

# طراحی و مدل سازی اتمی سوئیچ الکترومکانیکی لغزشی چندحالته مبتنی بر نانو نوار گرافینی آلفا دولایه

سمیه فتوحی<sup>۱\*</sup>

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۳۹۹/۰۳/۲۷	<p>در این پژوهش، طراحی و مدل سازی اتمی سوئیچ الکترومکانیکی لغزشی چندحالته مبتنی بر نانو نوار گرافینی آلفا دولایه با بهره گیری از نظریه تابعی چگالی و ترکیب آن با تابع گرین غیرتعدالی ارائه می شود. ساختار سوئیچ پیشنهادی به صورتی است که لایه گرافین زیرین ثابت و لایه بالایی آن متحرک است. چینش های متمایز از طریق حرکت لایه بالایی نسبت به لایه پایینی در راستای محور افقی و با فواصل جابه جایی <math>1.36 \text{ \AA}</math>، <math>2.61 \text{ \AA}</math>، <math>3.97 \text{ \AA}</math>، <math>8.41 \text{ \AA}</math> و <math>9.44 \text{ \AA}</math> ایجاد می شود و این حالت های قرارگیری به ترتیب <math>Aa</math>، <math>AB</math>، <math>AB2</math>، <math>Aa2</math> و <math>AA</math> نام گذاری شده اند. چینش های مذکور باعث می شود مقدار جریان سوئیچ پیشنهادی در هر حالت به طور چشمگیر تغییر کند. برای بررسی دقیق تر جریان سوئیچ پیشنهادی در ولتاژهای بایاس معین، طیف انتقال، ساختار نوار انرژی، طیف انرژی مولکولی، هامیلتونین خودسازگار تصویر شده مولکولی و مسیرهای انتقال محلی محاسبه می شود. نتایج مدل سازی نشان می دهد که مقدار ضریب سوئیچینگ جریانی افزاره پیشنهادی بسته به نوع چینش اتمی دولایه از حالتی به حالت دیگر به طور قابل توجهی تغییر می کند. بیشترین ضریب سوئیچینگ افزاره پیشنهادی به میزان ۳۴، در ولتاژ بایاس <math>0.6 \text{ V}</math> و بین دو حالت <math>Aa2</math> و <math>AA</math> حاصل می شود. براساس نتایج به دست آمده با جابه جایی کنترل شده دو لایه گرافینی نسبت به یکدیگر می توان سوئیچ لغزشی چندحالته کاربردی در حوزه نانوالکترومکانیک ارائه داد. در کنار رفتار مناسب سوئیچینگ، نتایج استخراج شده در سه حالت <math>AA</math>، <math>Aa2</math> و <math>AB</math>، مقاومت دیفرانسیلی منفی را نمایان می کند که قابلیت استفاده از سوئیچ پیشنهادی را در ادوات کوانتومی تونلی نیز میسر می کند. بیشترین مقدار مقاومت منفی مشاهده شده در حالت <math>AB2</math> می باشد که به اندازه <math>K\Omega</math> است.</p>
پذیرش مقاله: ۱۳۹۹/۰۶/۱۰	
واژگان کلیدی: مدل سازی اتمی، سوئیچ الکترومکانیکی، نانو نوار گرافینی آلفا، نظریه تابعی چگالی، تابع گرین غیرتعدالی، ترابرد الکترونی.	

## ۱- مقدمه

در طول سه دهه گذشته، برخی آلوتروپ های کربن مانند فولرن، نانو لوله های کربنی و گرافن با موفقیت سنتز شده اند که در میان آن ها گرافن محور اصلی تحقیقات در حوزه مواد کربنی است [۱-۳]. گرافن ورقه ای دوبعدی از اتم های کربن در یک پیکربندی شش ضلعی لانه زنبوری است. اتم های

کربن در گرافن با هیبریداسیون  $sp^2$  به هم متصل شده اند، به طوری که سه پیوند قوی کووالانسی ( $\sigma$ ) را در صفحه تشکیل می دهند. همچنین اتم های کربن دارای یک اوربیتال عمود بر صفحه هستند که تشکیل پیوندهای  $\pi$  خارج از صفحه را می دهند و این پیوندها می توانند برهم کنش بین لایه های مختلف را در گرافن چند لایه

\* پست الکترونیک نویسنده مسئول: s.fotoohi@iiu.ac.ir  
۱. گروه برق، واحد اسلامشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، اسلامشهر، ایران

چشمگیری تغییر می کند. بعد از جابه جایی لایه بالایی به روی لایه پایینی به میزان  $1/5^{a_0}$ ، پروفایل نوسانی جریان همان روند قبلی را تکرار می کند.

طبق مراجع ۸ و ۹ حالت های خاموش و روشن در افزاره های گرافنی دولایه با حساسیت بالا نسبت به موقعیت لایه ها ایجاد می شود و از این قابلیت در طراحی سوئیچ الکترومکانیکی مبتنی بر گرافن استفاده می گردد.

پس از کشف گرافن، جهت گیری تحقیقاتی قابل توجهی برای کشف آلوتروپ های جدید دوبعدی کربن، به ویژه گرافین ۱ و گرافدین ۲ ایجاد شد [۱۴-۱۶]، به طوری که اخیراً لی و همکاران در آزمایشگاه یولیپانگ، سنتز موفقیت آمیز فیلم های بزرگ گرافدین را به روی سطح مسی توسط واکنش اتصال مقطعی با هگزاتینیل بنزن گزارش داده اند [۱۶].

