

DOI:10.22144/ctu.jvn.2023.095

NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC ĐIỆN TỬ CỦA DÂY PENTA-SILICENE ĐƠN LỚP BẰNG PHƯƠNG PHÁP PHIẾM HÀM MẬT ĐỘ DỰA TRÊN LIÊN KẾT MẠNH

Lê Thị Thuý My¹, Hồ Quốc Duy², Ca Nguyễn Anh Khoa³, Trương Quốc Tuấn⁴, Trương Anh Quân⁵ và Huỳnh Anh Huy^{6*}

¹Khoa Khoa học cơ bản, Đại học Sư phạm Kỹ thuật Vĩnh Long

²Khoa Kỹ thuật Cơ khí, Đại học Kỹ thuật Công nghệ Cần Thơ

³THPT Hoàng Thái Hiếu, Vĩnh Long

⁴Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

⁵THPT Bình Thạnh Đông, An Giang

⁶Bộ môn Sư phạm Vật lý, Khoa Sư phạm, Trường Đại học Cần Thơ

*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Huỳnh Anh Huy (email: hahuy@ctu.edu.vn)

Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 15/02/2023

Ngày nhận bài sửa: 03/03/2023

Ngày duyệt đăng: 06/03/2023

Title:

Study of electronic structure of the penta-graphene nanoribbons

Từ khóa:

Cấu trúc điện tử, mô phỏng động lực học phân tử, penta-silicene, phương pháp DFTB

Keywords:

DFTB method, electronic structure, molecular dynamics simulation, penta-silicene

ABSTRACT

We use density functional theory based on tight-binding (DFTB) to study the electronic structure of penta-silicene nanoribbons with different bandwidths. The penta-silicene series created by cutting from the penta-silicene film after relaxing, we obtain four types of edges: sawtooth (SS), zigzag - zigzag (ZZ), armchair - armchair (AA), zigzag - armchair (ZA). However, penta-silicene is not stable. The kinetic stability of penta-silicene is restored by hydrogen bonding to the surface. The results of the boundary energy calculations showed that forming a penta-silicene series from the 2D film is potential. In addition, the binding energy calculation shows that the SS boundary form has the most stable structure. The electronic structure of penta-silicene was checked and found that all boundary forms have band gaps, and as the band-width increases, the band gap decreases.

TÓM TẮT

Lý thuyết phiếm hàm mật độ dựa trên liên kết mạnh (DFTB) được sử dụng để nghiên cứu cấu trúc điện tử của dây penta-silicene với độ rộng dây khác nhau. Dây penta-silicene tạo ra bằng cách cắt từ màng penta-silicene sau khi hồi phục, bốn loại biên thu được gồm: răng cưa (SS), zigzag - zigzag (ZZ), armchair - armchair (AA), zigzag - armchair (ZA). Tuy nhiên, penta-silicene không ổn định. Sự ổn định động học của penta-silicene được khôi phục lại bằng cách gắn Hidro lên bề mặt. Qua kết quả tính toán năng lượng biên, việc hình thành dây penta-silicene từ màng 2D là khả thi. Thêm vào đó, dựa trên tính toán năng lượng liên kết, dạng biên SS có cấu trúc ổn định nhất. Cấu trúc điện tử của penta-silicene cũng được nghiên cứu, kết quả là tìm thấy được tất cả dạng biên đều tồn tại vùng cấm và khi độ rộng dây tăng lên thì độ rộng vùng cấm giảm.

1. GIỚI THIỆU

Sau khi tìm thấy vật liệu 2 chiều (2D) graphene vào năm 2004 (Li et al., 2015) thì vật liệu này trở thành chủ đề quan tâm của các nhà nghiên cứu khoa học. Tuy graphene được nhận định là vật liệu mỏng nhất, cứng nhất có thể đo được lúc ấy (Geim, 2009) nhưng graphene không tồn tại vùng cấm (Novoselov et al., 2016; Rajbanshi et al., 2016). Khi đó, một vật liệu 2D khác được tìm thấy và được đặt nhiều kì vọng đó là silicene bởi vì nó có thể tương thích với công nghệ bán dẫn dựa trên silicon (Gao et al., 2013). Thế nhưng, một lần nữa, silicene cũng không tồn tại vùng cấm (Cahangirov et al., 2009; Qiao et al., 2017). Đó là một hạn chế lớn đối với silicene về mặt ứng dụng. Các phương pháp để cải thiện độ rộng vùng cấm của silicene đã được áp dụng và mang lại hiệu quả như: chức hóa bề mặt silicene bằng nguyên tử Hydro (H), Flo (F) và nhóm CH₃ [8]; áp điện trường ngoài (Drummond et al., 2012; Zaminpayma & Nayebi, 2016). Gần đây, phương pháp tìm dạng cấu trúc khác của silicene cũng là hướng đi mới và đã đạt được kết quả như kì vọng. Hai dạng cấu trúc khác của silicene đã được khảo sát đó là tetrasilicene (vòng bốn) có độ rộng vùng cấm 0,19 eV (Qiao et al., 2017) và penta-silicene (vòng năm) có độ rộng vùng cấm 0,57 eV (Wu et al., 2019). Đồng thời, cấu trúc vòng chẵn là dạng thường gặp, trong khi đó cấu trúc vòng năm là dạng hiếm gặp vì thế cấu trúc này càng gây hứng thú cho các nhà nghiên cứu (Wu et al., 2019). Penta-silicene đã được khảo sát về mặt cấu trúc màng, tính chất điện tử nhưng chưa có nghiên cứu nào khảo sát chi tiết về cấu trúc và tính chất của dây penta-silicene. Vì thế, việc nghiên cứu nhằm mục đích tìm hiểu các dạng dây nano có thể tạo được từ màng cũng như tính chất điện tử của chúng.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ dựa trên liên kết mạnh (DFTB) là phương pháp gần đúng hóa học lượng tử bắt nguồn từ lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) dựa vào khai triển bậc hai của biểu thức tổng năng lượng DFT. Bằng cách chọn mật độ tham chiếu ρ_0 như một sự chôn chắt của mật độ nguyên tử trung hòa ρ_0^α , với $\rho_0 = \sum_\alpha \rho_0^\alpha$, kết quả nhận được

