



DOI:10.22144/ctujos.2026.012

VAI TRÒ CỦA KHUYẾT NGUYÊN TỬ VÀ ĐIỆN TRƯỜNG SONG SONG TRONG ĐIỀU KHIỂN TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ CỦA GRAPHENE NANORIBBONS: SỰ KHÁC BIỆT GIỮA DẠNG BIÊN ARMCHAIR VÀ ZIGZAG

Nguyễn Thị Kim Quyên^{1*}, Ngô Văn Chinh², Phạm Nguyễn Hữu Hạnh³ và Vũ Thanh Trà⁴

¹Khoa Khoa học cơ bản, Trường Đại học Y Dược Cần Thơ, Việt Nam

²Khoa Sau đại học, Đại học Cần Thơ, Việt Nam

³Trường THCS & THPT Thới Thuận, Cần Thơ, Việt Nam

⁴Trường Sư phạm, Đại học Cần Thơ, Việt Nam

*Tác giả liên hệ (Corresponding author): kimquyen929@gmail.com

Thông tin chung (Article Information)

Nhận bài (Received): 26/05/2025

Sửa bài (Revised): 19/06/2025

Duyệt đăng (Accepted): 30/12/2025

Title: Role of single vacancy and transverse electric field in controlling the electronic properties of graphene nanoribbons: Differences between armchair and zigzag edges

Author: Nguyen Thi Kim Quyên^{1*}, Ngo Van Chinh², Pham Nguyen Huu Hanh³ and Vu Thanh Tra⁴

Affiliation(s): ¹Faculty of Basic Science, Can Tho University of Medicine and Pharmacy, Viet Nam; ²Graduate School, College of Natural Sciences, Can Tho University, Viet Nam; ³Thoi Thuan Secondary & High School, Can Tho, Viet Nam; ⁴Department of Physics Education, School of Education, Can Tho University, Viet Nam

TÓM TẮT

Đề tài khảo sát cấu trúc điện tử và một số đặc trưng dẫn của graphene nanoribbons (GNRs) theo hai dạng biên armchair (AGNRs) và zigzag (ZGNRs) dưới tác dụng của khuyết một nguyên tử và điện trường song song bằng phương pháp gần đúng liên kết mạnh và phương pháp luận hàm Green. Khảo sát $M = 14$, kết quả cho thấy rằng, với sự tác động đồng thời của hai tác nhân, độ rộng vùng cấm của vật liệu đã mở ra, vật liệu đã có thể chuyển trạng thái từ kim loại sang bán dẫn - điện môi. Ngoài ra, kết quả cho thấy khuyết nguyên tử đóng vai trò mạnh mẽ trong cấu trúc AGNRs; trong khi đó, ảnh hưởng của điện trường song song lại chiếm ưu thế trong mô hình ZGNRs. Đặc biệt, với sự kết hợp của hai kích thích, hiệu ứng tổng hợp trở nên rõ nét hơn. Như vậy, các kết quả thu được mang ý nghĩa của việc gợi ý phát triển các mô hình tiên đoán, nhằm ứng dụng vật liệu AGNRs và ZGNRs trong các lĩnh vực nhiệt điện, điện tử và bán dẫn trong tương lai.

Từ khóa: Armchair graphene nanoribbons, cấu trúc vùng năng lượng, hệ số Seebeck, phương pháp gần đúng liên kết mạnh, zigzag graphene nanoribbons

ABSTRACT

The study investigates the electronic structure and the transport properties of graphene nanoribbons (GNRs) with both armchair (AGNRs) and zigzag (ZGNRs) edges under the influence of a single-atom vacancy and a transverse electric field by the tight-binding method and Green's function formalism. For a ribbon width of $M = 14$, the results indicate that the presence of the two factors leads to a bandgap opening, enabling the material to transition from metallic to semiconducting or insulating behavior. Furthermore, the results also show that the vacancy has a strong effect on AGNRs, while the transverse electric field exerts a stronger influence on ZGNRs. Notably, the combination of both factors produces a pronounced synergistic effect. Therefore, it can be seen that the impact of each type of external stimulus depends on the specific edge configuration and corresponding material structure, leading to distinct beneficial outcomes. As such, the obtained results provide a valuable suggestion for the development of predictive models that apply AGNRs and ZGNRs in future thermoelectric, nanoelectronic, and semiconductor technologies.

Keywords: Armchair graphene nanoribbons, band structure, Seebeck coefficient, tight binding model, zigzag graphene nanoribbon

1. GIỚI THIỆU

Với cấu trúc lục giác được tạo thành bởi các liên kết sp^2 làm cho các nguyên tử trong graphene liên kết trật tự theo một cấu trúc lý tưởng. Mỗi nguyên tử carbon sẽ tạo liên kết với 3 nguyên tử carbon khác với góc liên kết 120° làm cho graphene trở thành một vật liệu mang tính đối xứng cao (Novoselov et al., 2004; Geim & Novoselov, 2007; Neto et al., 2009). Mặc dù tính chất đối xứng đã giúp mang lại nhiều tính chất ưu việt cho graphene, tuy nhiên đối với một vài ứng dụng nhất định như điều chỉnh độ rộng vùng cấm năng lượng hay các ứng dụng trong spintronics (Yazyev, 2010; Avsar et al., 2020) và qubit lượng tử (Trauzettel et al., 2007) thì graphene không phải là một sự lựa chọn tối ưu.

Khi giới hạn kích thước của graphene theo một hướng cụ thể, graphene nanoribbons (GNRs) sẽ được hình thành với các tính chất thú vị, đặc biệt là sự hình thành vùng cấm năng lượng khi các electron có thể di chuyển một cách tự do khắp vật liệu như đối với graphene (Son et al., 2006; Han et al., 2007; Bai et al., 2009; Wakabayashi et al., 2010). Hơn nữa, độ rộng của vùng cấm năng lượng này không phải là cố định mà phụ thuộc vào dạng biên, độ rộng của dây graphene và cũng có thể thay đổi bởi các tác nhân kích thích bên ngoài, chẳng hạn như điện trường (Guo et al., 2007; Martins et al., 2007; Raza & Kan, 2008; Zheng & Xie, 2009; Lu & Guo, 2010). Do đó, GNRs mang lại một tiềm năng ứng dụng to lớn trong lĩnh vực khoa học vật liệu. Mặc dù có nhiều tiềm năng trong các ứng dụng hiện đại và có rất nhiều phương pháp chế tạo graphene đã và đang được nghiên cứu, nhưng phải thừa nhận rằng việc tạo ra GNRs hoàn hảo là cực kì khó khăn (Li et al., 2008; Wang et al., 2008; Jiao et al., 2009; Cai et al., 2010; Ruffieux et al., 2016).

