



DOI:10.22144/ctujos.2024.344

## TÍNH CHẤT QUANG-ĐIỆN TỬ CỦA CHẤM LƯỢNG TỬ GRAPHENE DẠNG LỤC GIÁC LOẠI II HẤP PHỤ VANADIUM

Nguyễn Thị Bảo Trang<sup>1,2</sup>, Nguyễn Võ Anh Duy<sup>2</sup>, Nguyễn Chí Bền<sup>1</sup>, Phạm Vũ Nhật<sup>1</sup> và Đặng Minh Triết<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Trường Đại học Cần Thơ

<sup>2</sup>Trường Đại học FPT Cần Thơ

\*Tác giả liên hệ (Corresponding author): dmtriet@ctu.edu.vn

### Thông tin chung (Article Information)

Nhận bài (Received): 01/05/2024

Sửa bài (Revised): 03/07/2024

Duyệt đăng (Accepted): 04/08/2024

**Title:** Optoelectronic properties of type II Vanadium-doped hexagonal graphene quantum dots

**Author(s):** Nguyen Thi Bao Trang<sup>1,2</sup>, Nguyen Vo Anh Duy<sup>2</sup>, Nguyen Chi Ben<sup>1</sup>, Pham Vu Nhat<sup>1</sup> and Dang Minh Triet<sup>1\*</sup>

**Affiliation(s):** <sup>1</sup>Can Tho University, <sup>2</sup>FPT University - Campus Can Tho

### TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, các đặc tính quang-điện tử của các chấm lượng tử dị thể loại II dạng lõi-vỏ (HBC-xV), với lõi là một vòng lục giác graphene pha tạp x số nguyên tử vanadium (V) và vỏ là chấm lượng tử có cấu trúc Hexa-peri-hexabenzocoronene (HBC) được tìm hiểu bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ DFT. Nghiên cứu sử dụng phiếm hàm tương quan trao đổi Heyd-Scuseria-Ernzerhof để tập trung khảo sát tương tác điện tử-điện tử giữa các electron lớp d trong vanadium. Kết quả cho thấy, sự hình thành chấm lượng tử lõi-vỏ loại II HBC-xV đã dẫn đến sự dịch chuyển đỏ đáng kể của phổ hấp thụ quang về vùng khả kiến so với các chấm lượng tử graphene. Cơ chế dịch chuyển điện tử giữa phần lõi và phần vỏ trong chấm lượng tử cũng đã được chỉ ra. Những kết quả này giúp hiểu rõ hơn cơ chế phát quang, mối quan hệ chặt chẽ giữa cấu trúc vùng năng lượng và phổ hấp thụ quang của chấm lượng tử graphene với mong muốn cải thiện độ chọn lọc ánh sáng và hiệu suất chuyển đổi của pin mặt trời thế hệ mới.

**Từ khóa:** Chấm lượng tử graphene Hexa-peri-hexabenzocoronene, tính chất quang-điện tử, thiết bị năng lượng mặt trời, pha tạp vanadium

### ABSTRACT

The optoelectronic properties of type II core-crown hexagonal graphene quantum dots doped with vanadium (HBC-xV) were investigated using the density functional theory simulation method. To precisely predict the orbital interactions between the d-orbitals of vanadium atoms, we use Heyd-Scuseria-Ernzerhof as exchange-correlation functional. It was shown that by doping vanadium atoms to these quantum dots, the absorption spectra exhibit remarkable red-shifts towards the visible light range. The absorption mechanism between the core and the crown portions of the dots was also explained. These results highlight the essence of vanadium doped atoms to the electronic and optical properties and enhance the light-to-electricity conversion capacity of these type II core-crown quantum dots.

**Keywords:** Hexa-peri-hexabenzocoronene graphene quantum dots, optoelectronic properties, solar cells, doping vanadium

## 1. GIỚI THIỆU

Cùng với sự bùng nổ của các cuộc cách mạng khoa học công nghệ, quá trình công nghiệp hóa và đô thị hóa, nhu cầu sử dụng và lưu trữ năng lượng của con người ngày càng tăng cao. Hiện nay, tuy nhiên liệu hóa thạch vẫn là nguồn cung cấp năng lượng chính cho các hoạt động từ sinh hoạt đời sống đến các hoạt động công nghiệp quy mô lớn, các tác động tiêu cực từ quá trình khai thác và sử dụng nhiên liệu hóa thạch dẫn đến sự biến đổi khí hậu toàn cầu với các hiện tượng thời tiết cực đoan và các vấn đề về ô nhiễm môi trường nghiêm trọng. Nhu cầu mở rộng và phát triển nguồn năng lượng xanh, sạch và bền vững trở thành nhu cầu cấp thiết. Trong các nguồn năng lượng tái tạo được khai thác và sử dụng hiện nay, năng lượng Mặt Trời được kỳ vọng là nguồn năng lượng tiềm năng nhất, đặc biệt là ở các quốc gia thuộc khu vực xích đạo. Tuy nhiên, việc chuyển đổi bức xạ Mặt Trời thành điện năng với hiệu suất cao vẫn còn gặp nhiều thách thức. Để tăng hiệu suất chuyển đổi quang năng thành điện năng, vượt giới hạn lý thuyết về hiệu suất Shockley-Queisser của pin Mặt Trời (Shockley & Queisser, 1961; Miller et al., 2012; Ehrler et al., 2020), trong những năm gần đây, các nghiên cứu về lý thuyết và thực nghiệm đã đề xuất nhiều phương pháp cải tiến rất hiệu quả (Grimaldi et al., 2019; Kumar et al., 2023). Một trong những phương pháp hiệu quả được chú ý hiện nay là việc tích hợp các chấm lượng tử có kích thước nanomet vào các vật liệu nền bán dẫn thương mại. Các chấm lượng tử này cho phép thúc đẩy quá trình nhân lên của các cặp electron-lỗ trống, trong đó sự hấp thụ của một photon đơn lẻ dẫn đến sự hình thành nhiều cặp electron-lỗ trống, giúp cải thiện đáng kể hiệu suất chuyển đổi quang năng thành điện năng. Trong những công bố gần đây (Goyal et al., 2020; Swain et al., 2020; Kumar et al., 2023; Roondhe et al., 2023; Thanh Si et al., 2024), các tác giả đã chỉ ra mối liên hệ mật thiết giữa việc điều chỉnh sự hấp phụ/pha tạp/biến dạng của các chấm lượng tử lên vật liệu bán dẫn truyền thống nhằm tăng đáng kể trạng thái điện tử và quá trình vận chuyển điện tử của các linh kiện điện tử bán dẫn.

