



بررسی خواص الکترونی نانونوارهای مکسین منتهی شده با M_2XT_2 ($M=Ti, Zr, Sc$ & $X=C$ & $T=O, F$) حاشیه دسته مبلی

مهدی شیرازی نیا^{۱*}، ادریس فیض آبادی^۲

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت ایران، (mahdishirazi120674@gmail.com)

۲- استاد، دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت ایران، (edris@iust.ac.ir)

خلاصه

نانونوارها به دلیل اثرات منحصربه‌فرد محدودیت کوانتومی[†] و اثر سطحی[‡] خود، پتانسیل بالایی برای کاربرد در نانوالکترونیک و نانواسپینترونیک دارند. به عنوان مثال، نانونوارهای گرافن که از برش گرافن دو بعدی به دست می‌آیند، خواص الکترونی و مغناطیسی متنوعی را که تحت تأثیر خاصیت ساختار لبه آنها قرار می‌گیرد، از خود نشان می‌دهند. در این مطالعه، در ابتدا به طریقه‌ی ساختن نانونوارها با حاشیه دسته مبلی[§] با اندازه‌های مختلف از مواد دوبعدی انتخاب شده یعنی مکسین های منتهی شده $Ti_2CO_2, Zr_2CO_2, Sc_2CF_2$ می‌پردازیم و سپس با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی^{**}، خواص الکترونی آنها را بررسی می‌کنیم. در این مطالعه خواهیم دید که اثر لبه‌ای نانونوارها به عنوان یک عامل حیاتی در تأثیرگذاری بر خواص الکترونی آنها ظاهر می‌شود.

کلمات کلیدی: نانونوار، مکسین، حاشیه دسته مبلی، خواص الکترونیکی، نظریه تابعی چگالی

[†] Quantum Confinement Effect

[‡] Surface Effect

[§] Armchair Edge

^{**} Density functional theory (DFT)



۱. مقدمه

مواد دوبعدی به دلیل خواص منحصر به فرد و پتانسیل کاربردهای متنوع، توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند. با محدودسازی مواد دو بعدی، می‌توان ساختارهای یک‌بعدی مانند نانونوارها و نانولوله‌ها را ایجاد کرد که به دلیل اثرات محدودیت کوانتومی و سطحی، خواص فیزیکی بسیار متفاوتی نسبت به هم‌تایان دوبعدی خود دارند [۱]. به عنوان مثال، گرافن دوبعدی که به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته است یک نیمه‌فلز است، در حالی که نانونوارهای یک‌بعدی گرافن می‌توانند نیمه‌رسانا باشند با شکاف نواری که می‌تواند به عنوان تابعی از عرض نوار و پیکربندی لبه‌ها (دسته مبلی در مقابل زیگزاگ) تنظیم شود [۲]. مطالعات روی نانونوارهای مشابه با ساختار لانه‌زنبوری که از سیلیسین دوبعدی [۳]، نیتريد بور [۴]، و دی‌کالکوژنیدهای فلزات واسطه [۵] به دست آمده‌اند، نیز خواص جالب و وابسته به اندازه و لبه را در این نانوساختارهای یک‌بعدی نشان داده‌اند. برخی از نانوروبان‌های ذکر شده با استفاده از روش‌هایی مانند لیتوگرافی*، سنتز از پایین به بالا†، و باز کردن نانولوله‌ها‡ ساخته شده‌اند [۶، ۷]. اخیراً، دسته دیگری از مواد دوبعدی جدید به نام مکسین به دلیل خواص برجسته‌ای مانند تحمل بالا در برابر آسیب، مقاومت در برابر اکسیداسیون، و رسانایی الکتریکی و حرارتی توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۸] و می‌توانند برای کاربردهای فیزیکی و شیمیایی جدید عملکردی شوند. به طور تجربی، مکسین‌ها از فازهای توده‌ای مکس فازها از طریق لایه‌برداری§ سنتز شده‌اند. مکس فازها خانواده بزرگی از کاربیدها و نیتريد‌های لایه‌ای و شش‌ضلعی با فرمول عمومی $M_{n+1}AX_n$ هستند، که در آن n برابر با ۱ تا ۳، M یک فلز واسطه اولیه، A یک عنصر گروه A (عمدتاً گروه IIIA و IVA)، و X کربن و/یا نیتروژن است [۹]. مکسین‌ها با حذف کردن لایه A مکس فازها با استفاده از روش‌های مختلف بدست می‌آیند و معمولاً سطح آنها بصورت شیمیایی تمایل دارند با گروه‌های عاملی مانند O و F و OH وارد واکنش شوند و یا به عبارتی منتهی (عامل‌دار) شوند. بنابراین فرمول مکسین‌های خالص به صورت $M_{n+1}X_n$ و فرمول مکسین‌های منتهی شده به صورت $M_{n+1}X_nT_2$ است، که در آن T نشان‌دهنده گروه‌های عاملی منتهی شده است. عامل‌دار شدن مکسین‌ها تاثیر بسزایی بر روی خواص آنها بویژه خواص الکترونی آنها می‌گذارد. برای مثال همه‌ی مکسین‌های خالص فلزی هستند؛ اما پس از عامل‌دار شدن، برخی از نازک‌ترین مکسین‌ها مانند Ti_2CO_2 ، Zr_2CO_2 ، Hf_2CO_2 ، Sc_2CO_2 ، Sc_2CF_2 ، و $Sc_2C(OH)_2$ به نیمه‌رسانا تبدیل شده و شکاف نواری آنها در محدوده ۰.۲۴ تا ۱.۸ الکترون‌ولت قرار می‌گیرد [۱۰]. در این مطالعه، در ابتدا به طریقه‌ی ساختن نانونوارها با حاشیه دسته مبلی با اندازه‌های مختلف از مواد دوبعدی انتخاب شده یعنی مکسین‌های منتهی شده Ti_2CO_2 ، Zr_2CO_2 ، Sc_2CF_2 می‌پردازیم و سپس با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی، خواص الکترونی آنها را بررسی می‌کنیم. در این مطالعه خواهیم دید که اثر لبه‌ای نانونوارها تاثیر بسیار مهمی بر روی خواص الکترونی آنها دارد.