Tuy nhiên, các nghiên cứu gần đây lại chứng minh rằng những vật liệu graphene sai hỏng vẫn đem lại các tính chất thú vị đối với các ứng dụng cụ thể. Một số nghiên cứu cho thấy các khuyết nguyên tử có thể tạo ra từ tính yếu trong graphene (Yazyev & Helm, 2007; Palacios et al., 2008; Ugeda et al., 2010), giúp mở ra khả năng ứng dụng trong các thiết bị spintronics (Yazyev, 2008; Nair et al., 2012). Bên cạnh đó, khuyết nguyên tử còn tạo ra các trạng thái electron mới trong cấu trúc graphene, hình thành các trạng thái bẫy electron (trap states) và dẫn đến những thay đổi trong tính chất dẫn điện của vật liệu. Hơn thế nữa, việc thay đổi kết cấu vật liệu sẽ dẫn đến việc thay đổi về đặc tính truyền dẫn của vật liệu (Balandin, 2011; Anno et al., 2014; Chung et al., 2016; Kolesnikov et al., 2016; Bazrafshan &

Khoeini, 2022; Zhang et al., 2022), đây là những vấn đề thiết thực ứng dụng vào trong nhu cầu con người. Ngoài ra, về mặt cơ học, mặc dù các khuyết nguyên tử thường làm suy yếu cấu trúc của graphene, nhưng trong một số trường hợp, các khuyết nguyên tử có thể kích hoạt các quá trình tái cấu trúc, giúp graphene có đạt được trạng thái ổn định mới (Kotakoski et al., 2011; Zhou et al., 2012; Zandiatashbar et al., 2014; Liu et al., 2015; López-Polín et al., 2015). Cụ thể, khi một hoặc nhiều nguyên tử carbon bị thiếu trong mạng tinh thể của graphene, các nguyên tử xung quanh có thể di chuyển để bù đắp cho sự mất mát này, khi đó, các liên kết carbon-carbon có thể thay đổi góc hoặc chiều dài để cải thiện năng lượng liên kết, tạo thành các cấu hình ổn định hơn, chẳng hạn như các vòng pentagon (5 cạnh) hoặc heptagon (7 cạnh) thay vì chỉ các vòng hexagon (6 cạnh) đặc trưng (Hashimoto et al., 2004; Zobelli et al., 2007; Lee et al., 2008; Banhart et al., 2011). Sự tái cấu trúc này giúp làm giảm năng lượng tổng thể của hệ thống, khiến khuyết nguyên tử trở nên ổn định hơn và khó bị tác động bởi các yếu tố bên ngoài như nhiệt độ hoặc áp lực.

Như vậy, bằng cách sử dụng các mô hình khuyết cũng như số lượng khuyết khác nhau, việc điều chỉnh tính dẫn điện của graphene để phù hợp với các ứng dụng khác nhau là hoàn toàn có thể được chủ động (Pereira & Schulz, 2008; Jafri et al., 2010; Teweldebrhan et al., 2010; Nanda et al., 2012; Zhang & Guo, 2020). Tuy nhiên, việc tạo ra sai hỏng ngay tại vị trí nào và mật độ sai hỏng là bao nhiêu để giúp vật liệu vừa có thể tái cấu trúc, vừa trở nên bền vững hơn và vừa có thể ứng dụng vào các ứng dụng khác nhau theo nhu cầu thực tế dường như vẫn chưa được triển khai nghiên cứu mạnh mẽ. Do đó, trong nghiên cứu này, tổng quát về ảnh hưởng của khuyết một nguyên tử lên hai loại biên và những thay đổi của chúng dưới tác nhân kích thích là điện trường được thực hiện khảo sát, góp phần đưa ra những dự đoán về khả năng ứng dụng của vật liệu trong thực tế.

Cụ thể, phương pháp gần đúng liên kết mạnh (Tight binding – TB) và phương pháp luận hàm Green được sử dụng để thực hiện các nội dung chính như sau: (i) Xây dựng mô hình tính toán tính chất điện tử của vật graphene nanoribbons theo hai dạng biên là armchair (AGNRs) và zigzag (ZGNRs); (ii) So sánh, đánh giá những ảnh hưởng của khuyết một nguyên tử lên tính chất điện tử của hai dạng biên; (iii) Khảo sát hệ số Seebeck S của vật liệu dưới tác động đồng thời của sai hỏng khuyết một nguyên tử và điện trường ngoài, từ đó đưa ra cái nhìn tổng quát

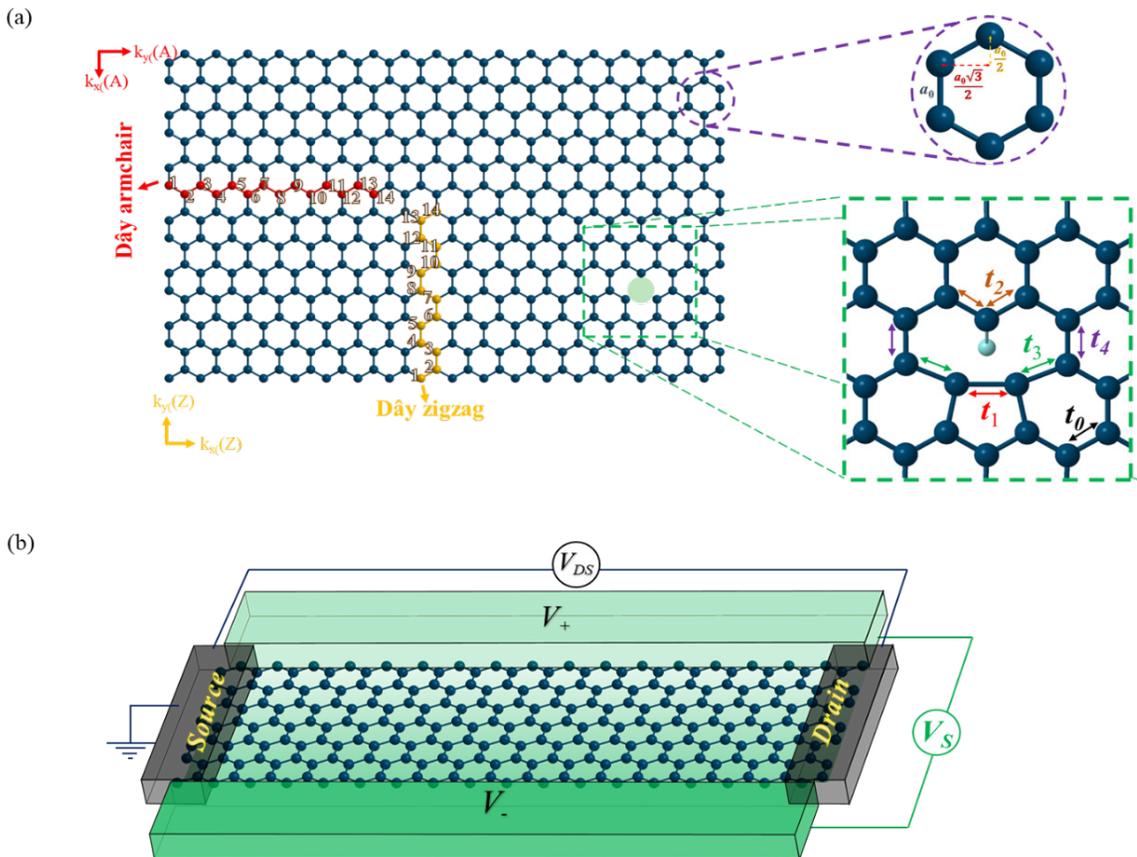
về khả năng điều khiển tính chất của vật liệu. Các kết quả tính toán sẽ được thể hiện cụ thể trong phần 3 của bài viết này.

2. MÔ HÌNH VÀ PHƯƠNG PHÁP TÍNH TOÁN

2.1. Mô hình

Cấu trúc vùng năng lượng theo hai dạng biên chính của GNRs về mặt cấu trúc là armchair và zigzag được tiến hành khảo sát và so sánh. Mặc dù các nguyên tử carbon gần nhau nhất vẫn cách nhau các khoảng đều đặn là $a = 0,142$ nm nhưng do sự khác biệt về mặt hình học, hai hệ trục tọa độ riêng biệt được sử dụng tính toán cho hai vật liệu như thể hiện ở Hình 1(a). Trong đó, hệ trục tọa độ màu đỏ sẽ được sử dụng để tính toán cho dạng biên armchair và hệ trục tọa độ màu cam sẽ được sử dụng cho dạng biên zigzag. Khi đó, nếu khảo sát đồng thời với hai dạng biên trên với 168 nguyên tử carbon trong cùng

1 ô cơ sở, mỗi ô sẽ bao gồm 12 dây và 14 nguyên tử mỗi dây thì độ rộng của dây nanoribbons sẽ là $W_{AGNRs} = 1,599$ nm và $W_{ZGNRs} = 1,349$ nm tương ứng hai dạng biên armchair và zigzag (Hình 1(a)). Trong trường hợp hoàn hảo, các nguyên tử carbon tương tác với các nguyên tử lân cận gần nhất với năng lượng tương tác t_0 . Khi có sự xuất hiện của sai hỏng, để đảm bảo tính ổn định của vật liệu, các nguyên tử carbon sẽ tiến hành quá trình tái cấu trúc để hình thành một vật liệu mới ổn định hơn mà điển hình là cấu trúc vòng 5-9 (El-Barbary et al., 2003; Hashimoto et al., 2004; Sahan & Berber, 2020; Nguyen et al., 2024). Do sự thay đổi trong cấu trúc khuyết sẽ dẫn đến sự xuất hiện các tương tác mới bao gồm t_1, t_2, t_3, t_4 (Nguyen et al., 2024) (Hình 1(a)). Hơn nữa, để khai thác khả năng thay đổi tính chất một cách linh hoạt của GNRs dưới tác dụng của điện trường, hai điện cực V_+ và V_- được sử dụng để tạo thành tạo ra điện trường nhằm khảo sát tác động lên vật liệu sai hỏng (Hình 1(b)).