Chấm lượng tử graphene (graphene quantum dots - GQD) là một loại hạt nano carbon có thể được tạo thành dễ dàng thông qua quá trình thủy nhiệt các tấm graphene (Pan et al., 2010). GQD có độ kết tinh tốt, tính chất quang điện tử đa dạng và ổn định về mặt cơ học vượt trội khi bị thụ động biên bởi các nhóm chức (Peng et al., 2012; Bacon et al., 2014; Lee et al., 2019; Dang et al., 2022). Các hệ nano này đã nhận được sự quan tâm đặc biệt trong nghiên cứu

kỹ thuật nhờ vào các đặc tính sạch, thân thiện với môi trường và khả năng tương thích sinh học cao (Li et al., 2015; Li et al., 2019; Abbas et al., 2020; Prabhu & Suganthi, 2020). Để khảo sát khả năng hấp thụ quang-điện tử của chấm lượng tử này, các nhà nghiên cứu đã thực hiện quan sát trên các chấm carbon riêng lẻ, chúng dễ bị kích thích và tồn tại nhiều vị trí hấp thụ thứ phát (Dam et al., 2017). Các nghiên cứu trước đây đã chỉ ra rằng những vật liệu như vậy có thể gây ra sự dịch chuyển phổ hấp thụ về vùng ánh sáng dài khi được pha tạp hoặc hấp phụ kim loại hoặc các nhóm chức, phôi tử đặc trưng (Feng et al., 2019). Vorontsov and Tretykov (2018) đã chỉ ra rằng đối với các chấm graphene GQD có kích thước đường kính lên tới 6 nm, năng lượng cần thiết để tạo thành của các chấm lượng tử này nếu không có sự thụ động hóa biên bởi hydro là 13,1 eV.nm<sup>-1</sup>, trong khi giá trị tương ứng này khi được thụ động biên là 1,3–2,7 eV.nm<sup>-1</sup>. Điều này chứng tỏ khi có thụ động hóa biên hydro, chấm lượng tử graphene sẽ dễ được hình thành trong chân không theo phương pháp hình thành tự kết dính từ dưới lên (bottom-up). Đặc biệt, khi pha tạp nitrogen, sulfur,... chúng có thể làm tăng cường đáng kể tính chất quang điện tử của các chấm lượng tử graphene thông qua sự hiệu chỉnh cấu trúc vùng năng lượng (Krasheninnikov et al., 2009; X. Li et al., 2015; Tang et al., 2018; Duy et al., 2022; Nhat et al., 2024a, 2024b).

Ngoài các chấm lượng tử đơn truyền thống, các chấm lượng tử dị thể có thể được hình thành bằng cách ghép các chấm lượng tử đơn lại với nhau. Các chấm lượng tử dị thể điển hình là sự kết hợp của ZnSe – CdSe, ZnSe – CdTe, loại II nổi bật là CdTe – CdSe, CdTe – CdS, PbSe – CdSe (García de Arquer et al., 2024). Dựa vào độ lệch của cấu trúc vùng năng lượng, chúng ta có thể ghép các chấm lượng tử đơn này thành chấm lượng tử dị thể loại I và loại II ở dạng core-shell, core-crown, core-wings, core-shell-shell,... (Ivanov et al., 2007; Prudnikau et al., 2013; Tessier et al., 2014). Bằng cách này, với cùng loại hợp chất, kết hợp với việc thay đổi kích thước và hình dạng, chúng ta có thể dễ dàng tạo các chấm lượng tử dị thể loại I và loại II (X. Liu et al., 2016; Park et al., 2021). Với sự linh hoạt của việc điều khiển hình dạng và cấu trúc của chấm lượng tử, chúng ta dễ dàng nâng cao hiệu suất chuyển đổi quang năng thành điện năng của chấm lượng tử dị thể (Green et al., 2009; Antanovich et al., 2015; Grimaldi et al., 2019).

Trong nghiên cứu này, độ bền và tính chất điện tử của chấm lượng tử graphene đồng pha tạp nguyên tử kim loại chuyển tiếp vanadium dạng core-crown

(lõi-vỏ) trong chân không được khảo sát bằng cách sử dụng mô phỏng lý thuyết phiếm hàm mật độ (density functional theory – DFT) (Aliano & Cicero, 2012; Allouche, 2012; Nhat et al., 2020; Tran et al., 2021; Si et al., 2021; Ta et al., 2021). Cụ thể, nghiên cứu tạo ra những thay đổi trong cấu trúc hình học, cấu trúc vùng năng lượng và phổ hấp thụ quang của các chấm lượng tử lõi-vỏ theo số lượng nguyên tử pha tạp vanadium. Thông qua kết quả nghiên cứu này, sự linh hoạt của việc điều khiển cấu trúc của vật liệu làm thay đổi bản chất điện tử của chấm lượng tử kim loại chuyển tiếp được chỉ ra nhằm nâng cao hiệu suất chuyển đổi điện năng của các pin mặt trời thế hệ mới.

## 2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Tương tự như khi pha tạp nguyên tử nitrogen vào chấm lượng tử graphene (Nhat et al., 2024b), tấm graphene 2D được cắt thành chấm lượng tử graphene hình lục giác và thụ động biên bằng các nguyên tử hydro để hình thành cấu trúc Hexa-perihexabenzocoronene (HBC). Để tạo mẫu chấm lượng tử dị thể, một vòng lục giác được khoét ở trung tâm và thực hiện tối ưu hóa cấu trúc hình học của chúng để tạo lớp vỏ (HBC-crown) bằng phương pháp học sâu (deep learning) được tích hợp trong gói phần mềm Amsterdam Modeling Suite (*SCM AMS2023*, 2023) với hàm thế M3GNet (Chen & Ong, 2022). Hàm thế M3GNet được chứng minh là hàm thế học sâu với độ tin cậy tương đồng với hàm thế Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) (Wan et al., 2021) thường được sử dụng trong lý thuyết phiếm hàm mật độ DFT. Các chấm lượng tử lõi có dạng một vòng lục giác  $C_{6-x}H_6V_x$  (với  $x$  là số lượng nguyên tử vanadium  $x=1-3$ ). Do vanadium có cấu hình electron dạng  $[Ar] 3d34s2$ , để đảm bảo độ tin cậy trong các tính toán về cấu trúc vùng năng lượng và hàm mật độ trạng thái, nghiên cứu sử dụng phiếm hàm tương quan trao đổi Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06) trên thang Jacob (Liao et al., 2022) với bộ cơ sở triple-zeta polarization (TZP). Điều kiện hội tụ trung bình (root mean square) về lực tương tác Hellmann-Feynman giữa các nguyên tử được thiết lập là  $0.01 \text{ eV \AA}^{-1}$  và điều kiện hội tụ của hàm tự hợp là  $10^{-5} \text{ eV/cell}$ . Để đảm bảo độ tin cậy của phổ hấp thụ quang học, phổ hấp thụ quang học được tính dựa trên 120 trạng thái năng lượng kích thích thấp nhất của hệ.

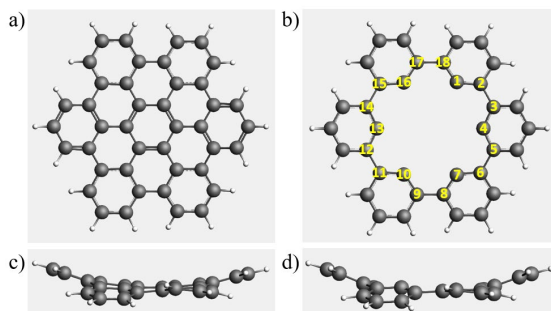
Để đánh giá tính ổn định của chấm lượng tử graphene dạng lõi-vỏ pha tạp vanadium (HBC- $xV$ ), năng lượng hấp phụ ( $E_{ads}$ ) được xác định dựa trên công thức (1) (Anithaa et al., 2020)  $E_{ads} = E(HBC - xV) - E(C_{36}H_{18}) - E(C_{6-x}H_6V_x) + 6 *$

$E(H)$ , trong đó  $E(HBC - xV)$  và  $E(C_{36}H_{18})$  là tổng năng lượng tự do (free energy) của mẫu chấm lượng tử HBC pha tạp vanadium và mẫu HBC-vỏ,  $E(C_{6-x}H_6V_x)$  và  $E(H)$  lần lượt là năng lượng của chấm lượng tử pha tạp vanadium và năng lượng của đơn nguyên tử hydro. Chỉ số  $x$  là số lượng nguyên tử vanadium trong mẫu chấm lượng tử đang khảo sát.