۲. روش‌های محاسباتی و مدل‌ها

همه محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی انجام شده است که از طریق بسته‌ی نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو پیاده‌سازی شده است [۱۱-۱۳]. تمامی شبیه‌سازی‌ها در این مطالعه با استفاده از نرم‌افزار XCrySDen انجام شده‌اند [۱۴]. محاسبات از شبه پتانسیل‌های SSSP PBE Precision v1.3.0 که در سایت Materials Cloud موجود است، استفاده

* lithography

† bottom-up synthesis

‡ unzipping nanotubes

§ Exfoliation



می‌کنند [۱۵]. برای محاسبات نانونوارهای مکسین با حاشیه دسته مبلی به ترتیب قطع انرژی جنبشی* ۴۵ ری‌دبرگ برای توابع موج و ۴۵۰ ری‌دبرگ برای چگالی بار[†] به کار می‌رود. انرژی قطع مشخص می‌کند تا چه حد انرژی جنبشی امواج تخت در گسترش توابع موج الکترونی در محاسبات DFT در نظر گرفته شود. همچنین انرژی قطع چگالی پارامتری است که برای گسترش چگالی بار الکترونی استفاده می‌شود. مقادیر انتخاب شده در این مقاله، مقادیر بسیار معقولی هستند و حتی برای دقت بیشتر، مقدار آن‌ها بیشتر از کارهای قبلی انجام شده روی نانونوارها در نظر گرفته شده است. علاوه بر این، اسپین ذرات نیز در این مطالعه در نظر گرفته شده و در محاسبات وارد شده است. برای عامل دار (منتهی کردن) مکسین های دو بعدی انتخاب شده، سه پیکربندی در نظر گرفته شده است. اگر گروه های عاملی اکسیژن و فلئور را T در نظر بگیریم و اتم های Ti و Zr را Sc و M در نظر گرفته و اتم کربن را X در نظر بگیریم، پیکربندی ها بدین گونه است: در پیکربندی اول اتم های T در لایه پایین دقیقا در زیر اتم های M در لایه بالایی قرار دارند و اتم های T در لایه بالایی در بالای اتم های M در لایه پایین در آن پیکربندی قرار دارند. در پیکربندی دوم، اتم های T در لایه بالا (پایین) در بالای اتم های X قرار دارند. با قرار گرفتن اتم های T در لایه پایین در زیر اتم های X و اتم های T در لایه بالا دقیقا در بالای اتم های M در لایه پایین، پیکربندی سوم، پیکربندی های اول و دوم را ترکیب می‌کند [۱۶]. هانگ[‡] و همکاران عامل دار کردن تعدادی از این مکسین ها را با این سه پیکربندی بررسی کرده و پایدارترین پیکربندی که دارای پایین ترین انرژی کل بین بقیه ی پیکربندی ها بود را گزارش دادند. سه مکسین انتخاب شده در این مطالعه، هر سه در پیکربندی اول دارای پایین ترین انرژی و همچنین پایدارترین حالت هستند و از اینرو، در این مقاله، پیکربندی اول برای منتهی کردن مکسین ها در نظر گرفته شده است [۱۶]. همانطور که ذکر شد، با بردن مکسین های دو بعدی در جهت ها و اندازه های مختلف، نانونوارهای آنها تولید می‌شوند. مکسین های انتخاب شده در این مقاله، همگی شبکه ی شش ضلعی[§] دارند و از اینرو، نانونوارها در دو حاشیه ی مشهور دسته مبلی و زیگزاک در اندازه های مختلف خواهند بود. در این مطالعه طریقه ی برش نانونوارها از مواد دوبعدی متناظرشان در شکل ۱ توضیح داده شده است. همان طور که در شکل ۱ نیز نشان داده شده است، نانونوارهای حاصل با لبه های زیگزاک و دسته مبلی به ترتیب با پارامترهای اندازه n_x و n_z مشخص می‌شوند، و در این مطالعه فقط نانونوارهای با حاشیه دسته مبلی بررسی شده و به اختصار به ترتیب به نام های n_x -ANR** شناخته می‌شوند. در مورد ANRS، دو نوع ساختاری متمایز وجود دارد. لبه های ANR ها با پارامتر اندازه فرد متقارن هستند. از سوی دیگر، ANR ها با پارامتر اندازه زوج دارای پیکربندی لبه های نامتقارن هستند. در اینجا منظور از متقارن و یا نامتقارن بودن ساختارها این است که اگر ساختار متقارن را از وسط، بر روی خط میانی، موازی با جهت تناوبی تا کنیم، لبه ها کاملا همدیگر را می پوشانند که این موضوع در مورد ساختار نامتقارن صادق نیست. برای بررسی دقیق ANRS، سایز های ۲ تا ۷ مطابق با شکل ۱ در نظر گرفته شده است که شامل حاشیه های هم متقارن و هم نامتقارن میشود. متقارن یا نامتقارن بودن لبه ها تاثیر شگرفی بر روی خواص الکترونی نانونوارهای دسته مبلی دارد که در بخش نتایج و یافته ها خواهیم دید.

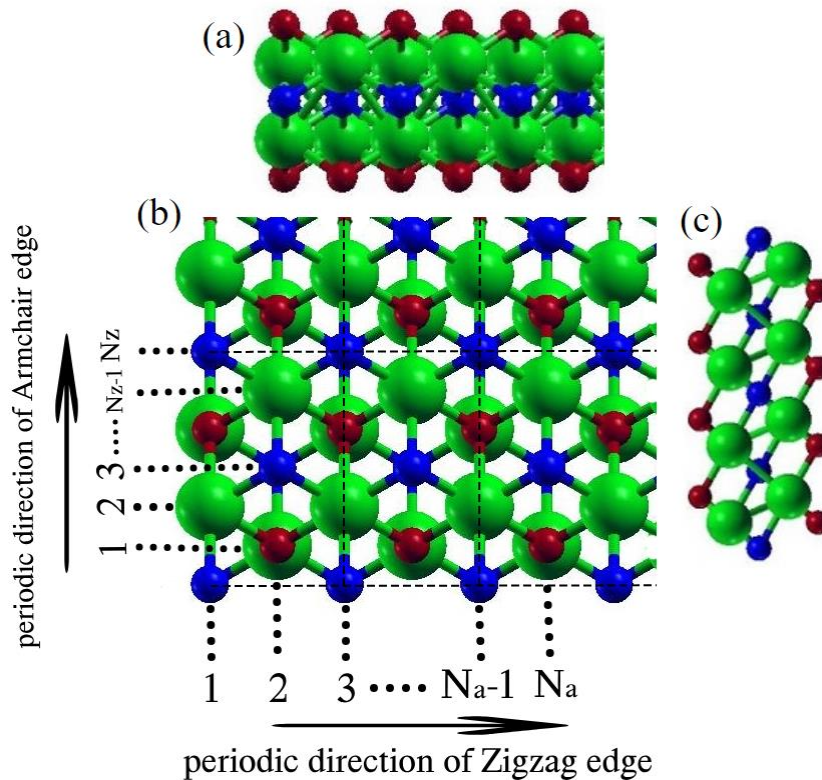
* kinetic energy cutoff (Ry) for wavefunctions