Hình 1. Tấm graphene với hai dạng biên và các năng lượng tương tác theo mô hình khuyết một nguyên tử (a) và Mô hình tác động điện trường song song lên cấu trúc vật liệu (b)

2.2. Phương pháp tính toán

Cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu sẽ được khảo sát qua phương pháp gần đúng liên kết mạnh:

$$H = H_{00} + H_{01}e^{ikR_{01}} + H_{0-1}e^{ikR_{0-1}} + U_S. \quad (1)$$

Trong đó:

- H_{00}, H_{01} và H_{0-1} lần lượt là tương tác giữa các nguyên tử thuộc cell trung tâm với nhau và với các nguyên tử thuộc các cell lân cận phải và lân cận trái. Các ma trận này được xây dựng dựa trên sự tương tác giữa các nguyên tử với năng lượng tương tác như được thể hiện ở Hình 1(a).

- U_S là ma trận thể hiện sự tác động của các thành phần nhiễu loạn mà cụ thể ở đây là sự tác động của điện trường song song. Nếu chọn gốc thế năng tại vị trí nguyên tử thứ nhất, thì khi đó nguyên tử sẽ

nhận một lượng năng lượng tương tác là $-e\frac{V_s}{2}$. Tại các nguyên tử thuộc vị trí thứ i bất kỳ, biểu thức của điện thế mà điện trường song song cung cấp cho nguyên tử sẽ là:

$$V_s(i) = -\frac{V_s}{2} + E \times D(i); \quad (2)$$

với:

- $E = \frac{V_s}{W}$ là điện trường được tạo ra bởi hai

điện cực như hình 1(b).

$D(i)$ là khoảng cách tính từ nguyên tử thứ nhất đến nguyên tử thứ i . Giá trị của $D(i)$ theo mô hình được tính toán như bảng 1.

Bảng 1. Khoảng cách của các nguyên tử tính từ gốc tọa độ

i	1	2	3	4	5	6	...	M-1	M
$D_{AGNRs}(i)$	$0y_A$	$1y_A$	$2y_A$	$3y_A$	$4y_A$	$5y_A$...	$(M-2)y_A$	$(M-1)y_A$
$D_{ZGNRs}(i)$	$0y_Z$	$1y_Z$	$3y_Z$	$4y_Z$	$6y_Z$	$7y_Z$...	$(3M-3)y_Z$	$(3M-2)y_Z$

Trong đó: Với $y_A = \frac{a}{2}; y_Z = \frac{a\sqrt{3}}{2}$

Bên cạnh đó, để khảo sát sự phân bố của điện tử và hệ số Seebeck của vật liệu, phương pháp luận hàm Green (Datta, 2005) được sử dụng để tính toán, thể hiện trong các phương trình như sau:

$$DOS = \frac{i}{2\pi} \text{trace}[G - G^\dagger], \quad (3)$$

với $G = [(E + i\eta).I - H]^{-1}$.

Hệ số Seebeck ứng với thế hóa học μ và nhiệt độ T của vật liệu được tính toán dựa theo hình thức luận Landaure (D'Agosta, 2013; Lewenkopf & Mucciolo, 2013), cụ thể:

$$\left\{ \begin{array}{l} T_e(E) = \text{trace}(\Gamma_L G_D \Gamma_R G_D); \\ \Gamma_{L(R)} = i(\Sigma_{L(R)} - \Sigma_{R(L)}); \\ G_D = [E - H_D - \Sigma_L - \Sigma_R]; \\ L_n(\mu, T) = \frac{2}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T_e(E) \cdot (E - \mu)^n \cdot \frac{-\partial f_e(E, \mu, T)}{\partial E}; \\ S(\mu, T) = \frac{1}{e.T} \cdot \frac{L_1(\mu, T)}{L_0(\mu, T)} \end{array} \right. \quad (4)$$

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Ảnh hưởng của khuyết một nguyên tử lên cấu trúc điện tử của vật liệu

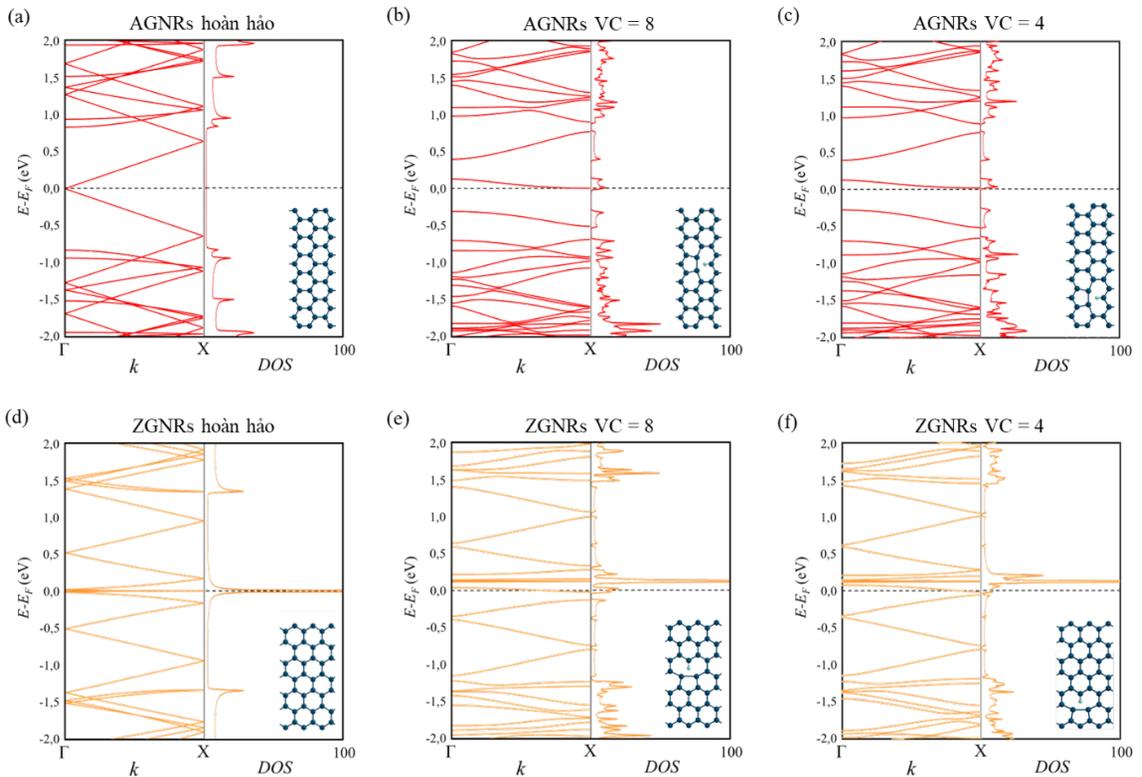
Theo các nghiên cứu trước đây về tính chất điện tử của GNRs, hai dạng biên của vật liệu sẽ cho các tính chất khác nhau (Brey & Fertig, 2006). Cụ thể, với dạng biên zigzag vật liệu thể hiện tính kim loại mạnh mẽ với việc tồn tại một khoảng flatband. Trong khi đó, cấu trúc với biên armchair lại cho một kết quả thú vị với tính chất điện tử thay đổi theo độ rộng của vật liệu (Yu et al., 2008). Do đó, để cho thấy một bức tranh tổng quát về ảnh hưởng của khuyết đơn nguyên tử lên cấu trúc vùng năng lượng của GNRs cho cả hai dạng biên, trên cấu trúc kim loại, ứng với chiều rộng ribbons của 14 nguyên tử ($M = 14$) của cả 2 dạng biên được tiến hành nghiên cứu, kết quả chi tiết về cấu trúc vùng năng lượng và tính chất điện tử của cả hai dạng biên được thể hiện ở Hình 2.