$$E^{DFT}[\rho(\vec{r})] = \sum_i^{occ} \langle \psi_i | \hat{H}^0 | \psi_i \rangle + \frac{1}{2} \iint \left(\frac{1}{|\vec{r}' - \vec{r}|} + \frac{\delta^2 E_{xc}}{\delta \rho(\vec{r}) \delta \rho(\vec{r}')} \right) \delta \rho(\vec{r}) \delta \rho(\vec{r}') d^3 \vec{r} d^3 \vec{r}' \quad (1)$$

$$+ E_{\alpha\beta} + E_{xc}[\rho_0(\vec{r})] - \int V_{xc}[\rho_0(\vec{r})] \rho_0(\vec{r}) - \frac{1}{2} \iint \frac{\delta \rho(\vec{r}) \delta \rho(\vec{r}')}{|\vec{r}' - \vec{r}|} d^3 \vec{r} d^3 \vec{r}'.$$

Số hạng đầu tiên trong biểu thức (1) là năng lượng cấu trúc dây

$$E_{BS} = \sum_i^{occ} \langle \psi_i | \hat{H}^0 | \psi_i \rangle.$$

Số hạng thứ hai trong biểu thức (1) là hiệu chỉnh bậc hai E_{2nd} . Trong DFTB, dao động mật độ gần đúng như dao động điện tích Δq_α trên nguyên tử α

$$\Delta q_\alpha = q_\alpha - q_\alpha^0$$

Trong đó, q_α^0 là số lượng electron hóa trị cho một nguyên tử trung hòa, $q_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} (C_\mu^* C_\nu - C_\nu^* C_\mu) S_{\mu\nu}$ là mật độ Mulliken của nguyên tử α .

Tạm thời bỏ qua số hạng $\delta^2 E_{xc} / \delta \rho(\vec{r}) \delta \rho(\vec{r}')$, khi đó số hạng thứ hai có dạng

$$E_{2nd} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} \Delta q_\alpha \Delta q_\beta$$

Bốn số hạng cuối cùng trong biểu thức (1) được gọi chung là năng lượng dây vì số hạng lực đẩy ion-ion. Trong DFTB, thuật ngữ này được tính gần đúng bằng tổng của các điện thế cặp được gọi là thuật ngữ năng lượng dây

$$E_{rep} = \sum_{\alpha \neq \beta} V_{\alpha\beta}^{rep} [\vec{R}_{\alpha\beta}].$$

Số hạng này hoặc được xác định bằng cách so sánh với các tính toán DFT hoặc phù hợp với dữ liệu thực nghiệm. Khi đó, tổng năng lượng

$$E^{DFTB}[\rho(\vec{r})] = E_{BS} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} \Delta q_\alpha \Delta q_\beta + E_{rep}. \quad (2)$$

Các trạng thái riêng một electron của hệ thống ψ_i được mở rộng trong sự kết hợp tuyến tính của các quỹ đạo nguyên tử (LCAO) $\{\phi_\nu\}$ tập trung vào các vị trí nguyên tử \vec{R}_A

$$\psi_i = \sum C_{\mu i} \phi_\mu(\vec{r} - \vec{R}_\alpha), \quad (3)$$

c_{vi} là các hệ số biến thiên giảm thiểu năng lượng. Việc mở rộng LCAO biến đổi (2) trong một hệ thống đại số cho các hệ số biến thiên

$$\sum_v C_{vi} (H_{\mu v} - \epsilon_i S_{\mu v}) = 0. \quad (4)$$

Trong đó, $H_{\mu v} = H_{\mu v}^0 + \frac{1}{2} S_{\mu v} \sum_{\alpha, \beta} (\gamma_{\alpha \zeta} + \gamma_{\beta \zeta}) \Delta q_{\zeta}$