† Kinetic energy cutoff (Ry) for charge density

‡ Hong et al.

§ Hexagonal

** Armchair Nanoribbons



شکل ۱ نمایش یک نانونوار یک‌بعدی که از یک مکسین دوبعدی در پیکربندی اول بریده شده است. (الف) و (ج) نماهای جانبی و (ب) نمای بالایی نانونوار را نشان می‌دهند. در (ب)، جهت تناوبی نانونوارهای دسته مبلی و زیگزاگ به ترتیب در جهت‌های عمودی و افقی است که با پیکان نمایش داده شده است. پارامتر اندازه‌های n_a و n_z به ترتیب برای دسته مبلی و زیگزاگ بر اساس تعداد خطوط اتمی به ترتیب در جهت‌های افقی و عمودی تعریف می‌شود. عناصر M ، X و T به ترتیب با توپ‌های سبز، آبی و قرمز نشان داده شده‌اند.

در این مطالعه، جهت تناوب همه ی نانونوارها جهت Z در سیستم کارترین برای شبیه‌سازی اعمال شده است. برای جلوگیری از برهم‌کنش‌های ناشی از تصاویر تناوبی (از آنجا که در برنامه ی کوانتوم اسپرسو همه‌ی ساختارهای شبیه سازی شده باید تناوبی باشند)، نانوریبون‌ها در جهت‌های غیر تناوبی (Y و X) با فاصله ۲۰ آنگستروم از هم جدا شده‌اند و یک فضای خلاء بزرگ ایجاد شده است. روش Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) برای بهینه‌سازی نانوریبون‌ها در جهت Z (جهت تناوبی) استفاده شده است. محاسبات با معیار همگرایی انرژی 10^{-7} ریدبرگ بین دو مرحله پیاپی خودسازگار برای نانوریبون‌ها انجام می‌شود. منطقه بریلوین با استفاده از شبکه Monkhorst–Pack با مقیاس $1 \times 1 \times 18$ برای نانوریبون‌ها در بهینه سازی* ساختار و محاسبات خودسازگار† نمونه‌برداری می‌شود. به جهت دقت بیشتر در محاسبات، پس از بهینه‌سازی ساختاری در نانونوارها و محاسبات خودسازگار، چگالی حالات و سایر خواص الکترونیکی با استفاده از محاسبات خودسازگار‡ در ادامه‌ی محاسبات خودسازگار، از طریق شبکه‌ای مترکم‌تر با مقیاس $1 \times 1 \times 36$ برای نانونوارها تعیین شده است.