## 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

### 3.1. Cấu trúc hình học

Để nghiên cứu các đặc tính quang-điện tử của các chấm lượng tử graphene dạng lõi-vỏ, bước đầu nghiên cứu tiến hành tạo lập và tối ưu về mặt hình học cũng như năng lượng của chấm lượng tử HBC thuần (HBC-0V) được thể hiện ở Hình 1a-c. Cấu trúc của HBC-0V có độ cong vênh nhất định nhưng vẫn đảm bảo phù hợp với các mẫu đã được công bố trước đó (R. Liu et al., 2011; Nhat et al., 2024b). Để tạo chấm lượng tử vỏ, chúng tôi thực hiện khoét một vòng lục giác  $C_6$  ở trung tâm của mẫu HBC-0V và thực hiện tối ưu hóa hình học và năng lượng của mẫu. Sau tối ưu, mẫu HBC-vỏ (HBC-crown) được hình thành và có cấu trúc như Hình 1b-d. Kết quả này tương đồng với mẫu HBC-vỏ được công bố bởi Anithaa et al. (2020).



**Hình 1. (a-c) Cấu trúc tối ưu của HBC thuần và (b-d) HBC-vỏ ( $C_{36}H_{18}$ ) nhìn từ trên xuống (a-b), nhìn từ mặt bên (c-d)**

Các quả cầu màu xám và màu trắng lần lượt đại diện cho các nguyên tử C và H

Chấm lượng tử lõi  $C_{6-x}H_6V_x$  được hình thành bằng cách pha tạp nguyên tử vanadium vào chấm lượng tử graphene lục giác  $C_6H_6$ . Do cấu trúc  $C_6H_6$  thuần có tính đối xứng cao nên mẫu pha tạp một nguyên tử vanadium  $C_5H_6V$  chỉ có một cấu hình khả dĩ. Các mẫu pha tạp hai và ba nguyên tử vanadium được hình thành bằng cách thay thế thêm một hoặc hai nguyên tử vanadium tại các vị trí của nguyên tử carbon ở mức đối xứng hình học cao nhất (Hình 2).

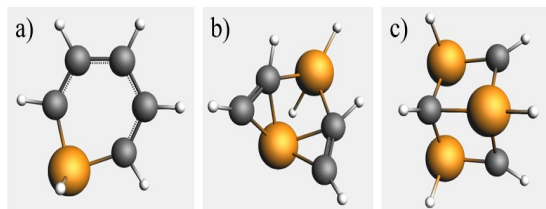
Sau khi đã xác định được cấu hình bền vững của các chấm lượng tử lõi pha tạp vanadium, để tăng độ linh động điện tử của chấm lượng tử lõi, các nguyên tử hydro thụ động ở biên được tháo và cho các chấm lượng tử này hấp phụ vào chấm lượng tử HBC-vỏ ở vùng trung tâm. Các cấu hình hấp phụ ổn định được thể hiện ở Hình 3. Do các nguyên tử vanadium có độ âm điện 1,63e thấp hơn đáng kể so với 2,55e của carbon, các nguyên tử carbon sẽ chia sẻ các electron dùng chung với các nguyên tử vanadium liền kề. Để xác định độ bền của các hệ chấm lượng tử lõi-vỏ, công thức năng lượng hấp phụ được sử dụng để đánh giá năng lượng hấp phụ của hệ và thể hiện trong Bảng 1. Dựa vào năng lượng hấp phụ có thể thấy rằng, các chấm lượng tử graphene dạng lõi-vỏ (HBC-xV) có độ ổn định tốt hơn về mặt năng lượng so với chấm lượng tử vỏ (HBC-vỏ). Năng lượng hấp phụ dao động trong khoảng -10,13 eV đối với mẫu HBC-1V đến -11,66 eV đối với mẫu HBC-3V. Đồng thời, kết quả này cũng cho thấy mẫu HBC-2V bền vững hơn về năng lượng so với hai mẫu HBC-1V và HBC-3V còn lại.

**Bảng 1. Năng lượng hấp phụ của các mẫu HBC-xV so với mẫu HBC-vỏ**

Mẫu	Năng lượng hấp phụ (eV)
HBC-vỏ	---
HBC-1V	-10,13
HBC-2V	-11,66
HBC-3V	-10,53

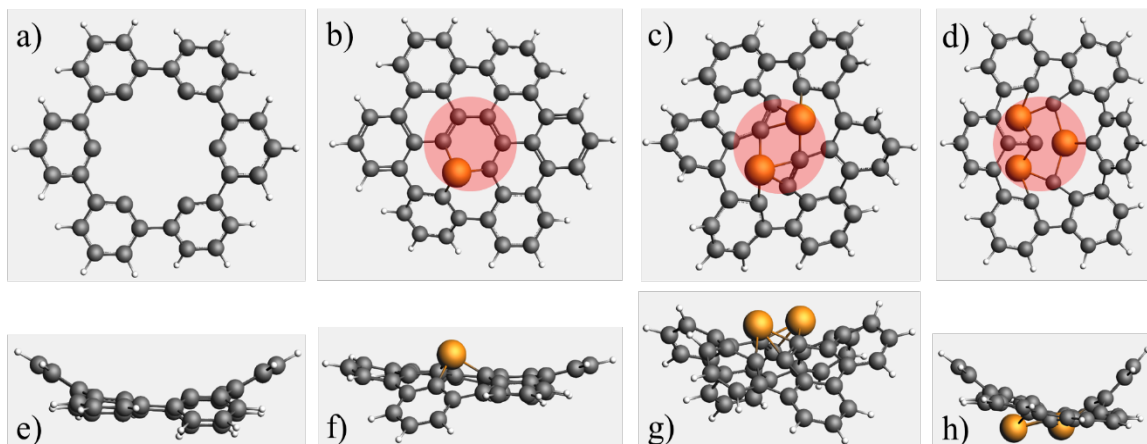
Để khảo sát sự tương tác giữa phần vỏ và phần lõi, độ dài liên kết C-C trước và sau hấp phụ được

xác định trong Bảng 2. Thứ tự của các nguyên tử C được đánh số ở Hình 1b. Bảng 2 cho thấy, phần vỏ có độ dài liên kết C-C ở khu vực trung tâm mẫu vào khoảng 1,345 - 1,518 Å. Sau khi hình thành cấu trúc lõi-vỏ, khoảng cách này có xu hướng tăng lên và dao động trong khoảng 1,418 - 1,538 Å. Đặc biệt, chấm lượng tử HBC-3V độ dài liên kết C-C ở các vị trí tương ứng trong vỏ graphene tăng lên rõ rệt do số lượng nguyên tử vanadium pha tạp vào chiếm ưu thế so với hai mẫu còn lại. Do đó, chấm lượng tử HBC-3V bị biến dạng cấu trúc nhiều nhất so với cấu trúc ban đầu. Điều này dự đoán nguyên tử vanadium tương tác mạnh mẽ các nguyên tử C lân cận làm độ dài liên kết C-C bị thay đổi đáng kể. Chính sự biến đổi cấu trúc mạnh mẽ này đã đưa ra dự đoán về tiềm năng sử dụng chấm lượng tử lõi-vỏ làm tăng cường khả năng chuyển đổi quang năng thành điện năng của các pin năng lượng mặt trời tích hợp chấm lượng tử, tương tự các công trình đã được công bố trước (Duy et al., 2022; Thanh Si et al., 2024).