مشابه گرافن، گرافین نیز ورقه ای به ضخامت یک اتم کربن است، اما پیوند بین اتم های کربن آن از نوع  $sp$  و  $sp^2$  است. بنابراین برخلاف گرافن که فقط یک ساختار اتمی دارد، ساختارهای متعددی از گرافین با شکل های هندسی متنوع به وجود می آید. چهار نوع مختلف گرافین شامل  $\alpha$  (آلفا)،  $\beta$  (بتا)،  $\gamma$  (گاما) و  $12-6-6$  ارائه شده اند که درصد های متفاوتی از پیوند استیلن به ترتیب  $100$ ،  $66/67$ ،  $33/33$  و  $41/67$  درصد در ساختار آن ها وجود دارد [۱۷]. روش های مختلفی برای مهندسی شکاف انرژی انواع گرافین و تنظیم مشخصات الکترونیکی آن ها ارائه شده است [۱۸-۲۱]، یکی از این روش ها استفاده از انباشت لایه های گرافینی است. خواص الکترونیکی گرافین چندلایه، به فاصله بین لایه ها و مرتبه انباشت لایه ها بستگی دارد [۲۰-۲۱].

مزیت مهم گرافین دو لایه در مقایسه با گرافن دولایه این است که تعداد حالت های انباشت بیشتری برای قرارگیری لایه ها به روی یکدیگر امکان پذیر است. جالب توجه است که تعداد این حالات انباشت برای گرافن دولایه فقط دو حالت است [۸]. در مرجع ۲۱، لئونرتس و همکارانش شش چیدمان متمایز AA، AB، Aa، Ab، ab، و aa را برای گرافین آلفا دولایه گزارش داده اند. طبق نتایج به دست آمده، ساختار نوار انرژی گرافین آلفا دولایه تحت تأثیر نحوه قرارگیری لایه ها به روی یکدیگر است. این تنوع حالت های انباشت صفحات به روی یکدیگر، طیف گسترده ای از

کنترل کنند [۱]. گرافن دارای ویژگی های الکترونیکی و انتقالی منحصر به فردی مانند قابلیت تحرک حامل  $2 \times 10^8 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ ، طول پیمایش آزاد حامل در محدوده میکرومتر و مقدار هدایت نزدیک به بالستیک از مرتبه  $\frac{e^2}{h}$  است. به دلیل این خواص ویژه، کاربرد این ماده در ادوات نانوالکترونیک، از اهمیت ویژه ای برخوردار است [۴-۷]. برای نمونه در مرجع ۷ ساخت سوئیچ نانوالکترومکانیکی سه ترمیناله مبتنی بر مواد نامتجانس دوبعدی ارائه شده است که در سنسورها و ادوات منطقی ولتاژ پایین و توان پایین کاربرد دارد. این افزاره از مواد دوبعدی گرافن و نیتريد بور تشکیل شده که حالت های خاموش و روشن سوئیچ الکترومکانیکی به واسطه پتانسیل الکتروود گیت کنترل می شود. عملکرد آن بر این اساس است که با انحراف مکانیکی درین و اتصال به الکتروود سورس زیرین، کانال هدایت شکل می گیرد.

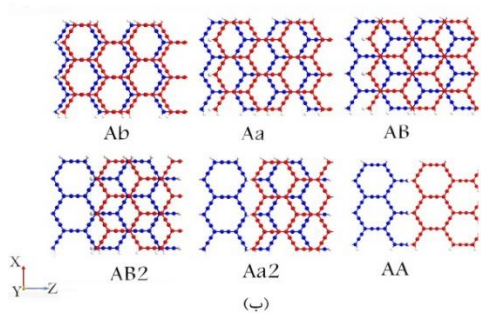
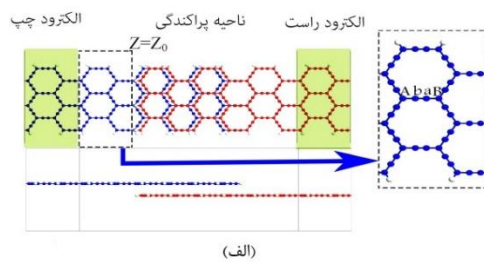
خواص الکترونیکی گرافن دولایه، موضوع بسیاری از مطالعات نظری و تجربی اخیر است و بسیاری از افزاره های نانومکانیکی و نانوالکترونیکی، مانند سوئیچ ها [۷-۹]، سنسورها [۱۰]، ترانزیستورهای اثر میدانی [۱۱-۱۲] و غیره با استفاده از گرافن دولایه [۱۳] ارائه شده اند. در مرجع ۸ تأثیر عدم تطابق موقعیت مکانی لایه بالایی و لایه پایینی بر شکاف انرژی گرافن دولایه مورد مطالعه قرار گرفته است و نتایج نشان می دهد که جابه جایی طولی کمتر از  $0.1 \text{ nm}$  لایه ها، باعث تغییر شکاف انرژی در حدود  $0.5 \text{ eV}$  شده، هدایت الکتریکی این ماده تغییر می کند.

در مرجع ۹ با محاسبات ابتدا به ساکن، جریان افزاره مبتنی بر نانو نوار گرافنی آرمچیر دولایه به عنوان تابعی از طول های هم پوشانی مختلف بین لایه بالایی و پایینی، در ولتاژ بیاس معین محاسبه شد. در این مقاله، لایه پایینی ثابت در نظر گرفته شد و در هر بار جابه جایی، لایه بالایی به اندازه  $a_0$  جابه جا گردید ( $a_0$  طول پیوند بین دو اتم کربن مجاور است). شایان ذکر است طول منطقه پراکندگی این افزاره به گونه ای فرض شد که با جابه جایی لایه بالایی به روی لایه پایینی، حالت های مشابهی از قرارگیری دو لایه برای این ساختار پدید می آید. نتایج نشان می دهد که جریان به لغزش لایه ها به روی یکدیگر حساس است و به مقدار

<sup>2</sup>.Graphdiyne

<sup>1</sup>.Graphyne

شکل (۱-الف) نمای بالا و جانبی مدل اتمی ساختار سوئیچ الکترومکانیکی پیشنهادی مبتنی بر نانو نوار گرافینی آلفا دولایه را بعد از فرایند کامل واهلش نشان می‌دهد. ساختار سوئیچ از یک ناحیه پراکندگی مرکزی و دو الکتروود در سمت چپ و راست تشکیل می‌شود. ناحیه پراکندگی مرکزی از نانو نوار گرافین آلفا دولایه با لبه‌های آرمچیر تشکیل شده و الکتروودهای چپ و راست شامل نانو نوارهای گرافین آلفا تک‌لایه است. اتم‌ها در لایه پایینی و بالایی به ترتیب با رنگ قرمز و آبی نمایش داده شده‌اند. تعداد دیمبرهای کربنی در راستای پهنای نانو نوار ناحیه پراکندگی مرکزی و الکتروودهای چپ و راست شش عدد است. همچنین در شکل (۱-الف) کادر خط‌چین سلول واحد نانو نوار گرافینی آلفا را با شش دیمبر کربنی نشان می‌دهد و موقعیت‌های مکانی مختلف اتم‌ها در این سلول با حروف A, a, B و b مشخص شده‌اند.