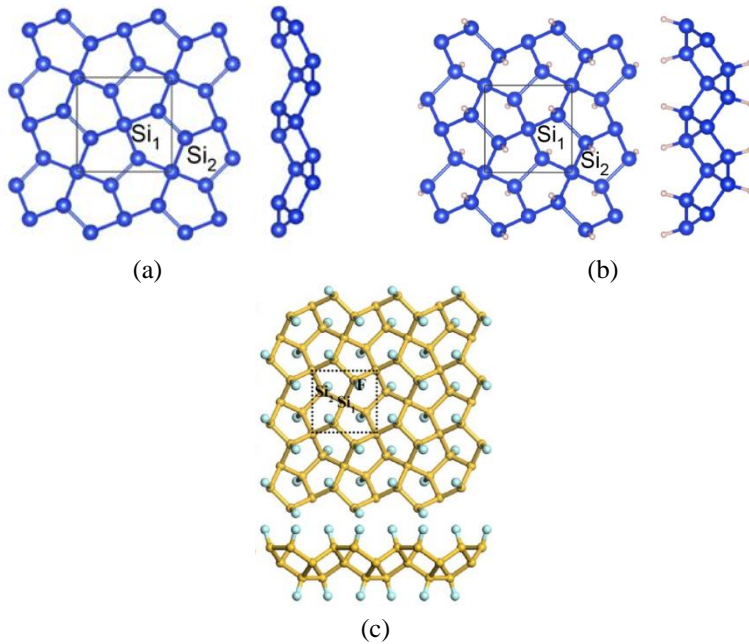
và

$$H_{\mu v}^0 = \langle \phi_{\mu} | \hat{H}_0 | \phi_{\nu} \rangle = \begin{cases} \epsilon_{\mu}^{\text{nguyên tử tự do trung hòa}} & \mu = \nu \in A \\ \langle \phi_{\mu}^{\alpha} | \hat{H}_0 | \phi_{\mu}^{\beta} \rangle & \alpha \neq \beta \\ 0 & \text{còn lại} \end{cases} \quad (5)$$

$S_{\mu v} = \langle \phi_{\mu} | \phi_{\nu} \rangle$ là ma trận chéo hóa. Các phần tử ma trận Hamilton phụ thuộc vào điện tích Mulliken q_{α} mà lần lượt phụ thuộc vào các hệ số quỹ đạo phân tử C_{vi} , do đó các phương trình này phải được giải tự nhất quán.

Màng penta-silicene có cấu trúc ngũ giác với ô cơ sở gồm sáu nguyên tử Si, trong đó có hai nguyên tử Si phối vị 4 (Si_1) và bốn nguyên tử Si phối vị 3 (Si_2) như Hình 1a.

Màng penta-silicene không tồn tại cấu trúc phẳng mà có dạng buckling với hai nguyên tử Si_2 lệch về phía dưới và hai nguyên tử Si_2 lệch về phía trên so với mặt phẳng chứa các nguyên tử Si_1 , độ buckling theo mỗi hướng có giá trị 1 Å. Độ dài liên kết giữa các cặp Si_1-Si_2 và Si_2-Si_2 có giá trị lần lượt là 2.36 Å và 2.24 Å và góc liên kết $Si_1-Si_2-Si_2 = 111^{\circ}$ và $Si_1-Si_2-Si_1 = 112^{\circ}$ (Ding & Wang, 2015). Tuy nhiên, các nghiên cứu trước nhận định màng penta-silicene không ổn định nên đã có một số nghiên cứu tiến hành gắn Hydro như Hình 1b (Ding & Wang, 2015) hoặc gắn Flo như Hình 1c (Wu et al., 2019) lên nguyên tử Si_2 để tăng tính ổn định của màng. Dây nano của penta-silicene được tạo ra từ việc cắt màng theo hướng khác nhau để thu được các dây với dạng biên khác nhau.



Hình 1. Cấu trúc của màng penta-silicene (a), cấu trúc màng penta-silicene gắn Hydro (b), cấu trúc màng penta-silicene gắn Flo (c)

Mô phỏng trong nghiên cứu này được thực hiện trên phần mềm DFTB+ với ưu điểm có thể tính cho hệ cấu trúc lớn và thời gian mô phỏng dài.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Cấu trúc của màng penta-silicene

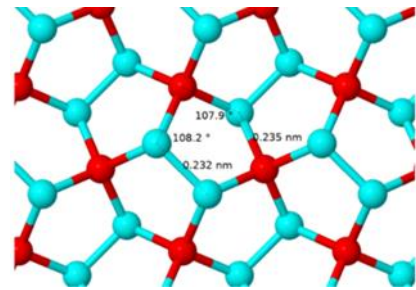
Dựa vào các thông số đề cập phía trên, chúng tôi tạo nên cấu trúc màng penta-silicene ban đầu và sau

đó dùng DFTB+ chạy hồi phục thu được cấu trúc. Cấu trúc của màng được thể hiện trong Hình 2 và Bảng 1. Thông số cấu trúc trước và sau hồi phục của màng penta-silicene.

Để tạo các dây penta-silicene (pSiNRs), màng được cắt theo hai hướng [100] và [010] như Hình 3a. Với hướng [010], 2 loại biên thu được là zigzag (Z), armchair (A) và tương ứng thu được 3 loại dây

zigzag- zigzag (ZZ), zigzag-armchair (ZA), armchair-armchair (AA) trong Hình 3b – d; hướng [100], kết quả thu được là dạng biên răng cưa (S) với dây SS như Hình 3e. Độ rộng của dây được kí hiệu là ω được tính bằng tổng số chuỗi và đường dimer đối với dây ZZ, ZA, AA và tính bằng số chuỗi răng cưa đối với dây SS.