**Hình 2. Cấu hình tối ưu của chấm lượng tử lõi có tích hợp vanadium: C<sub>5</sub>H<sub>6</sub>V (a), C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>V<sub>2</sub> (b) và C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>V<sub>3</sub> (c)**

Các quả cầu màu xám, màu cam và màu trắng lần lượt đại diện cho các nguyên tử C, V và H



**Hình 3. Cấu hình tối ưu của hệ lõi-vỏ graphene tích hợp vanadium nhìn từ trên xuống: (b) HBC-1V, (c) HBC-2V, (d) HBC-3V và (a) HBC-vỏ để tham khảo, nhìn từ mặt bên tương ứng (f-g-h-e)**

Vòng tròn màu đỏ ở trung tâm thể hiện cho vị trí hấp phụ các chấm lượng tử pha tạp vanadium

**Bảng 2. Độ dài liên kết C-C ở vùng khuyết tật của mẫu HBC trước và sau hấp phụ các chấm lượng tử pha tạp vanadium (Å)**

Liên kết	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>
HBC-vô	1,345	1,516	1,345	1,350	1,518	1,351
HBC-1V	<b>1,418</b>	1,474	<b>1,448</b>	1,450	1,453	1,428
HBC-2V	1,458	1,458	1,405	1,403	1,457	1,471
HBC-3V	1,494	1,420	1,442	1,456	1,416	1,467
Liên kết	C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	C <sub>8</sub> -C <sub>9</sub>	C <sub>9</sub> -C <sub>10</sub>	C <sub>10</sub> -C <sub>11</sub>	C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	C <sub>12</sub> -C <sub>13</sub>
HBC-vô	1,346	1,518	1,346	1,346	1,518	1,346
HBC-1V	1,422	1,459	1,438	1,437	1,458	1,424
HBC-2V	1,482	1,508	1,469	1,458	1,458	1,405
HBC-3V	1,427	1,427	1,407	1,416	1,436	1,442
Liên kết	C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub>	C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub>	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub>	C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub>	C <sub>18</sub> -C <sub>1</sub>
HBC-vô	1,351	1,518	1,350	1,345	1,516	1,345
HBC-1V	1,431	1,453	<b>1,449</b>	1,447	<b>1,474</b>	<b>1,419</b>
HBC-2V	1,402	1,457	1,471	1,482	1,508	1,468
HBC-3V	1,439	1,494	1,538	1,536	1,527	1,538

Chú ý: Số thứ tự của các nguyên tử C được đánh dấu trong Hình 1b

### 3.2. Tính chất điện tử

Tiếp theo, nghiên cứu tiến hành khảo sát sự ảnh hưởng của nguyên tố vanadium lên tính chất điện tử của chấm lượng tử graphene lõi-vỏ (HBC-xV). Cấu trúc vùng năng lượng và độ rộng vùng cấm của các mẫu chấm lượng tử graphene lõi-vỏ được thể hiện như Hình 4 và Bảng 3.

Đáng chú ý rằng, chấm lượng tử loại II có cấu trúc lõi-vỏ của chấm lượng tử graphene được tích hợp vanadium vào lõi đã được tạo thành công. Xem xét dựa trên sự chồng phủ vùng năng lượng giữa lõi tích hợp vanadium và vỏ graphene, đặc điểm của chấm lượng tử loại II với đỉnh vùng hóa trị (HOMO) và đáy vùng dẫn (LUMO) tương ứng của từng vỏ và lõi so le nhau được dễ dàng nhận thấy.

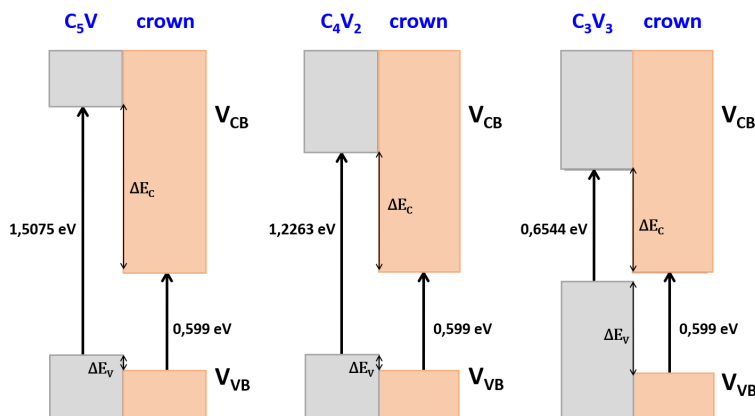
Nhìn chung, sự hình thành chấm lượng tử lõi-vỏ loại II đã làm thay đổi độ rộng vùng cấm ( $E_g$ ) của hệ đáng kể so với HBC-vô (0,599 eV) và vẫn giữ được bản chất bán dẫn của hệ. Cụ thể, độ rộng vùng cấm của các hệ lõi-vỏ vào khoảng 0,35 đến 1,08 eV. Giá trị  $E_g$  của HBC-1V là 1,054 eV (tăng 43%), HBC-2V là 1,086 eV (tăng 45%) và HBC-3V là 0,357 eV (giảm 41%). Sự thay đổi này có thể dẫn đến các xu hướng dịch chuyển khác nhau trong quang phổ hấp thụ của vật liệu.

Thông qua độ lệch dãy  $\Delta E_C$  và  $\Delta E_V$  có thể thấy các bề mặt tiếp xúc có thể được hình thành một cách dễ dàng do các giá trị này không vượt quá 1 eV. Tuy nhiên, sự ảnh hưởng của các nguyên tử lạ vẫn là yếu

tổ chính dẫn đến sự khác nhau của độ lệch dãy hóa trị của mẫu. Do đó, nghiên cứu cần các khảo sát có hệ thống hơn.

Để hiểu rõ hơn về tác động của vanadium được tích hợp vào lõi đối với các đặc tính dịch chuyển điện tử của hệ chấm lượng tử lõi-vỏ, quỹ đạo điện tử cùng isovalue (Natural Transition Orbitals) ở HOMO và LUMO được biểu diễn trong Hình 5. Trong đó, vùng có màu xanh lam và xanh lục là phần suy giảm, vùng đỏ và cam tương ứng là vùng tích lũy điện tử. Đối với HBC thuần, HOMO và LUMO thể hiện sự phân bố đối xứng cao trên bề mặt với trạng thái liên hợp  $\pi$  điển hình. Đối với lớp vỏ HBC (HBC-crown), sự phân bố điện tử chủ yếu ở vị trí các carbon tại vùng mẫu bị rỗng và các điện tử được tích lũy cục bộ hơn trong HOMO. Điều này cho phép hình thành các “bẫy” điện tử, tăng cường khả năng hấp thụ các kích thích trong quá trình quang hóa.