شکل ۱- (الف) نمای بالا و جانبی مدل اتمی ساختار سوئیچ مبتنی بر نانو نوار گرافینی آلفا دولایه بعد از فرایند کامل واهلش (ناحیه پراکندگی مرکزی از نانو نوار گرافین آلفا دولایه با لبه‌های آرمچیر و الکتروودهای چپ و راست از نانو نوارهای گرافین آلفا تک‌لایه تشکیل می‌شود. اتم‌ها در لایه پایینی و بالایی به ترتیب با رنگ قرمز و آبی نمایش داده شده‌اند. در شکل (الف) کادر خط‌چین سلول واحد نانو نوار گرافینی آلفا با شش دیمبر کربنی در راستای پهنای نانو نوار را نشان می‌دهد و موقعیت‌های مختلف اتم‌ها در این سلول با حروف A, a, B و b مشخص شده است)، (ب) منطقه هم‌پوشانی بین دو لایه بالایی و پایینی سوئیچ با چینش‌های Ab, Aa, AB, AB2, Aa2 و AA

ساختارهای نوارهای انرژی را برای این ماده فراهم می‌کند و درجه آزادی بیشتری برای مهندسی ساختار نوارهای انرژی ارائه می‌دهد. مشابه نانو نوارهای گرافینی [۲۲]، نانو نوارهای گرافین دارای دو ساختار لبه، یعنی آرمچیر و زیگزاگ هستند و شکاف انرژی نانو نوارهای گرافینی از نوع نیمه‌هادی به عرض نوار بستگی دارد [۱۷ و ۲۳].

همان گونه که در مراجع فوق ذکر شد، در سال‌های اخیر ویژگی‌های الکترونیکی صفحات دوبعدی گرافین آلفا دولایه مورد مطالعه قرار گرفته، اما تاکنون هیچ گزارشی در خصوص ویژگی‌های انتقالی نانو نوارهای گرافین آلفا دو یا چندلایه ارائه نشده است.

در این پژوهش، به مدل‌سازی اتمی سوئیچ الکترومکانیکی لغزشی چندحالتی مبتنی بر نانو نوار گرافین آلفا دولایه پرداخته، تغییرات جریان سوئیچ پیشنهادی نسبت به تغییرات ولتاژ را با تحلیل انواع نمودارهای ترابرد الکترونی مورد بررسی قرار می‌دهیم. ساختار سوئیچ از یک ناحیه پراکندگی مرکزی و دو الکتروود در سمت چپ و راست آن تشکیل شده است. ناحیه پراکندگی مرکزی که همان کانال انتقال حامل‌هاست، از نانو نوار گرافین آلفا دولایه با لبه‌های آرمچیر تشکیل شده است. برای الکتروودهای چپ و راست از نانو نوارهای گرافین آلفا تک‌لایه استفاده می‌کنیم. با ثابت در نظر گرفتن موقعیت اتم‌ها در لایه گرافین پایینی، لایه بالایی را در جهت محور افق و با فواصل مختلف حرکت می‌دهیم تا چینش‌های لایه‌ای مختلف در ساختار سوئیچ ایجاد شود. بیشترین طول حرکت اتم‌ها در لایه بالایی در جهت محور افق، به اندازه طول یک سلول واحد نانو نوار گرافین آلفا در نظر گرفته شده است. در ادامه، به بررسی ویژگی‌های انتقالی سوئیچ پیشنهادی در حالت‌های مختلف، با بهره‌گیری از روش نظریه تابعی چگالی [۲۴]، در ترکیب با تابع گرین غیرتعدادی [۲۵-۲۶] می‌پردازیم. نتایج مدل‌سازی نشان می‌دهد با جابه‌جایی لایه گرافین بالایی، تغییرات چشمگیر و متنوعی در جریان عبوری از سوئیچ پیشنهادی به وجود می‌آید که می‌تواند سرآغاز استفاده از این نوع سوئیچ در سیستم‌های نانو الکترومکانیکی (نمز) باشد.

## ۲- مدل‌سازی سوئیچ پیشنهادی و روش انجام

### محاسبات

#### ۱-۲- مدل‌سازی سوئیچ پیشنهادی

شکل (۱-الف) مدل اتمی سوئیچ نانو نوار گرافینی آلفا دولایه را نشان می‌دهد که لایه بالایی به میزان  $1/36 \text{ \AA}$  (از نقطه شروع حرکت  $Z=Z_0$ ) در جهت محور افق نسبت به لایه پایینی جابه‌جا شده است. در این ساختار اتم A در این پژوهش، ساختار اولیه پیشنهادی به گونه‌ای است که ابتدا لایه بالایی به اندازه طول یک سلول واحد در جهت محور افقی با لایه پایینی اختلاف موقعیت دارد. با ثابت فرض کردن موقعیت مکانی لایه پایینی، لایه بالایی را در جهت محور افقی در فواصل مختلف  $1/36 \text{ \AA}$ ،  $2/61 \text{ \AA}$ ،  $3/97 \text{ \AA}$ ،  $8/41 \text{ \AA}$ ،  $9/44 \text{ \AA}$  و  $12/06 \text{ \AA}$  حرکت می‌دهیم تا جایی که در نهایت لایه بالایی به اندازه طول یک سلول واحد به جلو و بر روی لایه پایینی حرکت داده شود (فواصل مذکور نسبت به نقطه شروع حرکت  $Z=Z_0$  می‌باشند که در شکل (۱-الف) نشان داده شده است).