* Relaxation

† Scf calculation

‡ Nscf calculation

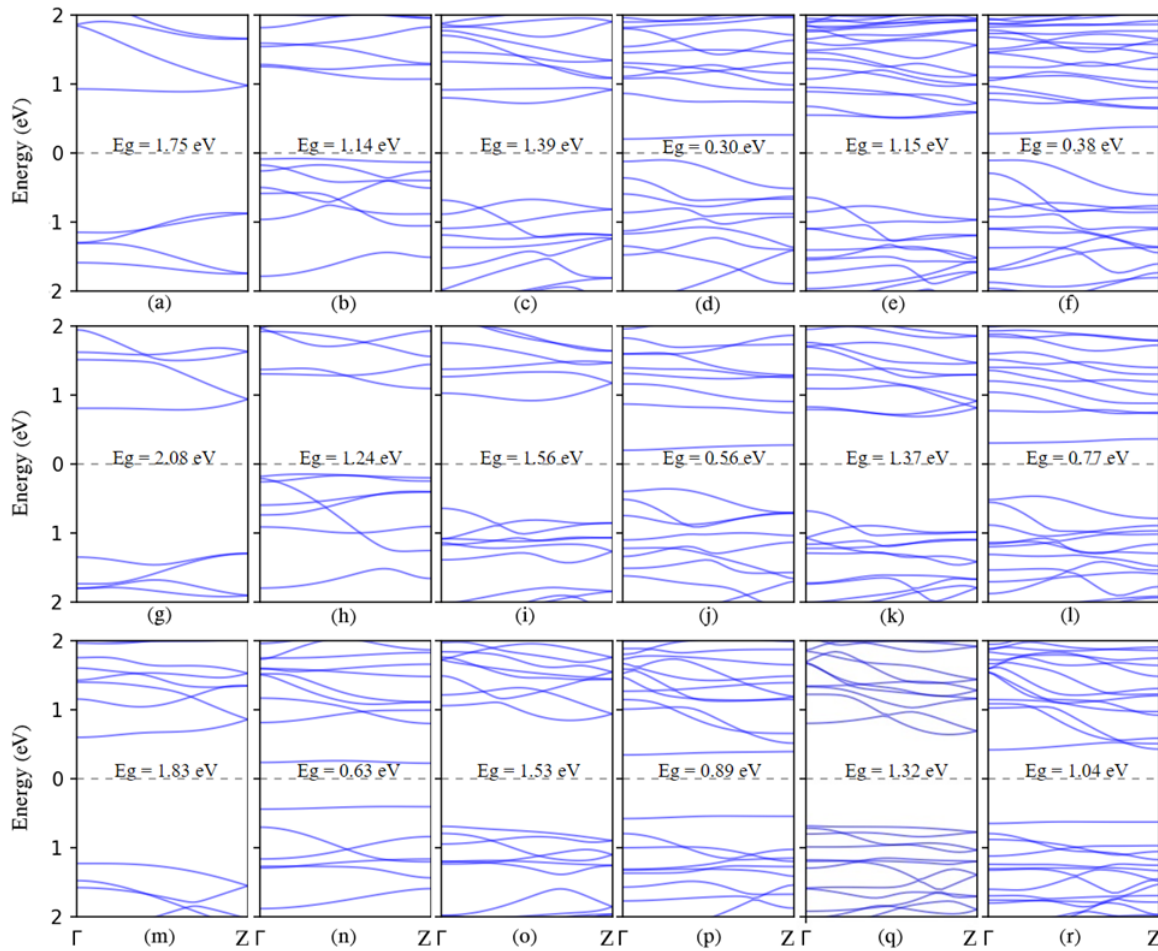


۳. نتایج و یافته‌ها

همانطور که ذکر شد، در این مطالعه ما سه نوع مختلف از مکسین‌های منتهی شده ۲ بعدی (Zr_2CO_2 , Ti_2CO_2) و Sc_2CF_2 را در نظر می‌گیریم و هدفمان ایجاد نانونوارهای ۱ بعدی با حاشیه‌ی دسته مبللی مرتبط با آن‌ها است. به عنوان گام اولیه، پارامترهای شبکه‌ای این ساختارهای ۲ بعدی را محاسبه می‌کنیم. پارامترهای شبکه‌ای بهینه شده برای Ti_2CO_2 ، Zr_2CO_2 و Sc_2CF_2 به ترتیب ۳.۰۴ آنگستروم، ۳.۳۱ آنگستروم، و ۳.۲۹ آنگستروم یافت شده‌اند. این مقادیر به خوبی با یافته‌های نظری قبلی تطابق دارند [۱۶]. همانطور که در قسمت قبل اشاره شد، با استفاده از ورق دوبعدی مکسین‌ها، نانونوارهای دسته مبللی ($MANR^*$) از مکسین‌ها با عرض‌های مختلف ساخته شده است. بازه پارامتر عرض، a ، مطابق با شکل ۱ از ۲ تا ۷ است. نتایج ما نشان می‌دهد که ویژگی نیمه‌رسانایی در همه $MANR$ ها وجود دارد. ویژگی نیمه‌رسانایی نانونوارهای دسته مبللی در ورق‌های دوبعدی دیگر نیز مشاهده شده است [۱۷، ۱۸]. ساختار باند و گاف‌های نواری غیرمستقیم از نانونوارهای مکسین با حاشیه‌ی دسته مبللی انتخاب شده، در محدوده انرژی در شکل ۲ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، هر نانونواری که لبه‌های نامتقارن (زوج) دارد، گاف نواری بزرگ‌تری نسبت به نانو نوارهایی با لبه‌های متقارن (فرد) دارد. در همه نمونه‌های