Trong nghiên cứu này, ảnh hưởng của từng vị trí sai hỏng khác nhau được khảo sát, do đó, nó lần lượt tạo ra các sai hỏng ở vị trí trung tâm và ở các nguyên tử gần biên. Kết quả khảo sát cho thấy, ở trạng thái hoàn hảo, khi chưa có sự xuất hiện của khuyết nguyên tử, cả hai dạng biên với $M = 14$ đều thể hiện tính kim loại với vùng dẫn và vùng hóa trị chồng phủ lên nhau Hình 2(a), 2(d). Khi có sự xuất hiện sai

hồng, cấu trúc vùng năng lượng của AGNRs và ZGNRs đều cho thấy sự thay đổi một cách rõ rệt. Trong đó, sự sai hỏng đã làm thay đổi cấu trúc vùng năng lượng với việc hình thành 2 vùng cấm con là E_{g1} và E_{g2} . Đây thực sự là một khám phá khá thú vị, mang ý nghĩa to lớn đối với việc ứng dụng trong điều khiển tính dẫn của vật liệu khi có thể thay đổi tính chất của vật liệu từ kim loại sang bán dẫn. Cụ thể, đối với cấu trúc AGNRs, độ rộng vùng cấm cũng như dạng cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu thay đổi một cách rõ rệt giữa trước và sau khi có sự tồn tại sai hỏng. Điều này dự đoán những thay đổi liên quan trong các tính chất khác nhau của vật liệu. Tuy nhiên, với các vị trí khuyết khác nhau, cụ thể là VC = 4 ở Hình 2(b), và VC = 8 ở Hình 2(c), dạng của cấu trúc vùng năng lượng không có sự thay đổi nhiều, hay nói cách khác, kết quả cho thấy rằng đối với cấu trúc AGNRs ứng với độ rộng ribbons M = 14, các vị trí khuyết khác nhau dường như sẽ không ảnh hưởng nhiều đến tính chất điện tử của vật liệu. Ngược lại, đối với cấu trúc ZGNRs, sự xuất hiện của sai hỏng ở những vị trí khác nhau đã để lại những ảnh hưởng khác nhau trong cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu, như thể hiện trên Hình 2(d)-(f). Tuy nhiên, dạng cấu trúc vùng gần mức Fermi thay

đổi không quá rõ rệt như dạng cấu trúc thu được từ mô hình AGNRs. Bên cạnh đó, kết quả cũng cho thấy rằng, ở vùng gần mức Fermi, ảnh hưởng của các vị trí khuyết thể hiện rõ ở vị trí gần biên, và giảm dần khi tiến đến tâm của ribbons, như thể hiện trên Hình 2(d)-(f). Điều này có thể được giải thích bởi cấu trúc ZGNRs tồn tại trạng thái biên định xứ, do đó, ở những vị trí biên sẽ thể hiện tính linh động của điện tử cao hơn, dẫn đến việc khuyết nguyên tử ở vị trí biên sẽ gây nên những ảnh hưởng mạnh mẽ hơn so với khuyết nguyên tử ở vị trí trung tâm. Do đó, trong những tính toán sau, ảnh hưởng tại vị trí khuyết trung tâm được tập trung khảo sát, ứng với VC = 8 cho cả hai mô hình.

Mặt khác, khi so sánh ảnh hưởng của khuyết đơn nguyên tử với độ dài ribbons khác nhau, ứng với các giá trị M khác nhau, cụ thể là M = 14 của nghiên cứu hiện tại và M = 15 của nghiên cứu trước (Nguyen et al., 2024), kết quả nhận được như được thể hiện trên Bảng 2. Kết quả cho thấy rằng, khuyết tật đơn nguyên sẽ có tác động mạnh mẽ hơn trong cấu trúc của AGNRs ứng với trạng thái kim loại (trùng ứng với M = 14).



Hình 2. Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái (DOS) của hai dạng biên

Ghi chú: (a)-(c): AGNRs; (d)-(f): ZGNRs

Bảng 2. Sự khác biệt trong độ rộng vùng cấm của AGNRs giữa M=14 và M=15

Độ rộng ribbons	Cấu trúc hoàn hảo	Cấu trúc khuyết và tái cấu trúc VC = 8	
M=14	$E_g = 0$ meV	$E_{g1} = 267,3$ meV	$E_{g2} = 312,6$ meV
M=15	$E_g = 543,6$ meV	$E_{g1} = 532,7$ meV	$E_{g2} = 452,2$ meV

Ngoài ra, nguyên nhân dẫn đến sự chênh lệch của ảnh hưởng mà khuyết nguyên tử mang lại đối với hai cấu trúc AGNRs và ZGNRs nằm ở bản chất nội tại của vật liệu. Mặc dù cả hai vật liệu được khảo sát đều ứng với $M = 14$ nhưng AGNRs có cấu trúc vùng năng lượng thay đổi theo độ rộng của dây khi luân phiên thể hiện tính kim loại (đối với nhóm $3p+2$) và tính bán dẫn - điện môi (đối với nhóm $3p$ và $3p+1$). Ngược lại, cấu trúc ZGNRs luôn thể hiện tính chất kim loại với các độ rộng dây khác nhau. Hay nói cách khác, AGNRs thể hiện tính kim loại yếu hơn ZGNRs nên ảnh hưởng của sai hỏng lên AGNRs là mạnh mẽ hơn. Mặt khác, đồ thị mật độ trạng thái (DOS) ở bên phải các cấu trúc vùng cũng khẳng định rằng mật độ trạng thái của điện tử tập trung nhiều hơn ở gần mức Fermi đối với cấu trúc ZGNRs (khi xét trong cùng điều kiện khuyết), điều này cho thấy điều kiện kích thích cần mạnh mẽ hơn để có thể tác động làm thay đổi trật tự sắp xếp cũng như cấu trúc điện tử của vật liệu này.

Do đó, để có thể đưa ra nhiều lựa chọn cho các tác nhân kích thích cũng như điều khiển trạng thái dẫn của vật liệu, ảnh hưởng đồng thời của khuyết một nguyên tử và điện trường song song lên cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái của hai biên vật liệu được tiến hành khảo sát.