Đối với các chấm lượng tử lõi-vỏ tích hợp vanadium, tính đối xứng của hình dạng HOMO và LUMO bị phá vỡ. Trong HBC-1V, có sự tập trung các phân bố điện tử vào vị trí các nguyên tử vanadium ở lõi. Tương tự, cả HOMO và LUMO HBC-3V có sự chồng phủ quỹ đạo cho thấy sự chia sẻ điện tử giữa các vanadium và giữa chúng với carbon lân cận. Đối với HBC-2V, có sự biến động đáng kể trong HOMO, vùng tích lũy và suy giảm điện tử trải rộng trong mẫu. Đặc biệt, sự chồng phủ quỹ đạo cho thấy các điện tử được truyền dẫn giữa vanadium và các carbon lân cận vô cùng hiệu quả.



**Hình 4. Cấu trúc vùng năng lượng của các mẫu các hệ chấm lượng tử lõi-vỏ graphene tích hợp vanadium lần lượt là HBC-1V, HBC-2V, HBC-3V**

$\Delta E_V$  và  $\Delta E_C$  là độ lệch mức năng lượng vùng hóa trị và vùng dẫn tương ứng trong cấu trúc chấm lượng tử lõi-vỏ

**Bảng 3. Giá trị HOMO, LUMO và độ rộng vùng cấm ( $E_g$ ) của hệ chấm lượng tử lõi-vỏ graphene**

Mẫu	HBC-vỏ	HBC-1V	HBC-2V	HBC-3V
HOMO	-5,2098	-4,9262	-3,9437	-4,4595
LUMO	-4,6108	-3,8722	-2,8553	-4,1052
Độ rộng vùng cấm	0,5990	1,0540	1,0863	0,3544
$\Delta E_V$		0,0646	0,0647	0,5182
$\Delta E_C$		0,9731	0,696	0,5736

Ghi chú: Các giá trị được tính bằng đơn vị eV

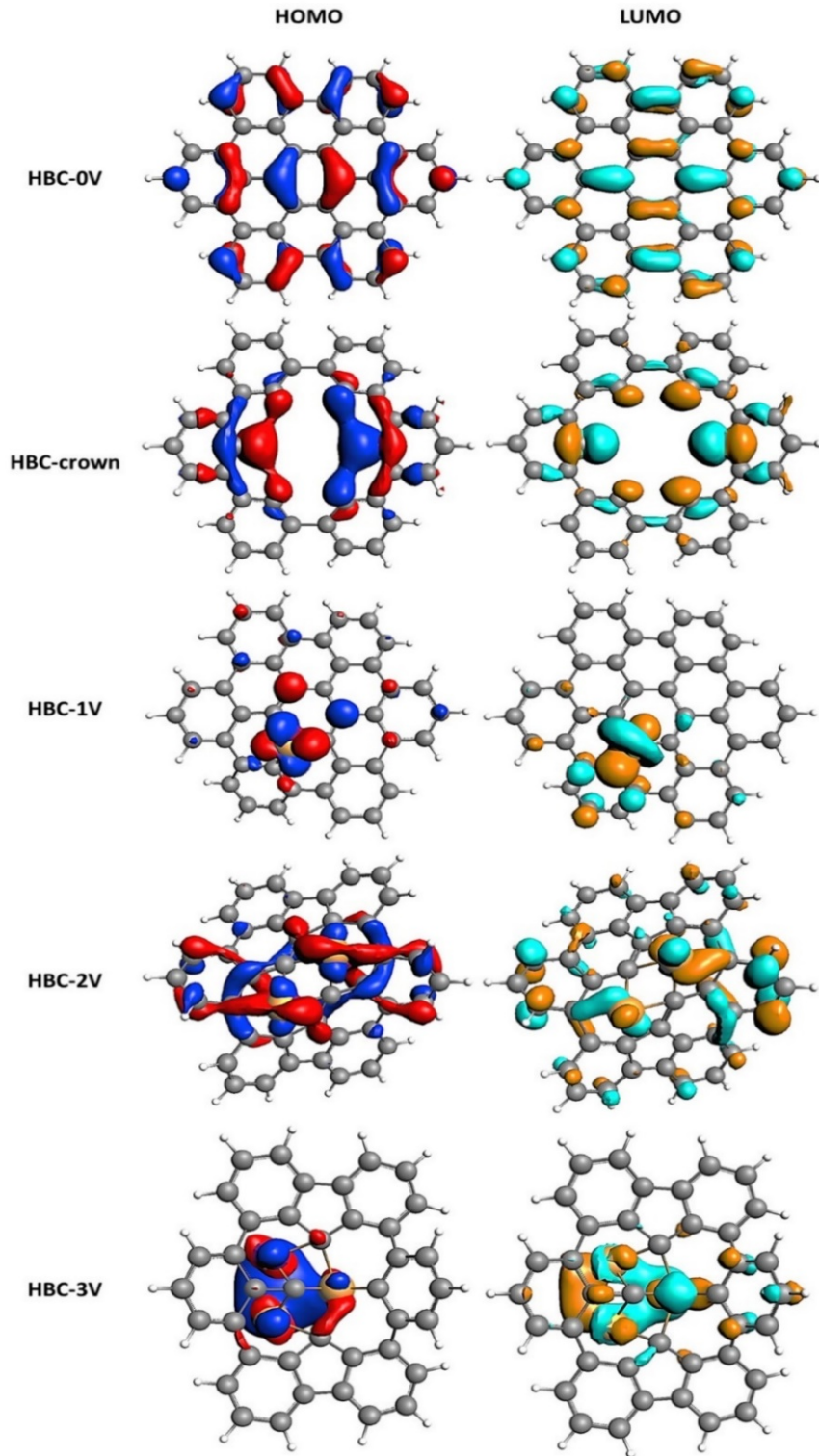
Từ đây, có hai cơ chế dịch chuyển điện tử kích thích trong các mẫu nghiên cứu được dự đoán. Đối với HBC-vỏ và HBC-2V, sự dịch chuyển năng lượng bởi HOMO diễn ra mạnh mẽ, do đó điện tử sẽ có xu hướng nhảy từ mức HOMO lên LUMO trong mỗi mô hình. Trong HBC-1V và HBC-3V có sự chuyển đổi năng lượng được đóng góp đáng kể từ cả HOMO và LUMO, chính vì thế chúng có thể tồn tại cả hai quá trình dịch chuyển từ HOMO lên LUMO và giữa các trạng thái LUMO của riêng chúng. Tương tự với các cơ chế dịch chuyển điện tử trong chấm lượng tử loại II đã được công bố trước đó (Antanovich et al., 2015; Grimaldi et al., 2019). Chấm lượng tử lõi-vỏ loại II trong nghiên cứu cho khả năng hình thành các “bẫy” quang học tốt, tạo tiền đề cho các ứng dụng trong lĩnh vực quang-điện tử.