لایه بالایی بر روی اتم b لایه پایینی قرار می‌گیرد و با توجه به چینش لایه‌ها، سوئیچ در حالت Ab است. با حرکت و لغزش لایه بالایی به روی لایه پایینی در فواصل جابه‌جایی مختلف، برای سوئیچ حالت‌های متنوع دیگری ایجاد می‌شود. اگر لایه بالایی را به روی لایه پایینی به اندازه  $2/61 \text{ \AA}$  و  $3/97 \text{ \AA}$  به جلو حرکت دهیم، سوئیچ به ترتیب در حالت های Aa و AB قرار می‌گیرد. با حرکت لایه بالایی به روی لایه پایینی به اندازه  $8/41 \text{ \AA}$ ،  $9/44 \text{ \AA}$ ، سوئیچ مجدداً در حالت‌های AB و Aa قرار می‌گیرد. این حالت‌های جدید ایجاد شده را به ترتیب AB2 و Aa2 می‌نامیم. تفاوت این دو حالت جدید ایجاد شده با حالت‌های AB و Aa در آن است که طول منطقه هم‌پوشانی بین لایه بالایی و پایینی سوئیچ کمتر است. در نهایت با حرکت لایه بالایی به اندازه  $12/06 \text{ \AA}$  (طول یک سلول واحد)، اتم‌های منطقه هم‌پوشانی در لایه بالایی و پایینی کاملاً بر هم مطابقت دارند و سوئیچ در حالت AA قرار می‌گیرد. در این حالت، طول منطقه هم‌پوشانی بین لایه‌های سوئیچ کمتر از حالت‌های دیگر آن است. منطقه هم‌پوشانی بین دو لایه بالایی و پایینی سوئیچ در حالت‌های Aa، Ab، AB، AB2، Aa2 و AA در شکل (۱-ب) دیده می‌شود.

نکته جالب توجه اینکه، بعد از انجام فرایند واهلش فاصله بین دو صفحه در حالت‌های مختلف متفاوت است. فاصله عمودی بین دو صفحه در حالت‌های Aa، Ab، AB، AB2

## ۲-۲- روش انجام محاسبات

مدل سازی سوئیچ پیشنهادی با کمک نظریه تابعی چگالی و نرم‌افزار محاسباتی سیاست<sup>۱</sup> انجام شده است. روش تقریب شیب تعمیم یافته<sup>۲</sup> (GGA) با شیوه پردو-بورگ-ارنرزهوف<sup>۳</sup> (PBE) [۲۷] برای محاسبه انرژی تبادل-همبستگی استفاده شده است. الکترون‌های ظرفیت با کمک پایه‌های محاسباتی DZP توصیف شده‌اند. انرژی قطع نیز برابر با  $200 \text{ Ry}$  قرار داده شده و تقسیم‌بندی ناحیه اول بریلوئن با توزیع  $1 \times 1 \times 50$  به روش مونخورست-پک صورت گرفته است. محاسبات خودسازگار با تعیین میزان همگرایی  $10^{-6} \text{ eV}$  برای انرژی کل انجام شده است. قبل از محاسبه ویژگی‌های انتقالی الکترونیکی، فرایند کامل واهلش برای سوئیچ با چینش‌های مختلف لایه‌ها انجام شده تا حداکثر نیروی وارد بر هر اتم به  $10^{-2} \frac{\text{eV}}{\text{Å}}$  برسد. محاسبات انتقال کوانتومی با به‌کارگیری تابع گرین غیر تعادلی در ترکیب با نظریه تابعی چگالی انجام گردیده است. تابع گرین کل سیستم  $G(E)$  از رابطه (۱) به دست می‌آید [۲۵-۲۶]:

(۱)

$$G(E) = \left[ (E + i\eta)I - H - \sum_L(E) - \sum_R(E) \right]^{-1}$$

$H$  ماتریس هامیلتونین سیستم،  $\eta$  مقدار بسیار کوچک و  $I$  ماتریس همانی است.  $\sum_{L/R}$  ماتریس خودانرژی الکتروند

چپ و راست هستند و به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$\sum_L(E) = \tau_L^\dagger g_L(E) \tau_L, \quad (2)$$

$$\sum_R(E) = \tau_R^\dagger g_R(E) \tau_R$$

$g_L$  و  $g_R$  توابع گرین سطحی الکتروندهای ایزوله در سمت چپ و راست هستند و با روش تکرار محاسبه می‌شوند.  $\tau_L$  و  $\tau_R$  ماتریس‌های جفت‌شدگی نامیده می‌شوند که برهم کنش بین ناحیه کانال و الکتروندها را توصیف می‌کنند. بر اثر کوپلینگ الکتروندها به ناحیه مرکزی، سطوح انرژی مولکولی به اندازه  $\Delta$  جابه‌جا می‌شوند. همچنین پهن‌شدگی

<sup>3</sup>.Perdew-Burke-Ernzerhof

<sup>1</sup>.SIESTA

<sup>2</sup>.Generalized Gradient Approximation

در حالت‌های مختلف AA و Aa2, AB2, AB, Aa, Ab در ولتاژ بایاس ۰ تا ۱/۲ V نشان می‌دهد. همان طور که در این شکل مشاهده می‌شود، مقدار جریان تا ولتاژ بایاس ۰/۴ بسیار ناچیز و نزدیک صفر است. دلیل این موضوع آن است که الکترودهای چپ و راست دارای ساختار نانو نوار گرافین آلفا شش‌دیمره و تک‌لایه هستند و در ساختار نوار انرژی آن‌ها شکاف انرژی ۰/۴ eV مشاهده می‌شود که با نتایج مطالعات اخیر مطابقت دارد [۱۷]. برای ولتاژهای بایاس  $V_b \geq 0.4$  V، مقدار جریان سوئیچ با چیدمان‌های مختلف در یک ولتاژ بایاس یکسان کاملاً متفاوت است. جریان گذرنده از سوئیچ در حالت‌های AB, Ab و Aa2 با افزایش ولتاژ بایاس از ۰/۴ V تا ۱/۲ V به صورت شبه‌خطی افزایش می‌یابد؛ اما روند تغییرات جریان برای حالت‌های AA و Aa, AB2 نسبت به تغییرات ولتاژ کاملاً متفاوت است.