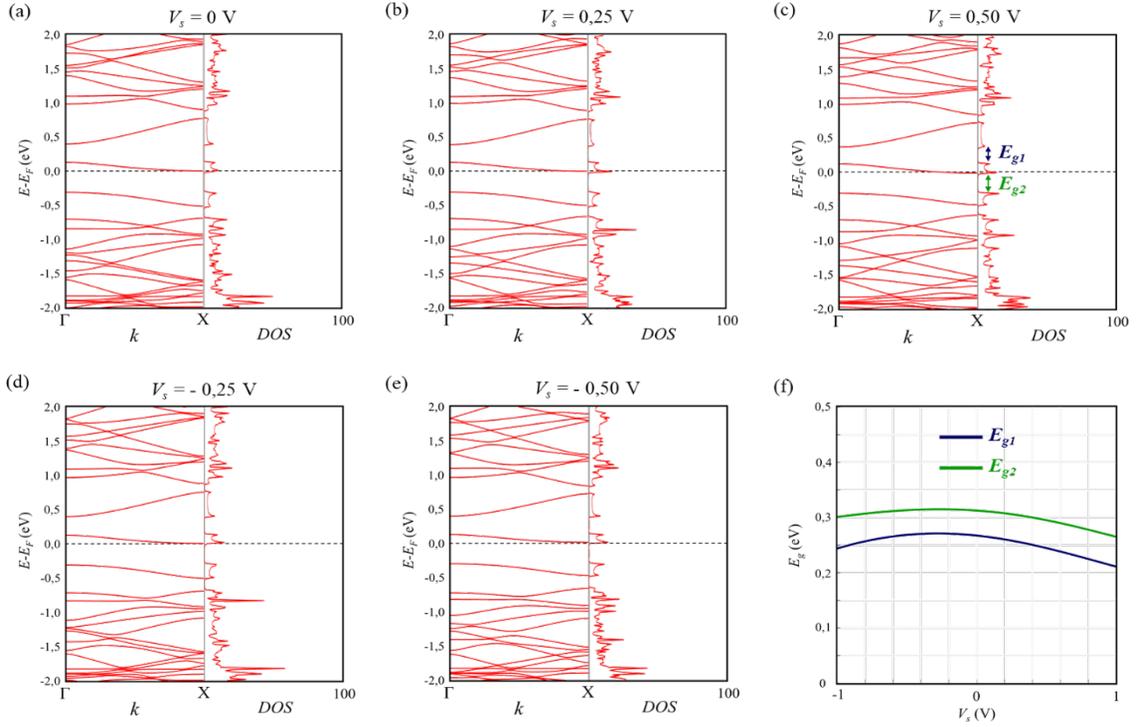
3.2. Ảnh hưởng đồng thời của khuyết một nguyên tử và điện trường ngoài lên các đặc trưng dẫn của vật liệu

Kết quả sự thay đổi của cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái của AGNRs và ZGNRs dưới tác dụng của điện trường song song được trình bày chi tiết thông qua Hình 3 và Hình 4.

Trên các kết quả được thể hiện tại Hình 3(a)-(c), cho thấy dưới tác dụng của điện trường song song, ứng với các giá trị điện thế lần lượt là $V_s = 0$ V, $V_s = 0,25$ V và $V_s = 0,5$ V, độ rộng vùng cấm của vật liệu dường như không có sự thay đổi. Bên cạnh đó, đồ thị DOS (đường màu đỏ, bên phải) cũng cho thấy sự tương đồng của sự phân bố điện tử quanh mức Fermi dưới tác dụng của điện trường ngoài. Đồng thời, với các giá trị điện thế âm, dạng của các mức năng lượng trong cấu trúc vùng cũng không có sự thay đổi rõ rệt, như thể hiện trên Hình 3(d)-(e). Đặc biệt, kết quả

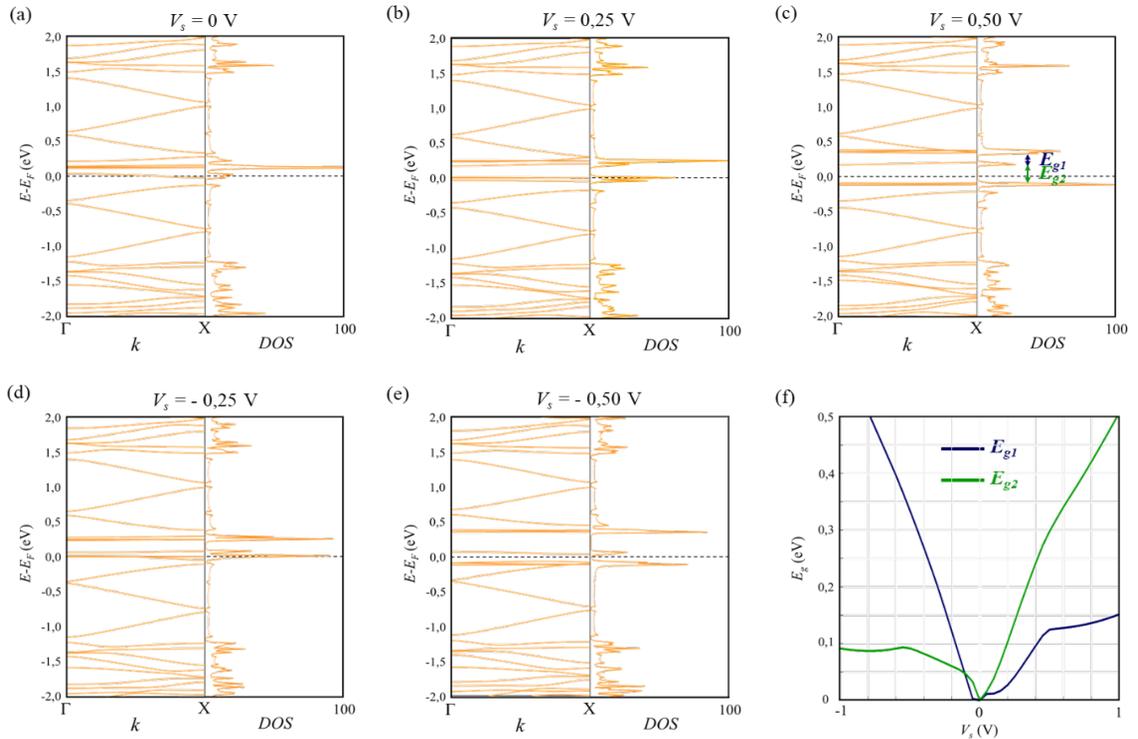
trên Hình 3(f) đã cho thấy, khi ta tăng giá trị của điện thế V_s , độ rộng ở cả hai vùng cấm E_{g1} và E_{g2} đều giảm, tuy nhiên, sự giảm là không đáng kể so với khi chưa áp trường. Như vậy, ứng với $M = 14$, điện trường song song không có tác động mạnh trong việc điều khiển trạng thái dẫn của AGNRs.

Trong khi đó, các kết quả thu được là hoàn toàn ngược lại so với ZGNRs, như thể hiện trên Hình 4. Kết quả trên cho thấy rằng, dưới ảnh hưởng của điện trường song song, độ rộng vùng cấm của ZGNRs được mở ra một cách mạnh mẽ, đồng thời, ảnh hưởng của sai hỏng khuyết một nguyên tử dường như bị thu nhỏ lại. Cụ thể, với sự tồn tại của khuyết tật một nguyên tử trong mạng graphene, một số nguyên tử lân cận mất liên kết, kéo theo sự biến dạng cục bộ trong mạng tinh thể do quá trình tái cấu trúc. Sự biến dạng này làm thay đổi phân bố điện tích và ảnh hưởng đến tương tác giữa điện tử và các ion gần vùng khuyết. Kết quả là thể năng trong vùng khuyết trở nên sai khác so với vùng hoàn hảo, dẫn đến sự thay đổi trong độ linh động của điện tử. Trong một số trường hợp, điện tử có thể bị giữ lại cục bộ - hình thành nên trạng thái polaron bị bẫy (William et al., 2016; Ribeiro et al., 2018). Trạng thái này đồng thời tạo ra một mức năng lượng mới nằm giữa vùng hóa trị và vùng dẫn, được gọi là mức midgap, như thể hiện trên Hình 4(a). Đặc biệt, với sự xuất hiện của điện trường song song, năng lượng của từng vị trí nguyên tử sẽ thay đổi từ biên vào trung tâm của ribbons, điều này càng củng cố hơn việc sắp xếp lại trật tự của các điện tử ở các mức năng lượng. Trong đó, kết quả trên Hình 4(b)-(e) đã cho thấy rõ các mức năng lượng này sẽ dịch chuyển về đỉnh vùng hóa trị và đáy vùng dẫn, hình thành nên độ rộng vùng cấm E_{g1}/E_{g2} vào khoảng 32,7/162,4 (meV) và 120,4/263,4 (meV) ứng với giá trị điện thế lần lượt là $V_s = 0,25$ V và $V_s = 0,5$ V. Hơn thế nữa, kết quả trên Hình 4(f) đã cho thấy rằng, khi ta tăng các giá trị điện thế áp vào, độ rộng vùng cấm của vật liệu càng được mở ra mạnh mẽ hơn. Hay nói cách khác, kết quả khảo sát đã cho thấy rằng, việc tác động điện trường lên từng vị trí nguyên tử, kết hợp với trạng thái biên định xứ nội tại của ZGNRs đã có tác động mạnh mẽ hơn trong việc điều khiển độ rộng vùng cấm của vật liệu.