### 3.3. Tính chất quang

Sự hấp thụ quang thường được biết là kết quả từ quá trình quang hóa của một điện tử được kích thích bởi một photon tới có bước sóng phù hợp để chuyển điện tử này từ trạng thái HOMO lên LUMO và được mô tả thông qua các hàm điện môi phức. Các chấm lượng tử lõi-vỏ pha tạp vanadium cho thấy sự dịch chuyển đáng kể phổ hấp thụ quang về vùng ánh sáng

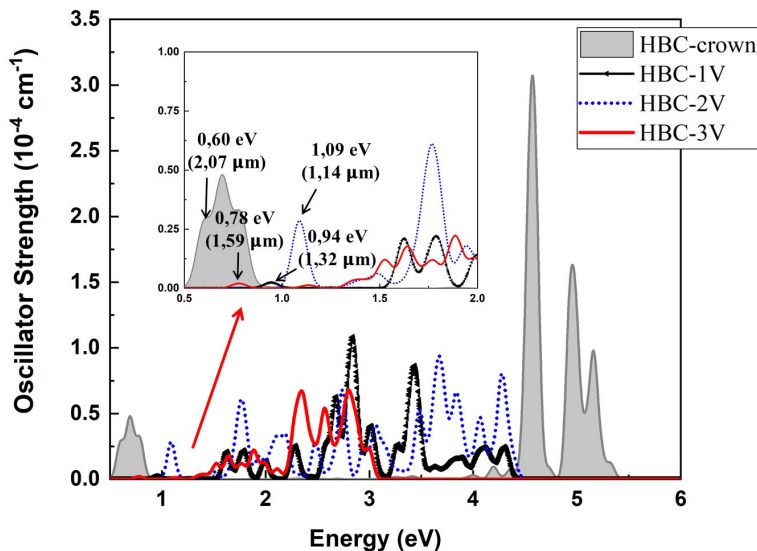
khả kiến trong Hình 6. Đây là một tín hiệu tốt cho thấy khả năng hiệu chỉnh quang phổ hấp thụ của các thiết bị năng lượng Mặt trời tích hợp chấm lượng tử lõi-vỏ pha tạp vanadium. Để giải thích rõ hơn về các đỉnh được hình thành trong phổ hấp thụ quang tương ứng với sự dịch chuyển năng lượng từ HOMO-n đến LUMO+m, các dịch chuyển này đã được liệt kê chi tiết trong Bảng 4. Rất rõ ràng, HBC-vỏ không hấp thụ các kích thích trong vùng ánh sáng khả kiến.

Việc dịch chuyển phổ hấp thụ quang của chấm lượng tử HBC vào vùng ánh sáng khả kiến thông qua các cấu trúc lõi-vỏ tích hợp vanadium đã được thực hiện thành công. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với các tính toán độ rộng vùng cấm của nghiên cứu ở phần 3.2. Một điều thú vị là các mức năng lượng dịch chuyển rất phù hợp với dự đoán từ phân bố orbital. Các đỉnh hấp thụ quang đầu tiên của HBC-vỏ (0,6 eV) và HBC-2V (1,09 eV) được hình thành thông qua sự dịch chuyển điện tử kích thích từ các mức HOMO về LUMO. Trong HBC-1V và HBC-3V đỉnh này xuất hiện tương ứng do dịch chuyển các mức giữa LUMO-LUMO, chuyển dịch HOMO-LUMO xảy ra tương ứng với đỉnh cực đại và xuất hiện trong vùng khả kiến.



**Hình 5. Mô hình quỹ đạo electron (orbital) của các hệ chấm lượng tử lõi-vỏ graphene tích hợp vanadium**

*Mô hình orbital ở mức HOMO (xanh lam/đỏ) và ở mức LUMO (xanh lục/cam)*



Hình 6. Phổ hấp thụ của các mẫu HBC-xV

Bảng 4. Định hấp thụ quang điện hình và sự dịch chuyển mức năng lượng tương ứng của các chấm lượng tử

Mẫu	Bước sóng	Năng lượng	Cường độ	Sự dịch chuyển
HBC-vỏ	2,07	<b>0,60</b>	0,30	<b>HOMO → LUMO</b>
	1,83	0,68	0,48	HOMO → LUMO+1
	1,57	0,79	0,33	HOMO -1 → LUMO +1
HBC-1V	1,32	<b>0,94</b>	0,02	<b>LUMO (α) → LUMO +1 (α)</b>
	0,76	1,63	0,20	LUMO (β) → LUMO +2 (β)
	0,54	2,30	0,25	HOMO (α) → LUMO +2 (α)
	0,46	2,68	0,63	HOMO (α) → LUMO +3 (β)
	0,43	<b>2,85</b>	1,08	<b>HOMO (α) → LUMO +5 (α)</b>
	0,41	3,02	0,41	HOMO -2 (α) → LUMO +1 (α)
	0,37	3,27	0,27	HOMO -1 (α) → LUMO +3 (α)
0,36	3,44	0,86	HOMO -1 (α) → LUMO +5 (α)	
HBC-2V	1,13	<b>1,09</b>	0,28	<b>HOMO → LUMO</b>
	0,83	1,49	0,06	HOMO -2 → LUMO +1
	0,56	2,20	0,35	HOMO -2 → LUMO +7
	0,50	2,47	0,29	HOMO -2 → LUMO +8
	0,45	2,74	0,68	HOMO -2 → LUMO +9
	0,42	2,94	0,25	HOMO -4 → LUMO +3
	0,40	3,08	0,41	HOMO -5 → LUMO +2
HBC-3V	1,59	<b>0,78</b>	0,02	<b>LUMO (β) → LUMO +1 (β)</b>
	0,81	1,53	0,12	LUMO (β) → LUMO +5 (β)
	0,76	1,63	0,18	LUMO (β) → LUMO +6 (β)
	0,70	1,77	0,12	HOMO (β) → LUMO +3 (β)
	0,66	1,88	0,22	HOMO (β) → LUMO +5 (β)
	0,52	<b>2,35</b>	0,67	<b>HOMO -2 (α) → LUMO +4 (β)</b>
	0,44	2,80	0,68	HOMO -2 (α) → LUMO +1 (β)
0,41	2,99	0,24	HOMO -4 (α) → LUMO +6 (β)	

Ghi chú: Cường độ và bước sóng của các đỉnh hấp thụ lần lượt được tính bằng đơn vị  $10^4 \text{ cm}^{-1}$  và  $\mu\text{m}$



#### 4. KẾT LUẬN

Bằng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ DFT, nghiên cứu đã tạo lập thành công chấm lượng tử graphene loại II với lõi là một vòng lục giác graphene pha tạp vanadium và vỏ là chấm lượng tử có cấu trúc Hexa-peri-hexabenzocoronene, bước đầu chứng minh được ảnh hưởng của vanadium pha tạp đến các đặc tính điện tử, quang-điện tử của chấm lượng tử lõi-vỏ graphene. Đồng thời, nghiên cứu cũng xác định được cơ chế dịch chuyển điện tử của các mẫu chấm lượng tử, qua đó thành công trong việc làm dịch chuyển phổ hấp thụ quang của chấm

lượng tử graphene đến vùng ánh khả kiến và có khả năng mở rộng cho vùng hồng ngoại gần. Trong tương lai, nghiên cứu sẽ được phát triển theo hướng này. Tóm lại, nghiên cứu đã chứng minh được ảnh hưởng tích cực của vanadium được tích hợp vào lõi của chấm lượng tử lõi-vỏ HBC, điều này góp phần cải thiện khả năng hấp thụ quang học của các thiết bị năng lượng mặt trời tích hợp chấm lượng tử graphene trong tương lai gần.

#### LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Bộ Giáo dục và Đào tạo Việt Nam với mã số đề tài B2024-TCT-16.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Abbas, A., Tabish, T. A., Bull, S. J., Lim, T. M., & Phan, A. N. (2020). High yield synthesis of graphene quantum dots from biomass waste as a highly selective probe for Fe<sup>3+</sup> sensing. *Scientific Reports*, 10(1), 1–16. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-78070-2>
- Aliano, A., & Cicero, G. (2012). Encyclopedia of Nanotechnology. In *Encyclopedia of Nanotechnology*. <https://doi.org/10.1007/978-90-481-9751-4>
- Allouche, A. (2012). Software News and Updates Gabedit — A Graphical User Interface for Computational Chemistry Softwares. *Journal of Computational Chemistry*, 32, 174–182. <https://doi.org/10.1002/jcc>
- Anithaa, V. S., Shankar, R., & Vijayakumar, S. (2020). Structural and electronic properties of graphene and its derivatives physisorbed by ionic liquids. *Diamond and Related Materials*, 109, 108005. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.diamond.2020.108005>
- Antanovich, A. V., Prudnikau, A. V., Melnikau, D., Rakovich, Y. P., Chuvilin, A., Woggon, U., Achtstein, A. W., & Artemyev, M. V. (2015). Colloidal synthesis and optical properties of type-II CdSe-CdTe and inverted CdTe-CdSe core-wing heteronanoplatelets. *Nanoscale*, 7(17), 8084–8092. <https://doi.org/10.1039/c4nr07134d>
- Bacon, M., Bradley, S. J., & Nann, T. (2014). Graphene quantum dots. *Particle and Particle Systems Characterization*, 31(4), 415–428. <https://doi.org/10.1002/ppsc.201300252>
- Chen, C., & Ong, S. P. (2022). A universal graph deep learning interatomic potential for the periodic table. *Nature Computational Science*, 2(11), 718–728. <https://doi.org/10.1038/s43588-022-00349-3>
- Dam, B. Van, Nie, H., Ju, B., Marino, E., Paulusse, J. M. J., & Schall, P. (2017). *Single-Carbon Dots*. 1702098, 1–5. <https://doi.org/10.1002/sml.201702098>
- Dang, M. T., Bich Thao, P. T., Ngoc Thao, T. T., & Tien, N. T. (2022). First-principles study of electronic and optical properties of small edge-functionalized penta-graphene quantum dots. *AIP Advances*, 12(6). <https://doi.org/10.1063/5.0091475>
- Duy, N. V. A., Triet, D. M., & An, D. Van. (2022). Electric Field as A Novel Switch to Enhance Optical Absorption Spectra of Defect Blue Phosphorene Thin-films. *VNU Journal of Science: Mathematics - Physics*, 38(2), 71–81. <https://doi.org/10.25073/2588-1124/vnumap.4683>
- Ehrler, B., Alarcón-Lladó, E., Tabernig, S. W., Veeken, T., Garnett, E. C., & Polman, A. (2020). Photovoltaics Reaching for the Shockley–Queisser Limit. *ACS Energy Letters*, 5(9), 3029–3033. <https://doi.org/10.1021/acseenergylett.0c01790>
- Feng, J., Dong, H., Pang, B., Chen, Y., Yu, L., & Dong, L. (2019). Tuning the electronic and optical properties of graphene quantum dots by selective boronization. *Journal of Materials Chemistry C*, 7(2), 237–246. <https://doi.org/10.1039/c8tc03863e>
- García de Arquer, F. P., Talapin, D. V., Klimov, V. I., Arakawa, Y., Bayer, M., & Sargent, E. H. (2024). Semiconductor quantum dots: Technological progress and future challenges. *Science*, 373(6555), eaaz8541. <https://doi.org/10.1126/science.aaz8541>
- Goyal, A., Demmenie, M., Huang, C. C., Schall, P., & Dohnalova, K. (2020). Photophysical properties of ball milled silicon nanostructures. *Faraday Discussions*, 222, 96–107. <https://doi.org/10.1039/c9fd00105k>
- Green, M., Williamson, P., Samalova, M., Davis, J., Brovelli, S., Dobson, P., & Cacialli, F. (2009). Synthesis of type II/type I CdTe/CdS/ZnS

- quantum dots and their use in cellular imaging. *Journal of Materials Chemistry*, 19(44), 8341–8346. <https://doi.org/10.1039/b913292a>
- Grimaldi, G., Van Den Brom, M. J., Du Fossé, I., Crisp, R. W., Kirkwood, N., Gudjonsdottir, S., Geuchies, J. J., Kinge, S., Siebbeles, L. D. A., & Houtepen, A. J. (2019). Engineering the Band Alignment in QD Heterojunction Films via Ligand Exchange. *Journal of Physical Chemistry C*, 123(49), 29599–29608. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b09470>
- Ivanov, S. A., Piryatinski, A., Nanda, J., Tretiak, S., Zavadil, K. R., Wallace, W. O., Werder, D., & Klimov, V. I. (2007). Type-II core/shell CdS/ZnSe nanocrystals: Synthesis, electronic structures, and spectroscopic properties. *Journal of the American Chemical Society*, 129(38), 11708–11719. <https://doi.org/10.1021/ja068351m>
- Krashennikov, A. V., Lehtinen, P. O., Foster, A. S., Pyykkö, P., & Nieminen, R. M. (2009). Embedding transition-metal atoms in graphene: Structure, bonding, and magnetism. *Physical Review Letters*, 102(12), 2–5. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.126807>
- Kumar, A., Sayyed, M. I., Punina, D., Naranjo, E., Jácome, E., Abdulameer, M. K., Albazoni, H. J., & Shariatnia, Z. (2023). Graphene quantum dots (GQD) and edge-functionalized GQDs as hole transport materials in perovskite solar cells for producing renewable energy: a DFT and TD-DFT study. *RSC Advances*, 13(42), 29163–29173. <https://doi.org/10.1039/D3RA05438A>
- Lee, S. H., Kim, D. Y., Lee, J., Lee, S. B., Han, H., Kim, Y. Y., Mun, S. C., Im, S. H., Kim, T. H., & Park, O. O. (2019). Synthesis of Single-Crystalline Hexagonal Graphene Quantum Dots from Solution Chemistry. *Nano Letters*, 19(8), 5437–5442. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.9b01940>
- Li, M., Chen, T., Gooding, J. J., & Liu, J. (2019). A Review of Carbon and Graphene Quantum Dots for Sensing. *ACS sensors*, 4(7), 1732–1748. <https://doi.org/10.1021/acssensors.9b00514>
- Li, X., Rui, M., Song, J., Shen, Z., & Zeng, H. (2015). Carbon and Graphene Quantum Dots for Optoelectronic and Energy Devices: A Review. *Advanced Functional Materials*, 25(31), 4929–4947. <https://doi.org/10.1002/adfm.201501250>
- Liao, X., Lu, R., Xia, L., Liu, Q., Wang, H., Zhao, K., Wang, Z., & Zhao, Y. (2022). Density Functional Theory for Electrocatalysis. *Energy and Environmental Materials*, 5(1), 157–185. <https://doi.org/10.1002/eem2.12204>
- Liu, R., Wu, D., Feng, X., & Müllen, K. (2011). Bottom-up fabrication of photoluminescent graphene quantum dots with uniform morphology. *Journal of the American Chemical Society*, 133(39), 15221–15223. <https://doi.org/10.1021/ja204953k>
- Liu, X., Liu, L., Yang, L., Wu, X., & Chu, P. K. (2016). Optical Identification of Topological Defect Types in Monolayer Arsenene by First-Principles Calculation. *The Journal of Physical Chemistry C*, 120(43), 24917–24924. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b10303>
- Miller, O. D., Yablonovitch, E., & Kurtz, S. R. (2012). Strong Internal and External Luminescence as Solar Cells Approach the Shockley–Queisser Limit. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 2(3), 303–311. <https://doi.org/10.1109/JPHOTOV.2012.2198434>
- Nhat, P. V., Si, N. T., Tram, N. T. T., Duong, L. Van, & Nguyen, M. T. (2020). Elucidating the binding mechanism of thione-containing mercaptopurine and thioguanine drugs to small gold clusters. *Journal of Computational Chemistry*, 41(19), 1748–1758. <https://doi.org/10.1002/jcc.26216>
- Nhat, P. V., Duy, N. V. A., Tran, T. N., Si, N. T., Nguyen, T. A., To Van, N., Van Nghia, N., Schall, P., Dinh, V. A., & Dang, M. T. (2024a). Optoelectronic Properties of Nitrogen-Doped Hexagonal Graphene Quantum Dots: A First-Principles Study. *ACS Omega*, 9(18), 20056–20065. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c10501>
- Nhat, P. V., Duy, N. V. A., Tran, T. N., Si, N. T., Nguyen, T. A., To Van, N., Van Nghia, N., Schall, P., Dinh, V. A., & Dang, M. T. (2024b). Optoelectronic Properties of Nitrogen-Doped Hexagonal Graphene Quantum Dots: A First-Principles Study. *ACS Omega*, 9(18), 20056–20065. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c10501>
- Pan, D., Zhang, J., Li, Z., & Wu, M. (2010). Hydrothermal route for cutting graphene sheets into blue-luminescent graphene quantum dots. *Advanced Materials*, 22(6), 734–738. <https://doi.org/10.1002/adma.200902825>
- Park, H., Shin, D. J., & Yu, J. (2021). Categorization of Quantum Dots, Clusters, Nanoclusters, and Nanodots. *Journal of Chemical Education*, 98(3), 703–709. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c01403>
- Peng, J., Gao, W., Gupta, B. K., Liu, Z., Romero-Aburto, R., Ge, L., Song, L., Alemany, L. B., Zhan, X., Gao, G., Vithayathil, S. A., Kaiparettu, B. A., Marti, A. A., Hayashi, T., Zhu, J. J., & Ajayan, P. M. (2012). Graphene quantum dots derived from carbon fibers. *Nano Letters*, 12(2), 844–849. <https://doi.org/10.1021/nl2038979>