جریان برای حالت Aa در محدوده ولتاژ بایاس [۰/۶ V و ۰/۴] به صورت خطی افزایش می‌یابد و سپس در محدوده ولتاژ [۰/۸ V و ۰/۶] کاهش می‌یابد. سوئیچ در این محدوده ولتاژ از خود مقاومت منفی  $439/56 K\Omega$  نشان می‌دهد و سپس جریان افزایش می‌یابد.

جریان سوئیچ در حالت AB2 در محدوده ولتاژ [۰/۸ V و ۰/۴] به صورت خطی افزایش می‌یابد. سپس جریان در محدوده ولتاژ [۱ V و ۰/۸] کاهش می‌یابد و مقدار مقاومت منفی سوئیچ  $884/95 K\Omega$  می‌شود. جریان سوئیچ AB2 پس از ولتاژ ۱ V، با افزایش ولتاژ، روند افزایشی دارد.

جریان گذرنده از سوئیچ در حالت AA در محدوده ولتاژ [۱/۲ V و ۰/۴] تغییرات شدیدتری را از خود نشان می‌دهد. مطابق شکل ۲، جریان با افزایش ولتاژ در محدوده [۰/۶ V و ۰/۴] به صورت خطی افزایش می‌یابد. سپس روند تغییرات جریان در محدوده ولتاژ [۰/۸ V و ۰/۶] کاهشی است، به طوری که مقدار جریان در ولتاژ بایاس ۰/۸ V، به  $\mu A$  می‌رسد و این سوئیچ مقدار مقاومت منفی  $K\Omega$  ۷۸/۳۶۹ را از خود نشان می‌دهد. همچنین جریان در محدوده ولتاژ [۱ V و ۰/۸] افزایش و پس از ولتاژ ۱ V کاهش می‌یابد. طبق رابطه (۶) فرمول لاندائو-بوتیکر، جریان گذرنده از کانال سوئیچ (منطقه پراکندگی مرکزی) در هر ولتاژ بایاس  $V_b$ ، متناسب با انتگرال سطح منحنی

تابع انتقال آن در محدوده انرژی  $[-\frac{V_b}{2}, +\frac{V_b}{2}]$  است.

به اندازه  $\Gamma$  در سطوح انرژی اتفاق می‌افتد و به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\Delta_{L/R} = \text{Re} \sum_{L/R} (E) \quad (3)$$

$$\Gamma_{L/R}(E) = i \left[ \sum_{L/R} (E) - \sum_{L/R}^\dagger (E) \right] = -2 \text{Im} \sum_{L/R} (E) \quad (4)$$

$T(E, V_b)$  بیانگر احتمال انتقال کوانتومی الکترون‌های

برخوردی با انرژی E از الکتروده چپ به راست در ولتاژ بایاس اعمالی  $V_b$  است و با رابطه (۵) محاسبه می‌شود:

$$T(E, V_b) = \quad (5)$$

$$\text{Trace} \left[ \Gamma_R(E) G(E) \Gamma_L(E) G^\dagger(E) \right]$$

جریان عبوری از کانال سوئیچ در ولتاژ بایاس  $V_b$ ، با فرمول لاندائو-بوتیکر به صورت زیر است [۲۵-۲۶]:

$$(6)$$

$$I(V_b) = \frac{2e}{h} \int_{\mu_L}^{\mu_R} T(E, V_b) [f_L(E) - f_R(E)] dE$$

که  $e$  بار الکترون و  $h$  ثابت پلانک است.

$$f_{L,R}(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - \mu_{L,R})/kT}}$$

الکترون‌ها در الکتروده چپ و راست است.

$$\mu_{L,R} = E_f \pm \frac{eV_b}{2}$$

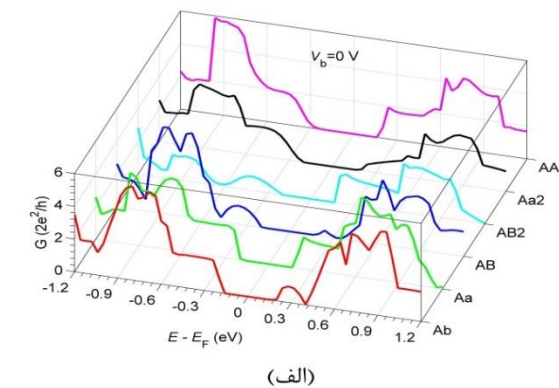
راست هستند. به منظور درک تغییرات ترابرد الکترونی سوئیچ در حالت‌های مختلف، مؤلفه‌های انتقال محلی را در طول پیوندهای شیمیایی در نظر می‌گیریم. ضریب انتقال کلی می‌تواند به مؤلفه‌های انتقال محلی  $T_{ij}$  تقسیم شود که با خطوط پیوند نمایش داده شده، مسیر انتقال نامیده می‌شود. رابطه بین ضریب انتقال کلی و مؤلفه‌های انتقال محلی به صورت زیر است [۲۸]:

$$T(E, V_b) = \sum_{i \in A, j \in B} T_{ij}(E, V_b) \quad (7)$$

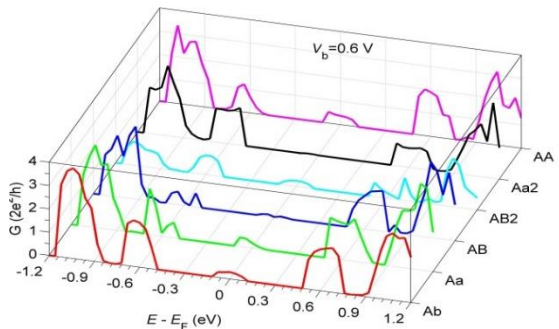
که  $A$  و  $B$  نشانگر زوج‌های اتمی هستند که توسط یک سطح فرضی عمود بر طول پیوند از یکدیگر جدا شده‌اند. ضریب انتقال کلی، مجموع سهم مؤلفه‌های انتقال محلی بین همه جفت اتم‌های  $A$  و  $B$  در سطح کانال است.