Hình 3. Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ điện tử (DOS) của AGNRs ứng với các giá trị điện thế

Ghi chú: (a) $V_s = 0$ V; (b) $V_s = 0,25$ V; (c) $V_s = 0,5$ V; (d) $V_s = -0,25$ V; (e) $V_s = -0,5$ V; (f) E_g là hàm của V_s



Hình 4. Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ điện tử (DOS) của AGNRs ứng với các giá trị điện thế

Ghi chú: (a) $V_s = 0$ V; (b) $V_s = 0,25$ V; (c) $V_s = 0,5$ V; (d) $V_s = -0,25$ V; (e) $V_s = -0,5$ V; (f) E_g là hàm của V_s

Bảng 2. Độ rộng vùng cấm của AGNRs và ZGNRs với mô hình khuyết một nguyên tử và chiều dài ribbons $M = 14$ ứng với các giá trị điện thế khác nhau

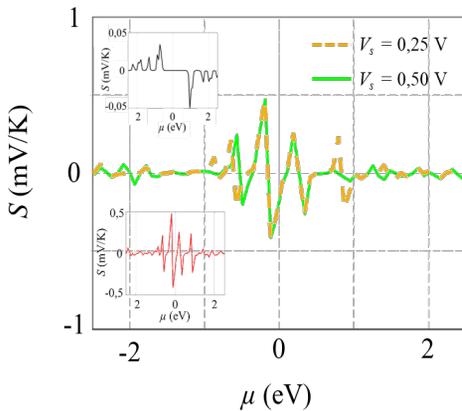
Mô hình		$V_s = -0,50$ V	$V_s = -0,25$ V	$V_s = 0$ V	$V_s = 0,25$ V	$V_s = 0,50$ V
AGNRs	E_{g1} (meV)	286,6	271,1	267,3	258,2	244,7
	E_{g2} (meV)	313,3	315,0	312,6	306,0	295,2
ZGNRs	E_{g1} (meV)	282,7	163,8	0	32,7	120,4
	E_{g2} (meV)	113,1	50,1	0	162,4	263,4

Ngoài ra, để tổng quát hơn ảnh hưởng của điện trường song song lên sự thay đổi tính chất điện tử của vật liệu, kết quả được thể hiện tại Bảng 2 cho thấy sự so sánh độ rộng vùng cấm của hai mô hình ứng với các giá trị điện thế áp vào. Một lần nữa, kết quả cho thấy rằng, với mô hình khuyết một nguyên tử, độ rộng vùng cấm của AGNRs được mở ra mạnh mẽ hơn dưới ảnh hưởng của điện trường ngoài, tuy nhiên, sự thay đổi cường độ điện trường không dẫn đến sự biến thiên đáng kể trong giá trị vùng cấm của

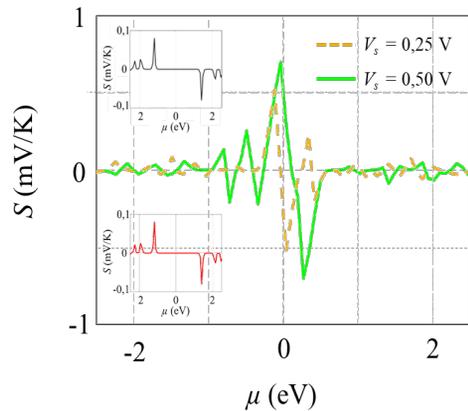
vật liệu. Điều này hoàn toàn ngược lại với kết quả thu được cho mô hình ZGNRs, bởi độ rộng vùng cấm của vật liệu thể hiện sự nhạy cảm hơn trước sự thay đổi của các giá trị điện thế khác nhau.

Hơn thế nữa, để khảo sát ảnh hưởng đồng thời của khuyết và điện trường ngoài lên các đặc trưng dẫn của vật liệu, sự thay đổi hệ số Seebeck với các giá trị điện thế khác nhau được khảo sát, kết quả thể hiện cụ thể trên Hình 5.

(a)



(b)



Hình 5. Hệ số Seebeck của vật liệu ứng với các giá trị điện thế khác nhau của hai mô hình

Ghi chú: (a) AGNRs, $VC = 8$; (b) ZGNRs, $VC = 8$

Kết quả được thể hiện ở Hình 5 cho thấy sự khảo sát hệ số Seebeck của hai cấu trúc AGNRs và ZGNRs dưới tác dụng đồng thời của khuyết một nguyên tử và điện trường song song, dưới tác dụng của điện trường ngoài, hệ số S_{max} thu được là lớn hơn so với khi chỉ chịu ảnh hưởng của khuyết (hình nhỏ màu đỏ) ở cả hai mô hình, cụ thể như sau:

Khi chưa chịu tác động của ảnh hưởng ngoài (bao gồm cả khuyết và điện trường ngoài), hệ số S_{max} thu được ở cấu trúc AGNRs và ZGNRs lần lượt là 0,034 mV/K và 0,08 mV/K, như thể hiện trên hình nhỏ màu đen ở Hình 5(a) và (b). Kết quả thu được là khá nhỏ bởi trạng thái ban đầu cả hai vật liệu đều thể hiện tính chất kim loại. Tuy nhiên, với sự xuất

hiện của khuyết một nguyên tử, độ rộng vùng cấm trong cấu trúc AGNRs được thay đổi, điều này dẫn đến sự gia tăng hệ số S_{max} của cấu trúc, như thể hiện ở hình nhỏ màu đỏ trên Hình 5(a). Dưới ảnh hưởng của khuyết một nguyên tử, hệ số Seebeck được tách thành 4 đỉnh phụ, tương ứng với 4 vùng cấm nhỏ xung quanh mức Fermi, trong đó, hệ số S_{max} thu được là 0,476 mV/K, ứng với thế hóa học $\mu = -0,19$ eV. Khi tác động điện trường và tăng giá trị điện thế áp vào, hệ số Seebeck của vật liệu tăng đạt giá trị 0,474 mV/K ứng với giá trị $V_s = 0,25$ V. Tuy nhiên, khi tăng giá trị điện thế áp lên $V_s = 0,50$ V thì hệ số S_{max} dường như không có sự thay đổi. Điều này hoàn toàn tương đồng với kết quả thu được từ cấu trúc vùng năng lượng của vật liệu và một lần

nửa khẳng định rằng, điện trường song song không gây ảnh hưởng nhiều đến các tính chất của vật liệu trong mô hình khuyết một nguyên tử của AGNRs, ứng với $M = 14$. Trong khi đó, với cấu trúc ZGNRs, sự thay đổi thể hiện rõ ràng hơn. Cụ thể, với giá trị điện thế $V_s = 0,25$ V, hệ số $S_{max} = 0,524$ mV/K, khi tăng điện thế $V_s = 0,50$ V, hệ số S_{max} tăng lên bằng 0,699 mV/K. Như vậy, các kết quả thu được từ bài toán nhiệt điện của vật liệu đã cho thấy rằng, đối với cấu trúc AGNRs, ảnh hưởng của khuyết một nguyên tử lên các tính chất truyền dẫn của vật liệu là mạnh mẽ, tuy nhiên, ảnh hưởng của điện trường ngoài lại thể hiện mạnh mẽ trong cấu trúc ZGNRs.