با عرض ۵ و ۷ نانونوارهای مکسین دسته مبللی، حداقل باند رسانش یا CBM در نقطه Γ قرار دارد و حداکثر باند ظرفیت یا VBM بین نقاط Z و Γ واقع شده است. در هر نمونه از نانونوارهای مکسین با عرض ۶ دسته مبللی، CBM و VBM به ترتیب بین نقاط Z و Γ ، و در نقطه Γ قرار دارند. در موارد دیگر، CBM و VBM در نقاط مختلفی از منطقه بریلوئن قرار دارند. گاف‌های نواری لبه‌های نامتقارن با افزایش عدد عرض آنها کاهش می‌یابد، که این نتیجه به اثر محدودیت کوانتومی نسبت داده می‌شود. به‌طور قابل توجهی، در این مطالعه، گاف‌های نواری $MANR$ های متقارن با افزایش عرض کاهش نمی‌یابد. به عنوان مثال، گاف‌های نواری ANR های متقارن Sc_2CF_2 با افزایش عرض افزایش می‌یابد.

بررسی نانو نوارهای Ti_2CO_2 با حاشیه‌ی دسته مبللی در شکل‌ها نشان می‌دهد که باندهای لبه‌ای (اولین باند بالای انرژی فرمی) بین باندهای ظرفیت و رسانش قرار دارند. این نشان می‌دهد که حضور حالت‌های الکترونیکی در لبه نانو نوارهای دسته مبللی متقارن Ti_2CO_2 باعث کاهش انرژی CBM می‌شود، که این امر گاف نواری آشکار برای نانو نوارهای نازک‌تر را کاهش می‌دهد. اگر باندهای لبه‌ای را نادیده بگیریم، گاف‌های باندهای ظرفیت و رسانش با افزایش عدد عرض نانونوارها کاهش می‌یابد، که طبق معمول این نیز به اثر محدودیت کوانتومی نسبت داده می‌شود [۱۹]. بنابراین، اثر لبه‌ای $MANR$ ها به عنوان یک عامل حیاتی در تأثیرگذاری بر خواص الکترونیکی آنها ظاهر می‌شود.