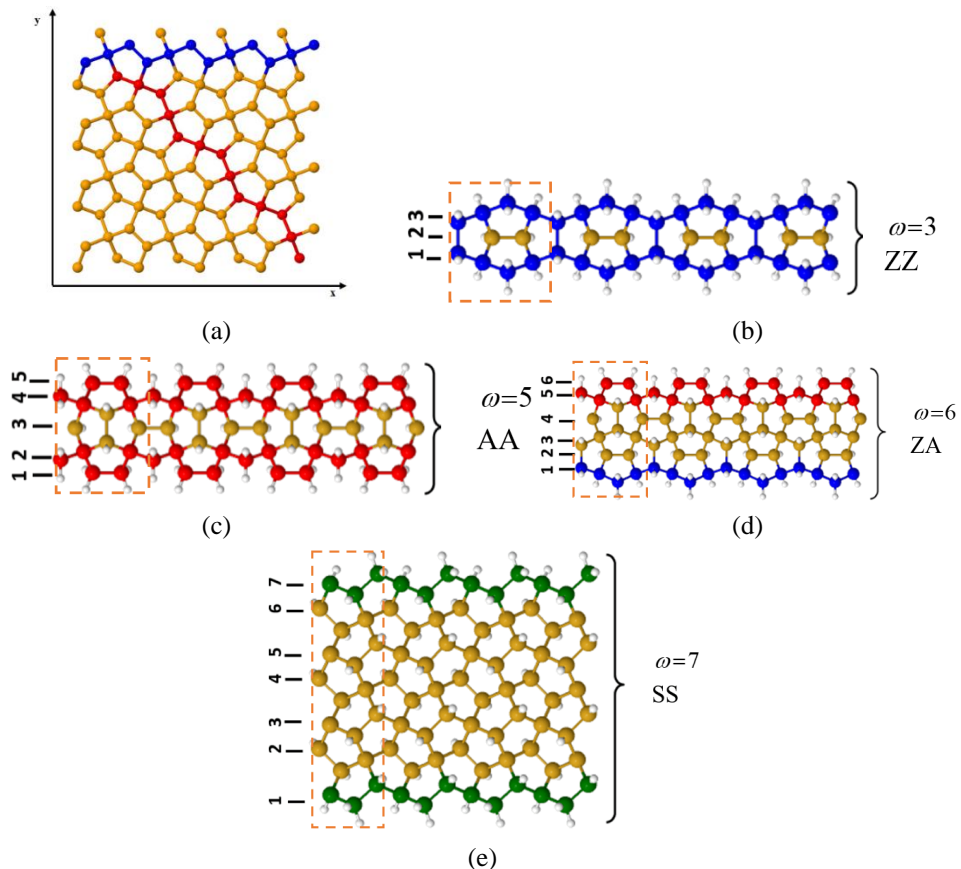
Ngoài ra, vì penta-silicene không ổn định nên sau khi cắt, ngoài việc đóng biên bằng nguyên tử H, H còn được gắn lên nguyên tử Si₂ để tạo lai hóa sp³ ổn định hơn.



Hình 2. Cấu trúc màng penta-silicene sau khi hồi phục

Bảng 1. Thông số cấu trúc màng penta-silicene trước và sau khi hồi phục

Thông số	Thông số ban đầu [11]	DFTB
Buckling (Å)	1.0	1.2
Độ dài liên kết (Å)	Si ₁ -Si ₂ = 2.36	Si ₁ -Si ₂ = 2.35
	Si ₂ -Si ₂ = 2.24	Si ₂ -Si ₂ = 2.32
Góc liên kết	Si ₁ -Si ₂ -Si ₁ = 112 ^o	Si ₁ -Si ₂ -Si ₁ = 107 ^o
	Si ₁ -Si ₂ -Si ₂ = 111 ^o	Si ₁ -Si ₂ -Si ₂ = 108 ^o

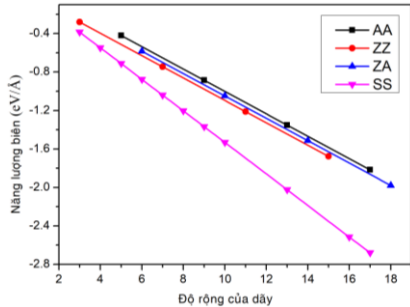


Hình 3. Cấu trúc của các dạng biên. Hướng cắt tạo dây nano từ màng penta-silicene (a), dạng biên ZZ (b), dạng biên AA (c), dạng biên ZA (d), dạng biên SS (e)

Đầu tiên, để đánh giá mức độ hình thành các dạng biên, năng lượng biên được tính toán.

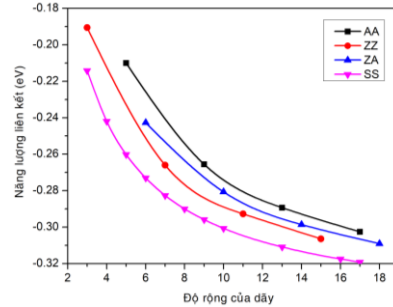
Năng lượng biên E_{biên} về cơ bản cho biết cần phải tốn năng lượng bao nhiêu để tạo biên từ

màng 2D được xác định theo công thức $E_{biên} = E_{pSiNRs} - \left(\frac{1}{6} n_{Si} E_{2D} + \frac{1}{2} m_H E_{H_2} \right) / 2L_0$. Trong đó, E_{pSiNRs} là tổng năng lượng của dây nano, E_{2D} là tổng năng lượng của 6 nguyên tử trong ô cơ sở, E_{H_2} là tổng năng lượng của phân tử Hidro, n_{Si} , m_H là số nguyên tử Silic và Hidro tương ứng trong dây và L_0 là hằng số mạng đã hồi phục dọc theo dây