### ۳- نتایج مدل‌سازی سوئیچ پیشنهادی

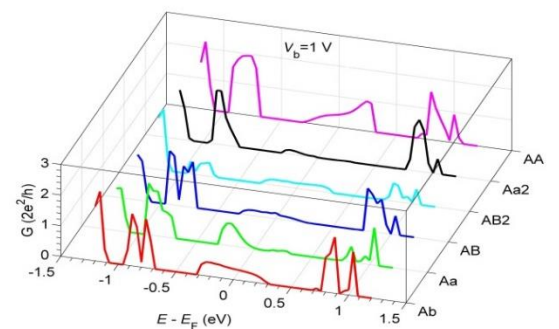
شکل (۲) مشخصه جریان-ولتاژ سوئیچ گرافینی دولایه را



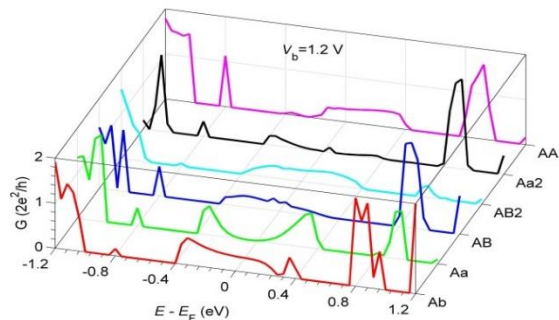
(الف)



(ب)

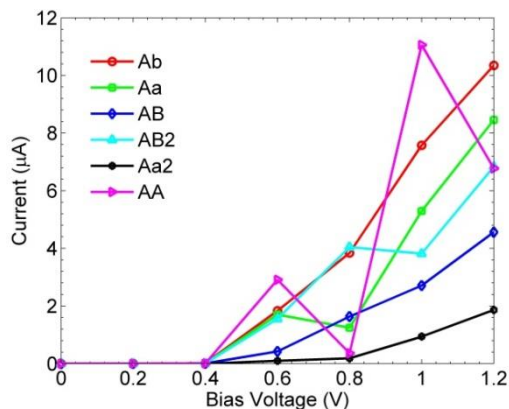


(ج)



(د)

شکل ۳- طیف انتقال سوئیچ در حالت های مختلف  $Aa$ ،  $Ab$ ،  $AA$  و  $Aa2$ ،  $AB2$ ،  $AB$  برای ولتاژهای بایاس  $0.6V$ ،  $1V$  و  $1.2V$



شکل ۲- منحنی مشخصه جریان- ولتاژ برای سوئیچ در حالت های  $AA$  و  $Aa2$ ،  $AB2$ ،  $AB$ ،  $Aa$ ،  $Ab$

شکل (۳) طیف انتقال سوئیچ نانو نوار گرافینی دولایه را در حالت های مختلف  $Ab$ ،  $Aa$ ،  $AB$ ،  $AB2$ ،  $Aa2$  و  $AA$  برای ولتاژهای بایاس  $0V$ ،  $0.6V$ ،  $1V$  و  $1.2V$  نشان می دهد. به طور نمونه، در ولتاژ بایاس  $1V$ ، سطح زیر منحنی تابع انتقال سوئیچ در حالت  $AA$  در محدوده انرژی  $[+0.5eV$  و  $-0.5eV]$  بیشتر از سطح زیر منحنی تابع انتقال آن در ولتاژ بایاس  $0.6V$  در محدوده انرژی  $[+0.3eV$  و  $-0.3eV]$  است و بیانگر آن است که جریان سوئیچ در حالت  $AA$  در ولتاژ بایاس  $1V$  بیشتر از جریانش در ولتاژ بایاس  $0.6V$  است. همچنین در ولتاژ بایاس  $1.2V$ ، سطح زیر منحنی طیف انتقال سوئیچ در حالت  $Ab$  بیشتر از سطح زیر منحنی تابع انتقال سوئیچ در حالت  $Aa2$  در محدوده انرژی  $[+0.6eV$  و  $-0.6eV]$  است که نشان می دهد در ولتاژ بایاس  $1.2V$ ، جریان سوئیچ در حالت  $Ab$  بیشتر از جریان سوئیچ در حالت  $Aa2$  است. این نتایج، سازگاری خوبی با مقادیر جریان منحنی های شکل (۲) دارد.

برای درک عمیق تر ضرایب طیف تابع انتقال و چگونگی روند تغییرات آن در ولتاژهای بایاس مختلف، برای نمونه در شکل (۴) ساختار نوار انرژی الکترونیکی چپ و راست (پنل راست و چپ) و سطوح انرژی مولکولی<sup>۱</sup> ناحیه پراکندگی سوئیچ (پنل وسط) در حالت  $AA$  برای ولتاژهای بایاس  $0.6V$  و  $1.0/8V$  نشان داده شده است. بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده<sup>۲</sup> (HOMO) و پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده<sup>۳</sup> (LUMO) در طیف های انرژی مولکولی به رنگ قرمز نشان داده شده اند.