* Mxene Armchair Nanoribbons

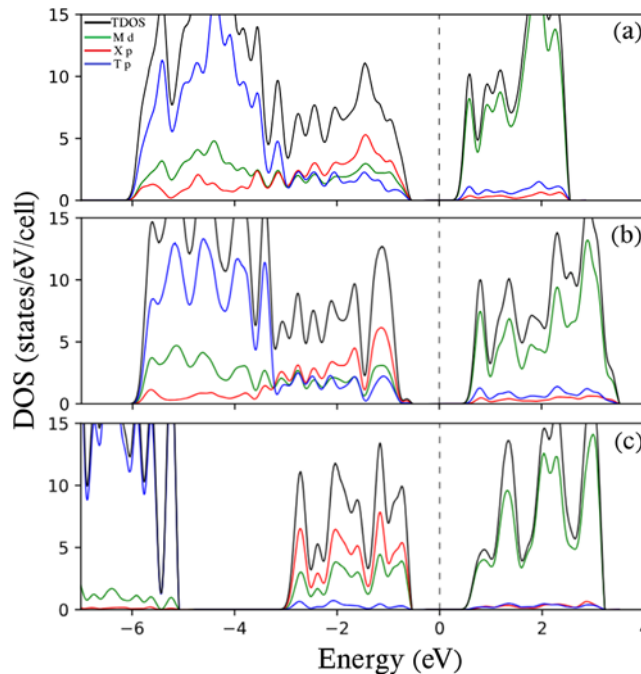


شکل ۲ ساختارهای نواری همه MANRهای انتخاب شده (a)-(f): نانو نوارهای Ti_2CO_2 با حاشیه‌ی دسته‌ی مبلی؛ (g)-(l) نانو نوارهای Zr_2CO_2 با حاشیه‌ی دسته‌ی مبلی؛ (m)-(r) نانو نوارهای Sc_2CF_2 با حاشیه‌ی دسته‌ی مبلی. انرژی فرمی به صفر تنظیم شده است و گاف‌های نواری با مقادیرشان نوشته شده‌اند.

این پدیده در نمودارهای چگالی حالات (DOS) و چگالی حالات تفکیک شده (PDOS) نشان داده شده در شکل ۳ نیز مشهود است. در هر دو نمونه متقارن و نامتقارن، باند رسانش عمدتاً به حالت‌های اوربیتال d عناصر Ti، Zr، و Sc نسبت داده می‌شود، در حالی که حالت‌های ظرفیت در محدوده -۷ تا ۰ الکترون‌ولت می‌توانند به دو زیر باند تقسیم شوند. برای نانو نوارهای دسته‌ی مبلی نیمه‌رساناهای Ti_2CO_2 و Zr_2CO_2 ، زیر باند اول، در محدوده تقریبی -۳ تا ۰ الکترون‌ولت، تقریباً به‌طور مساوی از حالت‌های اوربیتال d عناصر Ti و Zr، اوربیتال‌های p کربن و p اکسیژن (با سهم بیشتر از اوربیتال‌های p کربن) تشکیل شده است. زیر باند دوم، بین حدود -۶ تا -۳ الکترون‌ولت، عمدتاً توسط اوربیتال‌های p اکسیژن و با مقداری سهم از حالت‌های اوربیتال d عناصر Ti و Zr به دلیل هیبریداسیون* قوی بین آنها (با سهم بیشتر از اوربیتال‌های p اکسیژن) اشغال شده است. در نانو نوارهای دسته‌ی مبلی نیمه‌رسانای Sc_2CF_2 ، این زیر باندها به‌طور واضحی جدا هستند. زیر باندهای اول و دوم توسط یک شکاف کوچک (حدود ۲ الکترون‌ولت) از هم جدا می‌شوند. زیر باند اول، بین حدود -۳ تا ۰ الکترون‌ولت، تقریباً به‌طور مساوی از حالت‌های اوربیتال d عنصر Sc و اوربیتال‌های p کربن (با سهم بیشتر از اوربیتال‌های p کربن)

* Hybridisation

تشکیل شده است، در حالی که زیر باند دوم، در محدوده تقریبی -7 تا -5 الکترون‌ولت، عمدتاً توسط اوربیتال‌های p فلئور غالب است.



شکل ۳ چگالی کل حالات (TDOS) و چگالی حالات تفکیک‌شده (PDOS) روی اوربیتال‌های اتمی انتخاب‌شده از (a) نانو $6\text{-Ti}_2\text{CO}_2$ با حاشیه‌ی دسته‌مبلی، (b) نانونوار $6\text{-Zr}_2\text{CO}_2$ با حاشیه‌ی دسته‌مبلی، و (c) نانونوار $6\text{-Sc}_2\text{CF}_2$ با حاشیه‌ی دسته‌مبلی. انرژی فرمی به صفر تنظیم شده است.

۴. نتیجه‌گیری

در این مطالعه، خواص الکترونی نانونوارهای مکسین با حاشیه دسته‌مبلی شامل Ti_2CO_2 ، Zr_2CO_2 و Sc_2CF_2 با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شد. نتایج نشان داد که تمام نانونوارهای بررسی شده دارای ویژگی‌های نیمه‌رسانایی بوده و اثر لبه‌ای به عنوان یک عامل حیاتی بر خواص الکترونی آن‌ها تأثیرگذار است. به طور کلی، نانونوارهایی با لبه‌های نامتقارن (عرض‌های زوج) دارای گاف نواری بزرگ‌تری نسبت به نمونه‌های متقارن (عرض‌های فرد) بودند.