(a)

(Rajbanshi et al., 2016). Các kết quả tính toán $E_{biên}$ của các dây với độ rộng khác nhau được minh họa trong đồ thị Hình 4a. Trong mỗi dạng biên, khi độ rộng dây tăng lên thì năng lượng biên giảm. Giá trị năng lượng biên của các dạng biên đều nhỏ hơn năng lượng biên của graphene vì thế việc tạo biên từ màng 2D là khả thi. Sắp xếp năng lượng biên theo thứ tự tăng dần $E_{biên}(SS) < E_{biên}(ZZ) < E_{biên}(ZA) < E_{biên}(AA)$ cho thấy dây nano với dạng biên SS tồn tại năng lượng hình thành nhất.



(b)

Hình 4. Đồ thị thể hiện mối quan hệ giữa năng lượng biên (a) và năng lượng liên kết (b) theo các độ rộng khác nhau với các dây khác nhau của penta-silicene

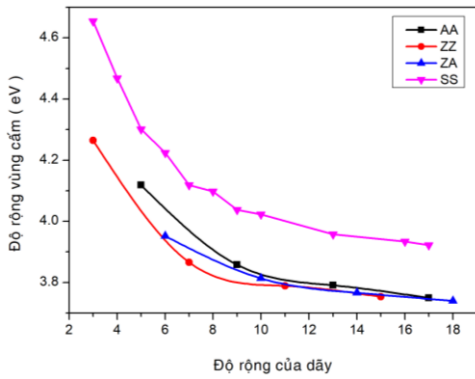
Ngoài ra, sự ổn định của dây nano với các dạng biên khác nhau được đánh giá dựa vào năng lượng liên kết E_B . Năng lượng liên kết được tính theo công thức $E_B = \left(E_{pSiNRs} - n_{Si} E_{Si} - n_H E_H \right) / (n_{Si} + m_H)$ trong đó E_{pSiNRs} là tổng năng lượng trong supercell, E_{Si} ; E_H ; n_{Si} ; n_H lần lượt là năng lượng của một nguyên tử Si, năng lượng của một nguyên tử H, số nguyên tử Si và H trong supercell (Yuan et al., 2017). Các kết quả tính toán năng lượng liên kết được minh họa trong đồ thị Hình 4b. Năng lượng liên kết cũng giảm khi độ rộng của dây nano tăng lên, tức là dây càng rộng thì càng ổn định. Điều này đã được nhận thấy trong các dây nano có nguồn gốc từ màng 2D. Năng lượng liên kết sắp xếp theo chiều tăng dần $E_B(SS) < E_B(ZZ) < E_B(ZA) < E_B(AA)$ cho thấy dây nano có biên SS là ổn định nhất giống với kết luận trong penta-graphene.

3.2. Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái

Cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu sẽ cho biết giá trị của độ rộng vùng cấm. Bảng 2 là giá trị độ rộng vùng cấm của các dây với độ rộng khác nhau. Dựa vào bảng, đồ thị được vẽ thể hiện mối quan hệ giữa độ rộng vùng cấm và độ rộng dây như Hình 5. Dựa vào đồ thị, độ rộng vùng cấm giảm khi độ rộng dây nano tăng lên.