<sup>3</sup>.Lowest Unoccupied Molecular Orbital

<sup>1</sup>.Molecular Energy Spectrum

<sup>2</sup>.Highest Occupied Molecular Orbital

و در کل سطح کانال پخش شده است؛ اما در ولتاژ بایاس  $0.8\text{ V}$  و  $0.8\text{ V}$  MPSH مربوط به LUMO به طور محلی در لایه پایینی سوئیچ مستقر شده و فقط MPSH مربوط به HOMO در این ولتاژ بایاس در هر دو لایه و در کل سطح پراکنده است. این نتایج بیانگر آن است که جریان عبوری از افزاره در حالت AA برای ولتاژ بایاس  $0.6\text{ V}$  بیشتر از جریان آن در ولتاژ بایاس  $0.8\text{ V}$  است. برای درک بیشتر مقاومت منفی ایجاد شده در این محدوده ولتاژ، در شکل ۵ طیف انتقال سوئیچ در حالت AA در ولتاژهای بایاس  $0.6\text{ V}$  و  $0.8\text{ V}$  نشان داده شده است. با توجه به این شکل در ولتاژ بایاس  $0.6\text{ V}$  سطح زیر منحنی تابع انتقال افزاره در حالت AA در محدوده انرژی  $[+0.3\text{ eV}$  و  $-0.3\text{ eV}]$ ، بیشتر از سطح زیر منحنی تابع انتقال آن در ولتاژ بایاس  $0.8\text{ V}$  در محدوده انرژی  $[+0.4\text{ eV}$  و  $-0.4\text{ eV}]$  است. این موضوع نیز بیانگر آن است که سوئیچ پیشنهادی در محدوده ولتاژ  $[0.8\text{ V}$  و  $0.6\text{ V}]$  از خود مقاومت دیفرانسیلی منفی نشان می‌دهد.

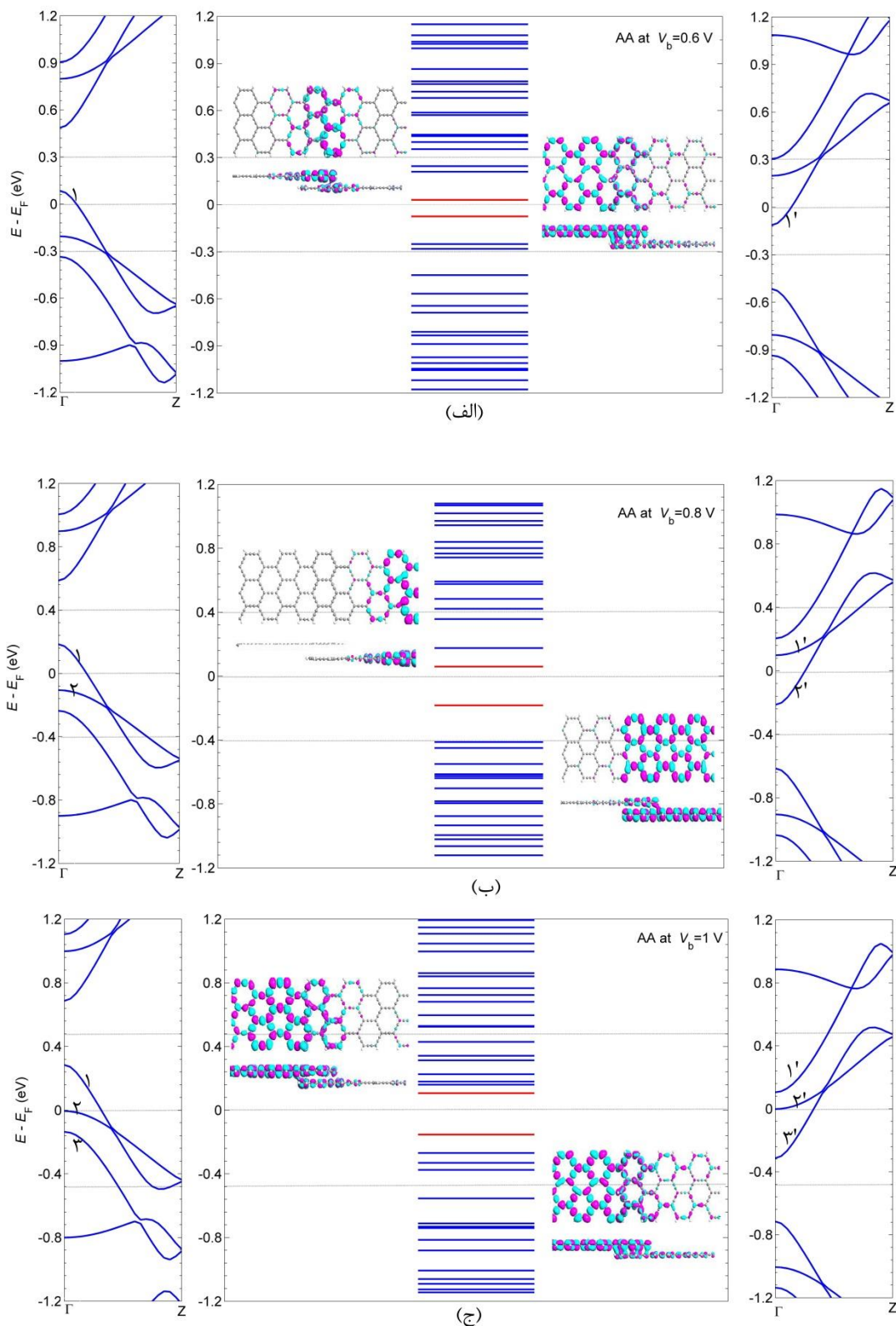
در ولتاژ بایاس  $1\text{ V}$  (شکل ۴-ج)، ترازهای انرژی ۱، ۲ و ۳ الکتروند چپ با ترازهای انرژی ۱، ۲ و ۳ الکتروند راست در پنجره بایاس  $[+0.5\text{ eV}$  و  $-0.5\text{ eV}]$  با یکدیگر هم‌پوشانی دارند. در این شکل‌ها سطوح انرژی مولکولی نیز برای ناحیه پراکندگی نشان داده شده و همان طور که مشخص است، در ولتاژ بایاس  $1\text{ V}$  تعداد سطوح انرژی مولکولی بیشتری از ناحیه مرکزی در انتقال حامل‌ها و ایجاد جریان تأثیر دارند. MPSH مربوط به HOMO و LUMO سوئیچ در حالت AA تحت ولتاژ بایاس  $1\text{ V}$  در شکل (۴-ج) ارائه شده است. با توجه به این شکل در ولتاژ بایاس  $1\text{ V}$  MPSH مربوط به HOMO و LUMO در هر دو لایه و در کل سطح کانال پخش شده و حاکی از آن است که جریان عبوری از سوئیچ در حالت AA در ولتاژ بایاس  $1\text{ V}$ ، بیشتر از جریان عبوری از آن در ولتاژهای بایاس  $0.6\text{ V}$  و  $0.8\text{ V}$  است. مطابق نتایج به دست آمده ویژگی‌های انتقالی سوئیچ پیشنهادی به تعداد ترازهای انرژی الکتروند چپ و راست شرکت کننده در پنجره بایاس و میزان هم‌پوشانی آن‌ها، تعداد سطوح انرژی مولکولی و توزیع فضایی توابع موج آن‌ها در ناحیه پراکندگی مرکزی بستگی دارد.

