoạt động dưới ảnh hưởng của từ trường.

Ngoài ra, kết quả nghiên cứu cũng cho thấy chính trạng thái điện tử tương ứng với quỹ đạo p của các nguyên tử P trong cả hai loại mẫu đã quyết định tính chất điện tử của hệ. Đồng thời, chính hiệu ứng giam cầm lượng tử làm dịch chuyển sự phân bố trạng thái này theo năng lượng, từ đó làm cho khe năng lượng trong p-P<sub>2</sub>C-SS lớn hơn so với trường hợp của p-P<sub>2</sub>C. Cuối cùng, khả năng hấp thụ có chọn lọc nổi bật của p-P<sub>2</sub>C-SS khi sự phân bố theo không gian của các trạng thái điện tử tại lân cận mức Fermi chỉ tập trung chủ yếu vào vùng không gian giữa của dây nano được chỉ ra. Tóm lại, qua sự phân tích trên, p-P<sub>2</sub>C-SS được hứa hẹn là loại vật liệu giúp tạo ra các cảm biến khí có hiệu suất cao và hoạt động tốt trong môi trường từ tính.

#### LỜI CẢM ƠN

Đề tài này được tài trợ bởi Trường Đại học Cần Thơ, Mã số: T2022-33.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Correa, J. D., Pacheco, M., Bravo, S., & Chico, L. (2020). Electronic and magnetic properties of pentagonal nanoribbons, *Carbon*, 162, 209-219.  
Doi: 10.1016/j.carbon.2020.02.037
- Li, Y. H., Yuan, P. F., Fan, Z. Q., & Zhang, Z. H. (2018). Electronic properties and carrier mobility for penta-graphene nanoribbons with nonmetallic-atom-terminations. *Organic Electronics*, 59, 306-313.  
Doi: 10.1016/j.orgel.2018.05.039
- Liu, X., Ouyang, T., Zhang, D., Huang, H., Wang, H., Wang, H., & Ni, Y. (2020). First-principles calculations of phonon transport in two-dimensional penta-X<sub>2</sub>C family. *Journal of Applied Physics*, 127(20), 205106.  
Doi: 10.1063/5.0004904
- Lopez-Bezanilla, A., & Littlewood, P. B. (2015).  $\sigma$ - $\pi$ -band inversion in a novel two-dimensional material. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119(33), 19469-19474.  
Doi: 10.1021/acs.jpcc.5b04726
- Mi, T. Y., Triet, D. M., & Tien, N. T. (2020). Adsorption of gas molecules on penta-graphene nanoribbon and its implication for nanoscale gas sensor. *Physics Open*, 2, 100014.  
Doi: 10.1016/j.physo.2020.100014
- Mi, T. Y., Khanh, N. D., Ahuja, R., & Tien, N. T. (2021). Diverse structural and electronic properties of pentagonal SiC<sub>2</sub> nanoribbons: A first-principles study. *Materials Today Communications*, 26, 102047.  
Doi: 10.1016/j.mtcomm.2021.102047
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical review B*, 13(12), 5188.  
Doi: 10.1103/PhysRevB.13.5188
- Naseri, M., Lin, S., Jalilian, J., Gu, J., & Chen, Z. (2018). Penta-P<sub>2</sub>X (X= C, Si) monolayers as wide-bandgap semiconductors: A first principles prediction, *Frontiers of Physics*, 13(3), 1-9.  
Doi: 10.1007/s11467-018-0758-2
- Oliveira, M. J., & Nogueira, F. (2008). Generating relativistic pseudo-potentials with explicit incorporation of semi-core states using APE, the Atomic Pseudo-potentials Engine. *Computer Physics Communications*, 178(7), 524-534.  
Doi: 10.1016/j.cpc.2007.11.003
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865.
- Rajbanshi, B., Sarkar, S., Mandal, B., & Sarkar, P. (2016). Energetic and electronic structure of penta-graphene nanoribbons, *Carbon*, 100, 118-125.  
Doi: 10.1016/j.carbon.2016.01.014
- Smidstrup, S., Markussen, T., Vancraeyveld, P., Wellendorff, J., Schneider, J., Gunst, T., Verstichel, B., Stradi D., Khomyakov P. A, Vej-Hansen, U. G., Lee M. E., Chill S. T, Rasmussen F., Penazzi G., Corsetti F., Ojanperä A., Jensen K., Palsgaard M. L N, Martinez U., Blom A., Brandbyge M., & Stokbro, K. (2019). QuantumATK: an integrated platform of

- electronic and atomic-scale modelling tools. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 32(1), 015901.  
Doi: 10.1088/1361-648X/ab4007
- Sun, S., Meng, F., Xu, Y., He, J., Ni, Y., & Wang, H. (2019). Flexible, auxetic and strain-tunable two dimensional penta-X2C family as water splitting photocatalysts with high carrier mobility. *Journal of Materials Chemistry A*, 7(13), 7791-7799.  
Doi: 10.1039/C8TA12405A
- Tang, L., Cheng, M. Q., Chen, Q., Huang, T., Yang, K., Huang, W. Q., Hu, W., & Huang, G. F. (2020). Ultrahigh sensitivity and selectivity of pentagonal SiC<sub>2</sub> monolayer gas sensors: The synergistic effect of composition and structural topology. *Physica Status Solidi (b)*, 257(3), 1900445.  
Doi: 10.1002/pssb.201900445
- 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.  
Doi: 10.1016/j.jpcs.2020.109528
- 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.  
Doi: 10.1073/pnas.1416591112
- Zhuang, H. L. (2019). From pentagonal geometries to two-dimensional materials. *Computational Materials Science*, 159, 448-453.  
Doi: 10.1016/j.commatsci.2018.12.041