4. KẾT LUẬN VÀ ĐỀ XUẤT

Dựa trên phương pháp gần đúng liên kết mạnh và phương pháp luận hàm Green, mô hình tính toán khuyết đơn nguyên tử cho hai cấu trúc là AGNRs và ZGNRs đã được xây dựng thành công trong đề tài. Kết quả khảo sát cho thấy khuyết đơn nguyên tử và điện trường song song có tác động mạnh mẽ trong việc điều khiển độ rộng vùng cấm cũng như trạng

thái dẫn điện, nhiệt của vật liệu. Trong đó, độ dài ribbons ứng với $M = 14$, vật liệu được chuyển trạng thái từ kim loại sang bán dẫn – điện môi. Đồng thời, dưới tác động đồng thời của hai kích thích, hệ số Seebeck, đặc trưng cho khả năng chuyển đổi nhiệt – điện của vật liệu cũng tăng đáng kể, vào khoảng 0,474mV/K cho cấu trúc AGNRs và 0,699 mV/K cho cấu trúc ZGNRs. Đặc biệt, kết quả cho thấy, sai hỏng khuyết đơn nguyên tử đóng vai trò quan trọng trong cấu trúc AGNRs, trong khi đó, ảnh hưởng của điện trường song song là mạnh mẽ trong cấu trúc ZGNRs. Đây là những dự đoán ban đầu góp phần định hướng ứng dụng vật liệu AGNRs và ZGNRs vào nhiều lĩnh vực tiềm năng, bao gồm công nghệ nhiệt điện, điện tử nano, bóng bán dẫn,...

LỜI CẢM ƠN

Nhóm tác giả xin chân thành cảm ơn sự hỗ trợ kinh phí của Trường Đại học Y Dược Cần Thơ cho đề tài cấp cơ sở, mã số KHCB.CB.2407.

TÀI LIỆU THAM KHẢO (REFERENCES)

- Anno, Y., Imakita, Y., Takei, K., Akita, S., & Arie, T. (2014). Enhancement of graphene thermoelectric performance through defect engineering. *2D Materials*, 2(3), 035009. <https://doi.org/10.1088/2053-1583/2/3/035009>
- Avsar, A., Ochoa, H., Guinea, F., Özyilmaz, B., van Wees, B. J., & Vera-Marun, I. J. (2020). Colloquium: Spintronics in graphene and other two-dimensional materials. *Reviews of Modern Physics*, 92(2), 021003. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.92.021003>
- Bai, J., Duan, X., & Huang, Y. (2009). Rational fabrication of graphene nanoribbons using a nanowire etch mask. *Nano Letters*, 9(5), 2083–2087. <https://doi.org/10.1021/nl900531n>
- Balandin, A. A. (2011). Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials. *Nature Materials*, 10(8), 569–581. <https://doi.org/10.1038/nmat3064>
- Banhart, F., Kotakoski, J., & Krasheninnikov, A. V. (2011). Structural defects in graphene. *ACS Nano*, 5(1), 26–41. <https://doi.org/10.1021/nn102598m>
- Bazrafshan, M. A., & Khoeini, F. (2022). Tuning phononic and electronic contributions of thermoelectric in defected S-shape graphene nanoribbons. *Scientific Reports*, 12, 15230. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-19257-1>
- Brey, L., & Fertig, H. A. (2006). Electronic states of graphene nanoribbons. *Physical Review B*, 73(23), 235411. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.235411>
- Cai, J., Ruffieux, P., Jaafar, R., Bieri, M., Braun, T., Blankenburg, S., Muoth, M., Seitsonen, A.P., Saleh, M., Feng, X., Müllen, K., & Fasel, R. (2010). Atomically precise bottom-up fabrication of graphene nanoribbons. *Nature*, 466(7305), 470–473. <https://doi.org/10.1038/nature09211>
- Neto, C. A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1), 109–162. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- Chung, H.-C., Chang, C.-P., Lin, C.-Y., & Lin, M.-F. (2016). Electronic and optical properties of graphene nanoribbons in external fields. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(11), 7573–7590. <https://doi.org/10.1039/C5CP06533J>
- D’Agosta, R. (2013). Towards a dynamical approach to the calculation of the figure of merit of thermoelectric nanoscale devices. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15, 1758–1765. <https://doi.org/10.1039/C2CP42594G>
- Datta, S. (2005). Quantum transport: Atom to transistor. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139164313>
- Da Cunha, W. F., de Oliveira Neto, P. H. O., Terai, A., & e Silva, G. M. (2016). Dynamics of charge carriers on hexagonal nanoribbons with vacancy

- defects. *Physical Review B*, 94(1), 014301.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.014301>
- El-Barbary, A. A., Telling, R. H., Ewels, C. P., Heggie, M. I., & Briddon, P. R. (2003). Structure and energetics of the vacancy in graphite. *Physical Review B*, 68(14), 144107.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.144107>
- Geim, A. K., & Novoselov, K. S. (2007). The rise of graphene. *Nature Materials*, 6(3), 183–191.
<https://doi.org/10.1038/nmat1849>
- Guo, J., Gunlycke, D., & White, C. T. (2007). Field effect in graphene nanoribbons: Ab initio study. *Applied Physics Letters*, 91(14), 143103.
<https://doi.org/10.1063/1.2789674>
- Han, M. Y., Özyilmaz, B., Zhang, Y., & Kim, P. (2007). Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons. *Physical Review Letters*, 98(20), 206805.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.206805>
- Hashimoto, A., Suenaga, K., Gloter, A., Urita, K., & Iijima, S. (2004). Direct evidence for atomic defects in graphene layers. *Nature*, 430(7002), 870–873.
<https://doi.org/10.1038/nature02817>
- Jafri, S. H. M., Carva, K., Widenkvist, E., Blom, T., Sanyal, B., Fransson, J., Eriksson, O., Jansson, U., Grennberg, H., Karis, O., Quinlan, R. A., Holloway, B. C., & Leifer, K. (2010). Conductivity engineering of graphene by defect formation. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 43(4), 405404.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/43/4/045404>
- Jiao, L., Zhang, L., Wang, X., Diankov, G., & Dai, H. (2009). Narrow graphene nanoribbons from carbon nanotubes. *Nature*, 458(7240), 877–880.
<https://doi.org/10.1038/nature07919>
- Kolesnikov, D. V., Osipov, V. A., & Sadykova, O. G. (2016). Enhancement of thermoelectric figure of merit in zigzag graphene nanoribbons with periodic edge vacancies. *International Journal of Modern Physics B*, 31(15), 1750124.
<https://doi.org/10.1142/S0217979217501247>
- Kotakoski, J., Krasheninnikov, A. V., Kaiser, U., & Meyer, J. C. (2011). From point defects in graphene to two-dimensional amorphous carbon. *Physical Review Letters*, 106(10), 105505.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.105505>
- Lee, G.-D., Wang, C. Z., Yoon, E., Hwang, N.-M., Kim, D.-Y., & Ho, K.-M. (2008). The formation of pentagon–heptagon pair defect by the reconstruction of a vacancy hole in carbon nanotube. *Applied Physics Letters*, 92(4), 043104.
<https://doi.org/10.1063/1.2837632>
- Lewenkopf, C. H., & Mucciolo, E. R. (2013). The recursive Green’s function method for graphene. *Journal of Computational Electronics*. 12(2), 203–231.
<https://doi.org/10.1007/s10825-013-0458-7>
- Li, X., Wang, X., Zhang, L., Lee, S., & Dai, H. (2008). Chemically derived, ultrasmooth graphene nanoribbon semiconductors. *Science*, 319(5867), 1229–1232.
<https://doi.org/10.1126/science.1150878>
- Liu, L., Qing, M., Wang, Y., & Chen, S. (2015). Defects in graphene: Generation, healing, and their effects on the properties of graphene. *Journal of Materials Science & Technology*, 31(6), 599–606.
<https://doi.org/10.1016/j.jmst.2014.11.019>
- Lu, Y., & Guo, J. (2010). Band gap of strained graphene nanoribbons. *Nano Research*, 3(3), 189–199.
<https://doi.org/10.1007/s12274-010-1022-4>
- López-Polín, G., Gómez-Navarro, C., Parente, V., Guinea, F., Katsnelson, M. I., Pérez-Murano, F., & Gómez-Herrero, J. (2015). Increasing the elastic modulus of graphene by controlled defect creation. *Nature Physics*, 11(1), 26–31.
<https://doi.org/10.1038/nphys3183>
- Martins, T. B., Miwa, R. H., da Silva, A. J. R., & Fazzio, A. (2007). Electronic and transport properties of boron-doped graphene nanoribbons. *Physical Review Letters*, 98(19), 196803.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.196803>
- Nair, R. R., Sepioni, M., Tsai, I.-L., Lehtinen, O., Keinonen, J., Krasheninnikov, A. V., Thomson, T., & Geim, A. K. (2012). Spin-half paramagnetism in graphene induced by point defects. *Nature Physics*, 8(3), 199–202.
<https://doi.org/10.1038/nphys2183>
- Nanda, B. R. K., Sherafati, M., Popović, Z., & Satpathy, S. (2012). Electronic structure of the substitutional vacancy in graphene: Density-functional and Green’s function studies. *New Journal of Physics*, 14, 083004
<https://doi.org/10.1088/13672630/14/8/083004>
- Nguyen, T. K. Q., Pham, N. H. H., & Vu, T., T. (2024). The influence of the vacancy and the external electric field in the electronic structure and the thermoelectric of monolayer armchair graphene nanoribbons. *CTU Journal of Science*, 60, 185–193.
<http://doi.org/10.22144/ctujos.2024.370>
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., & Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696), 666–669.
<https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- Palacios, J. J., Fernández-Rossier, J., & Brey, L. (2008). Vacancy-induced magnetism in graphene and graphene ribbons. *Physical Review B*,