Bảng 2. Độ rộng vùng cấm của các dây với độ rộng khác nhau

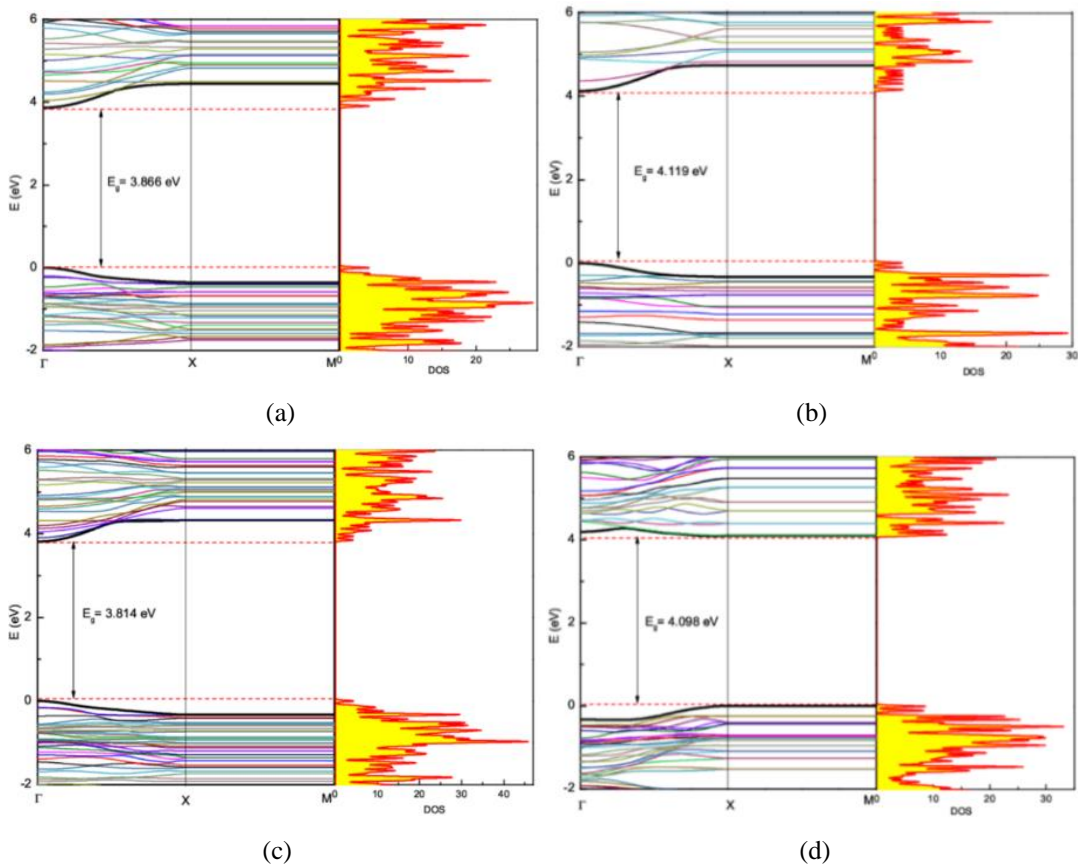
Dây	Độ rộng dây (ω)	Độ rộng vùng cấm (eV)
AA	5	4.119
	9	3.858
	13	3.791
	17	3.749
ZA	6	3.952
	10	3.814
	14	3.766
ZZ	18	3.739
	3	4.265
	7	3.866
SS	11	3.789
	15	3.753
	3	4.655
	4	4.468
	5	4.301
	6	4.224
	7	4.119
	8	4.098
	9	4.038
	10	4.023
13	3.958	
16	3.934	
17	3.922	



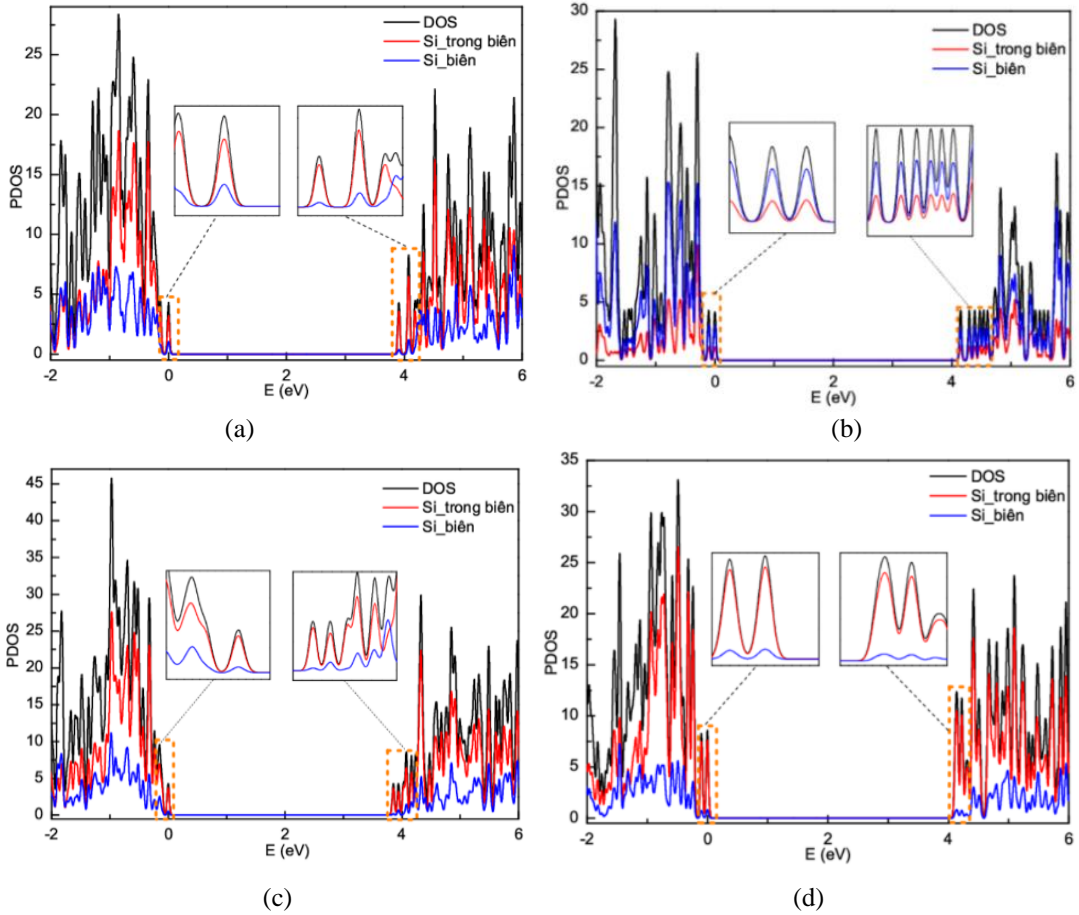
Hình 5. Đồ thị thể hiện mối quan hệ giữa độ rộng vùng cấm với độ rộng dây nano

Sự phù hợp giữa cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái (DOS) của dây ZZ ($\omega = 7$), AA ($\omega = 5$), ZA ($\omega = 10$) và SS ($\omega = 8$) được thể hiện trong Hình 6. Trong các dây, mức năng lượng ở vùng hóa trị nhiều hơn vùng dẫn tương ứng DOS có mật độ điện tử ở vùng hóa trị cao hơn mật độ điện tử vùng dẫn. Đồng thời vùng cấm ở cấu trúc vùng tương ứng với sự không có mặt của mật độ điện tử ở DOS.