همچنین، نتایج نشان داد که گاف‌های نواری با افزایش عرض نانونوارها کاهش می‌یابد که به محدودیت کوانتومی نسبت داده می‌شود. از سوی دیگر، حضور حالت‌های الکترونیکی در لبه نانونوارهای دسته‌مبلی متقارن، به‌ویژه برای Ti_2CO_2 ، باعث کاهش انرژی باند رسانش شده و این امر منجر به کاهش گاف نواری در نانونوارهای نازک‌تر می‌شود. چگالی حالات کل و تفکیک‌شده نشان داد که باندهای رسانش عمدتاً از اوربیتال‌های d عناصر فلزی و باندهای ظرفیت از ترکیب اوربیتال‌های p کربن، اکسیژن و فلئور تشکیل شده‌اند.



به طور کلی، نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که تنظیم ساختار لبه و عرض نانونوارهای مکسین می‌تواند روشی مؤثر برای کنترل خواص الکترونی و کاربردهای آتی در نانوالکترونیک و نانواسپینترونیک باشد.

۵. مراجع

1. Xia, Y., et al., *One-dimensional nanostructures: synthesis, characterization, and applications*. 2003. **15**(5): p. 353-389.
2. Son, Y.-W., M.L. Cohen, and S.G.J.N. Louie, *Half-metallic graphene nanoribbons*. 2006. **444**(7117): p. 347-349.
3. Song, Y.-L., et al., *Effects of the edge shape and the width on the structural and electronic properties of silicene nanoribbons*. 2010. **256**(21): p. 6313-6317.
4. Lopez-Bezanilla, A., et al., *Boron nitride nanoribbons become metallic*. 2011. **11**(8): p. 3267-3273.
5. Kou, L., et al., *Tuning magnetism and electronic phase transitions by strain and electric field in zigzag MoS₂ nanoribbons*. 2012. **3**(20): p. 2934-2941.
6. Jiao, L., et al., *Narrow graphene nanoribbons from carbon nanotubes*. 2009. **458**(7240): p. 877-880.
7. Tapasztó, L., et al., *Tailoring the atomic structure of graphene nanoribbons by scanning tunnelling microscope lithography*. 2008. **3**(7): p. 397-401.
8. Wang, X., Y.J.J.o.M.S. Zhou, and Technology, *Layered machinable and electrically conductive Ti₂AlC and Ti₃AlC₂ ceramics: a review*. 2010. **26**(5): p. 385-416.
9. Eklund, P., et al., *The Mn⁺ 1AX_n phases: Materials science and thin-film processing*. 2010. **518**(8): p. 1851-1878.
10. Khazaei, M., et al., *OH terminated two-dimensional transition metal carbides and nitrides (MXenes) as ultralow work function materials*. 2013. **23**: p. 2185-2192.
11. Giannozzi, P., et al., *QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*. 2009. **21**(39): p. 395502.
12. Giannozzi, P., et al., *Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO*. 2017. **29**(46): p. 465901.
13. Giannozzi, P., et al., *Quantum ESPRESSO toward the exascale*. 2020. **152**(15).
14. Kokalj, A.J.C.M.S., *Computer graphics and graphical user interfaces as tools in simulations of matter at the atomic scale*. 2003. **28**(2): p. 155-168.
15. Prandini, G., et al., *Precision and efficiency in solid-state pseudopotential calculations*. 2018. **4**(1): p. 72.
16. Hong, L., R.F. Klie, and S.J.P.R.B. Ögüt, *First-principles study of size- and edge-dependent properties of MXene nanoribbons*. 2016. **93**(11): p. 115412.
17. Reyes-Retana, J., G.G. Naumis, and F.J.T.J.o.P.C.C. Cervantes-Sodi, *Centered honeycomb NiSe₂ nanoribbons: Structure and electronic properties*. 2014. **118**(6): p. 3295-3304.
18. Li, Y., et al., *MoS₂ nanoribbons: high stability and unusual electronic and magnetic properties*. 2008. **130**(49): p. 16739-16744.
19. Zhou, Y., et al., *Electronic and transport properties of Ti₂CO₂ MXene nanoribbons*. 2016. **120**(30): p. 17143-17152.