- Peyghan, A. A., & Beheshtian, J. (2020). Application of hexa-peri-hexabenzocoronene nanographene and its B, N, and Bn doped forms in Na-ion batteries: A density functional theory study. *Thin Solid Films*, 704, 137979. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.tsf.2020.137979>
- Prabhu, S. A., & Suganthy, V. K. R. (2020). Graphene quantum dots synthesis and energy application : a review. *Carbon Letters*, 0123456789. <https://doi.org/10.1007/s42823-020-00154-w>
- Prudnikau, A., Chuvilin, A., & Artemyev, M. (2013). CdSe-CdS nanoheteroplatelets with efficient photoexcitation of central CdSe region through epitaxially grown CdS wings. *Journal of the American Chemical Society*, 135(39), 14476–14479. <https://doi.org/10.1021/ja401737z>
- Roondhe, V., Roondhe, B., Saxena, S., Ahuja, R., & Shukla, A. (2023). On using non-Kekulé triangular graphene quantum dots for scavenging hazardous sulfur hexafluoride components. *Heliyon*, 9(4), e15388. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e15388>
- SCM AMS2023, *Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands*. (2023).
- Shockley, W., & Queisser, H. J. (1961). Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. *Journal of Applied Physics*, 32(3), 510–519. <https://doi.org/10.1063/1.1736034>
- Si, N. T., Nhung, N. T. A., Bui, T. Q., Nguyen, M. T., & Nhat, P. V. (2021). Gold nanoclusters as prospective carriers and detectors of pramipexole. *RSC Advances*, 11(27), 16619–16632. <https://doi.org/10.1039/d1ra02172a>
- Si, N. T., Nhat, P. V., Duy, N. V. A., Trang N. T. B., Nhan T. T., Ben, N. C., Anh, N. T., Triet, D. M., Schall, P., & Dinh, V. A. (2024). Polaronic defect enhances optoelectronic and transport properties of blue phosphorene quantum dots using first-principles methods. *Computational Materials Science*, 241, 113020. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113020>
- Swain, R. A., McVey, B. F. P., Virieux, H., Ferrari, F., Tison, Y., Martinez, H., Chaudret, B., Nayral, C., & Delpéch, F. (2020). Sustainable quantum dot chemistry: Effects of precursor, solvent, and surface chemistry on the synthesis of Zn3P2 nanocrystals. *Chemical Communications*, 56(22), 3321–3324. <https://doi.org/10.1039/c9cc09368k>
- Ta, L. T., Hamada, I., Morikawa, Y., & Dinh, V. A. (2021). Adsorption of toxic gases on borophene: Surface deformation links to chemisorptions. *RSC Advances*, 11(30), 18279–18287. <https://doi.org/10.1039/d1ra02738g>
- Tang, J. Y., Shen, J. S., Chen, L., Jiang, J. W., Lu, J., Zhao, X., & Dai, G. L. (2018). Investigation of carbon monoxide catalytic oxidation on vanadium-embedded graphene. *Monatshefte Fur Chemie*, 149(8), 1349–1356. <https://doi.org/10.1007/s00706-018-2181-3>
- Tessier, M. D., Spinicelli, P., Dupont, D., Patriarche, G., Ithurria, S., & Dubertret, B. (2014). Efficient exciton concentrators built from colloidal core/crown CdSe/CdS semiconductor nanoplatelets. *Nano Letters*, 14(1), 207–213. <https://doi.org/10.1021/nl403746p>
- Tran, T. N., Dinh, V. A., Van, N. L., Luong, H. D., Pham, D. T., Truong, T. T., Nguyen, H. Q., Dao, Q. D., Tran, T. K. C., Bui, H. T., Nguyen, D. T., Dang, M. N., Phan, V. V. T., & Truong, Q. D. (2021). Novel (110) Double-Layered Guanidinium-Lead Iodide Perovskite Material: Crystal Structure, Electronic Structure, and Broad Luminescence. *The Journal of Physical Chemistry C*, 125(1), 964–972. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c08540>
- Vorontsov, A. V., & Tretyakov, E. V. (2018). Determination of graphene's edge energy using hexagonal graphene quantum dots and PM7 method. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20(21), 14740–14752. <https://doi.org/10.1039/c7cp08411k>
- Wan, Z., Wang, Q. De, Liu, D., & Liang, J. (2021). Effectively improving the accuracy of PBE functional in calculating the solid band gap via machine learning. *Computational Materials Science*, 198. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110699>