Sự đóng góp điện tử vào DOS của nguyên tử Si_{biên} và nguyên tử Si_{trong biên} của dây ZZ ($\omega = 7$), AA ($\omega = 5$), ZA ($\omega = 10$) và SS ($\omega = 8$) được minh họa trong Hình 7.



Hình 6. Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái của dây ZZ ($\omega = 7$) (a), AA ($\omega = 5$) (b), ZA ($\omega = 10$) (c) và SS ($\omega = 8$) (d)

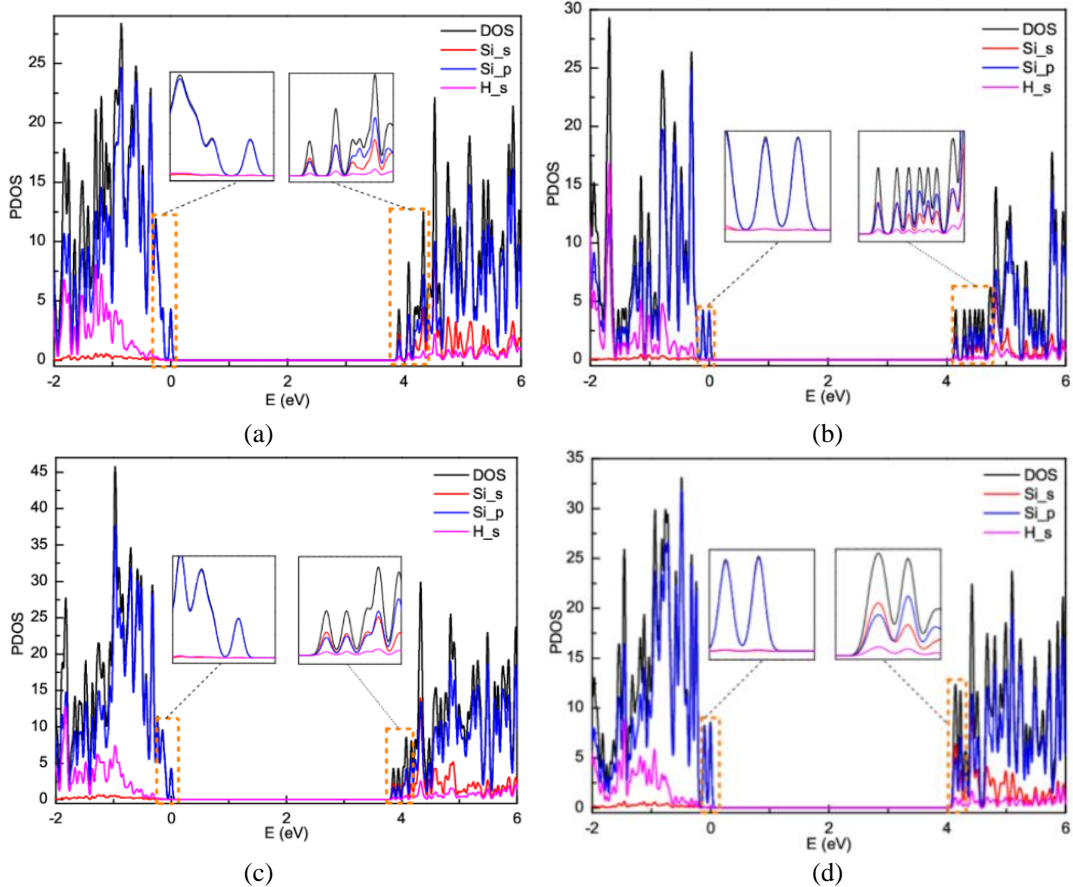


Hình 7. Sự đóng góp của nguyên tử Si_{biên} và nguyên tử Si_{trong biên} vào DOS của dãy ZZ ($\omega = 7$) (a), AA ($\omega = 5$) (b), ZA ($\omega = 10$) (c) và SS ($\omega = 8$) (d)

Mật độ trạng thái riêng phần PDOS của dãy ZZ ($\omega = 7$) và ZA ($\omega = 5$) SS ($\omega = 8$) đều cho thấy sự đóng góp của mật độ điện tử Si_{trong biên} vào DOS cao hơn Si_{biên} ở cả vùng dẫn và vùng hóa trị như trong Hình 7a, Hình 7c, Hình 7d, Hình 7b, đồ thị PDOS của dãy AA ($\omega = 5$) thể hiện rõ sự đóng góp của nguyên tử Si_{biên} chiếm ưu thế ở vùng dẫn và vùng hóa trị.

Ngoài ra, sự đóng góp của các nguyên tử Si quỹ đạo p (Si_p), nguyên tử Si quỹ đạo s (Si_s) và nguyên tử H quỹ đạo s (H_s) của dãy ZZ ($\omega = 7$), AA ($\omega = 5$), ZA ($\omega = 10$) và SS ($\omega = 8$) được thể hiện trong Hình 8.