- 77(19), 195428.
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.77.195428>
- Pereira, A. L. C., & Schulz, P. A. (2008). Additional levels between Landau bands due to vacancies in graphene: towards a defect engineering. *Physical Review B*, 78(12), 125402.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.125402>
- Raza, H., & Kan, E. C. (2008). Armchair graphene nanoribbons: Electronic structure and electric field modulation. *Physical Review B*, 77(24), 245434.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.245434>
- Ribeiro, L.A., da Silva, G.G., de Sousa, R.T., de Almeida Fonseca, A. L., da Cunha, W.F., & Silva, G. M. (2018). Spin-Orbit Effects on the Dynamical Properties of Polarons in Graphene Nanoribbons. *Scientific Reports*, 8, 1914.
<https://doi.org/10.1038/s41598-018-19893-y>
- Ruffieux, P., Wang, S., Yang, B., Sánchez-Sánchez, C., Liu, J., Dienel, T., Talirz, L., Shinde, P., Pignedoli, C. A., Passerone, D., Dumslaff, T., Feng, X., Müllen, K., & Fasel, R. (2016). On-surface synthesis of graphene nanoribbons with atomically precise edges. *Nature*, 531(7595), 489–492.
<https://doi.org/10.1038/nature17151>
- Sahan, Z., & Berber, S. (2020). Monovacancy in achiral and chiral graphene nanoribbons. *Computational Condensed Matter*, 23(5696), e00471.
<https://doi.org/10.1016/j.cocom.2020.e00471>
- Son, Y. W., Cohen, M. L., & Louie, S. G. (2006). Energy gaps in graphene nanoribbons. *Physical Review Letters*, 97(21), 216803.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.216803>
- Teweldebbrhan, D., Goyal, V., & Balandin, A. A. (2010). Controlling defects in graphene for optimizing the electrical properties of graphene nanodevices. *ACS Nano*, 4(11), 6697–6704.
<https://doi.org/10.1021/nn101187z>
- Trauzettel, B., Bulaev, D. V., Loss, D., & Burkard, G. (2007). Spin qubits in graphene quantum dots. *Nature Physics*, 3(3), 192–196.
<https://doi.org/10.1038/nphys544>
- Ugeda, M. M., Brihuega, I., Guinea, F., & Gómez-Rodríguez, J. M. (2010). Missing atom as a source of carbon magnetism. *Physical Review Letters*, 104(9), 096804.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.096804>
- Wakabayashi, K., Sasaki, K.-i., Nakanishi, T., & Enoki, T. (2010). Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions. *Science and Technology of Advanced Materials*, 11(5), 054504.
<https://doi.org/10.1088/1468-6996/11/5/054504>
- Wang, X., Ouyang, Y., Li, X., Wang, H., Guo, J., & Dai, H. (2008). Room-temperature all-semiconducting sub-10-nm graphene nanoribbon field-effect transistors. *Physical Review Letters*, 100(20), 206803.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.206803>
- Yazyev, O. V., & Helm, L. (2007). Defect-induced magnetism in graphene. *Physical Review B*, 75(12), 125408.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.125408>
- Yazyev, O. V. (2008). Magnetism in disordered graphene and irradiated graphite. *Physical Review Letters*, 101(3), 037203.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.037203>
- Yazyev, O. V. (2010). Emergence of magnetism in graphene materials and nanostructures. *Reports on Progress in Physics*, 73(5), 056501.
<https://doi.org/10.1088/0034-4885/73/5/056501>
- Yu, S. S., Wen, Q. B., Zheng, W. T., & Jiang, Q. (2008). Electronic properties of graphene nanoribbons with armchair-shaped edges. *Molecular Simulation*, 34(10-15), 1085-1090.
<https://doi.org/10.1080/08927020801958795>
- Zandiatahshbar, A., Lee, G.-H., An, S. J., Lee, S., Mathew, N., Terrones, M., Hayashi, T., Picu, C. R., Hone, J., & Koratkar, N. (2014). Effect of defects on the intrinsic strength and stiffness of graphene. *Nature Communications*, 5, 3186.
<https://doi.org/10.1038/ncomms4186>
- Zhang, Y., & Guo, W. (2020). Stone–Wales defect and vacancy-assisted enhanced atomic orbital interactions between graphene and ambient gases: A first-principles insight. *Journal of Physical Chemistry C*, 124(50), 27528–27536.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c08395>
- Zhang, Y., Li, X., & Wang, J. (2022). Effect of Vacancy Defects on the Vibration Frequency of Graphene Nanoribbons. *Nanomaterials*, 12(5), 764.
<https://doi.org/10.3390/nano12050764>
- Zheng, H., & Xie, X. C. (2009). Tuning the band gap of graphene nanoribbons by transverse electric fields. *Applied Physics Letters*, 94(6), 062107.
<https://doi.org/10.1063/1.3080612>
- Zhou, W., Lee, J., Nanda, J., Pantelides, S. T., & Pennycook, S. J. (2012). Atomically resolved imaging of the structure, morphology, and dynamics of dislocations in graphene. *Nature Communications*, 3, 1124.
<https://doi.org/10.1038/ncomms2128>
- Zobelli, A., Ewels, C. P., Gloter, A., & Seifert, G. (2007). Vacancy migration in graphene monolayers: Atomistic simulations. *Physical Review B*, 75(24), 245402.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.245402>