Dựa vào Hình 8, ở vùng hóa trị của dãy ZZ ($\omega = 7$), AA ($\omega = 5$), ZA ($\omega = 10$) và SS ($\omega = 8$) đều có sự đóng góp mật độ điện tử của nguyên tử Si_p vào DOS là cao nhất, sự đóng góp của nguyên tử H_s tăng dần khi ra xa đỉnh vùng hóa trị còn sự đóng góp của nguyên tử Si_s thì không đáng kể. Ở vùng dẫn của các dãy ZZ ($\omega = 7$), AA ($\omega = 5$), ZA ($\omega = 10$) và SS ($\omega = 8$) cũng có đặc điểm tương tự nhau, ở khu vực gần đáy vùng dẫn thì sự đóng góp của nguyên tử Si_s cao hơn sự đóng góp của nguyên tử Si_p. Tuy nhiên, khi ra xa đáy vùng dẫn thì sự đóng góp của nguyên tử Si_p chiếm ưu thế và sự đóng góp Si_s giảm dần, trong khi đó sự đóng góp điện tử của nguyên tử H_s vào DOS không đáng kể.



Hình 8. Sự đóng góp của nguyên tử Si_p, Si_s và H_s vào DOS của dây ZZ ($\omega = 7$) (a), AA ($\omega = 5$) (b), ZA ($\omega = 10$) (c) và SS ($\omega = 8$) (d)

4. KẾT LUẬN

Bằng phương pháp DFTB cấu trúc điện tử của dây penta-silicene đơn lớp đã được khảo sát với các dây ZZ, ZA, AA và SS thông qua cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái. Từ kết quả mô phỏng, có thể thấy, tất cả các dây đều tồn tại độ rộng vùng cấm và độ rộng vùng cấm tỉ lệ nghịch với độ rộng dây nano. Dựa trên kết quả này, cách chức năng hóa

và tạo dây từ màng penta-silicene đã làm chuyển đổi từ vật liệu bán dẫn thành điện môi.

LỜI CẢM ƠN

Đề tài này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.02-2019.377.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Cahangirov, S., Topsakal, M., Aktürk, E., Şahin, H., & Ciraci, S. (2009). Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium. *Physical Review Letters*, 102(23), 236804. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.236804>

Ding, Y., & Wang, Y. (2015). Hydrogen-induced stabilization and tunable electronic structures of penta-silicene: a computational study [10.1039/C5TC02504D]. *Journal of Materials Chemistry C*, 3(43), 11341-11348. <https://doi.org/10.1039/C5TC02504D>

Drummond, N. D., Zólyomi, V., & Fal'ko, V. I. (2012). Electrically tunable band gap in silicene. *Physical Review B*, 85(7), 075423. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.075423>

Gao, J., Zhang, J., Liu, H., Zhang, Q., & Zhao, J. (2013). Structures, mobilities, electronic and magnetic properties of point defects in silicene [10.1039/C3NR02826G]. *Nanoscale*, 5(20), 9785-9792. <https://doi.org/10.1039/C3NR02826G>

- Geim, A. K. (2009). Graphene: status and prospects. *science*, 324(5934), 1530-1534.
<https://doi.org/10.1126/science.1158877>
- Li, X., Dai, Y., Li, M., Wei, W., & Huang, B. (2015). Stable Si-based pentagonal monolayers: high carrier mobilities and applications in photocatalytic water splitting [10.1039/C5TA05770A]. *Journal of Materials Chemistry A*, 3(47), 24055-24063.
<https://doi.org/10.1039/C5TA05770A>
- Novoselov, K. S., Mishchenko, A., Carvalho, A., & Castro Neto, A. H. (2016). 2D materials and van der Waals heterostructures. *science*, 353(6298), aac9439.
<https://doi.org/10.1126/science.aac9439>
- Qiao, M., Wang, Y., Li, Y., & Chen, Z. (2017). Tetrasilicene: A Semiconducting Allotrope of Silicene with Negative Poisson's Ratios. *The Journal of Physical Chemistry C*, 121(17), 9627-9633.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b02413>
- Rajbanshi, B., Sarkar, S., Mandal, B., & Sarkar, P. (2016). Energetic and electronic structure of penta-graphene nanoribbons. *Carbon*, 100(C), 118-125.
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2016.01.014>
- Wu, D., Wang, S., Zhang, S., Liu, Y., Ding, Y., Yang, B., & Chen, H. (2019). Stabilization of two-dimensional penta-silicene for flexible lithium-ion battery anodes via surface chemistry reconfiguration [10.1039/C8CP05008B]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(3), 1029-1037.
<https://doi.org/10.1039/C8CP05008B>
- Yuan, P. F., Zhang, Z. H., Fan, Z. Q., & Qiu, M. (2017). Electronic structure and magnetic properties of penta-graphene nanoribbons [10.1039/C7CP00029D]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(14), 9528-9536.
<https://doi.org/10.1039/C7CP00029D>
- Zaminpayma, E., & Nayebi, P. (2016). Band gap engineering in silicene: A theoretical study of density functional tight-binding theory. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 84, 555-563.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.physe.2016.06.016>