در این شکل‌ها توزیع فضایی هامیلتونین خودسازگار تصویر شده مولکولی<sup>10</sup> (MPSH) برای HOMO و LUMO نمایش داده شده است. همچنین خطوط خط چین، پنجره بایاس را نمایش می‌دهد. زمانی که به سوئیچ ولتاژ بایاس  $+V_b$  اعمال می‌شود، ترازهای انرژی الکتروند چپ (راست) به مقدار  $\frac{eV_b}{2}$  به سمت بالا (به سمت پایین) شیفت داده می‌شوند. بنابراین در هر ولتاژ بایاسی تعداد ترازهای انرژی الکتروند چپ و راست در پنجره بایاس و همچنین میزان هم‌پوشانی آن‌ها متفاوت است.

برای نمونه، در ولتاژ بایاس  $0.6\text{ V}$ ، ترازهای انرژی الکتروند چپ به اندازه  $0.3\text{ eV}$  به سمت بالا و ترازهای انرژی الکتروند راست به اندازه  $0.3\text{ eV}$  به سمت پایین شیفت داده می‌شوند (شکل ۴-الف). در ولتاژ بایاس  $0.6\text{ V}$ ، تراز انرژی ۱ الکتروند چپ با تراز انرژی ۱ الکتروند راست در پنجره بایاس  $1\text{ eV}$   $[+0.3\text{ eV}$  و  $-0.3\text{ eV}]$  به طور جزئی بر هم منطبق می‌شوند. همان طور که در این شکل مشخص است، در ناحیه هم‌پوشانی ترازهای انرژی الکتروند چپ و راست، سطوح انرژی مولکولی HOMO و LUMO متناظر با این انرژی‌ها هستند و الکترون‌های الکتروند چپ قادرند از این سطوح انرژی منطقه پراکندگی سوئیچ عبور کرده، به الکتروند سمت راست برسند. در ولتاژ بایاس  $0.8\text{ V}$  (شکل ۴-ب)، ترازهای انرژی ۱ و ۲ الکتروند چپ با ترازهای انرژی ۱ و ۲ الکتروند راست در پنجره بایاس  $[+0.4\text{ eV}$  و  $-0.4\text{ eV}]$  با یکدیگر هم‌پوشانی دارند و در این ناحیه هم‌پوشانی سطوح انرژی مولکولی HOMO، LUMO و  $LUMO+1$  متناظر با این انرژی‌ها هستند. همچنین میزان انتقال حامل‌ها به شدت به توزیع بین اوربیتال‌های مولکولی منطقه پراکندگی و ترازهای انرژی الکتروند چپ و راست وابسته است. این عامل را می‌توان با مطالعه MPSH سطوح انرژی مولکولی ناحیه پراکندگی بررسی کرد. با توجه به آنکه ترازهای HOMO و LUMO نزدیک به سطح انرژی فرمی هستند، نقش اساسی در تعیین ویژگی‌های انتقالی و میزان جریان گذرنده از کانال سوئیچ دارند.

بنابراین در شکل (۴-الف) و (۴-ب)، MPSH مربوط به HOMO و LUMO سوئیچ در حالت AA تحت ولتاژ بایاس  $0.6\text{ V}$  و  $0.8\text{ V}$  ارائه شده است. در ولتاژ بایاس  $1\text{ V}$  MPSH مربوط به HOMO و LUMO در هر دو لایه





شکل ۴- ساختار نوار انرژی الکترودهای چپ و راست (پنل راست و چپ) و طیف انرژی مولکولی ناحیه پراکندگی (پنل وسط) سونئج در حالت AA برای ولتاژهای بایاس ۰/۶ V، ۰/۸ V، ۱ V. HOMO و LUMO در طیفهای انرژی مولکولی به رنگ قرمز نشان داده شده‌اند. در این شکل‌ها MPSH برای HOMO و LUMO نمایش داده شده است

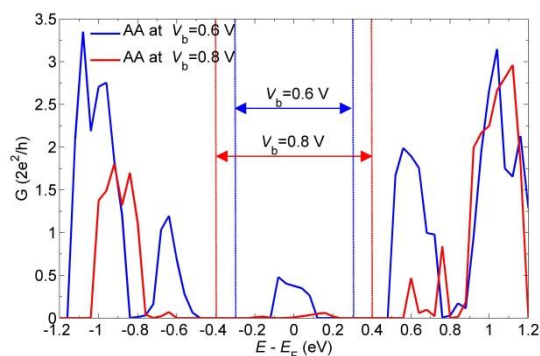


همان طور که نتایج نشان می‌دهد، رفتار طیف انتقال مدل اتمی سوئیچ در حالت‌های مختلف با توجه به چیدمان لایه‌ها متفاوت است. برای درک بیشتر این موضوع، سوئیچ را در حالت‌های AA، Aa2 و Aa در ولتاژ بایاس ۱ V در نظر می‌گیریم و به بررسی بیشترین مقدار ضریب انتقال آن‌ها در پنجره انرژی  $[-0.5, +0.5 \text{ eV}]$  که به ترتیب در انرژی‌های  $0.2 \text{ eV}$ ،  $-0.24 \text{ eV}$  و  $0.24 \text{ eV}$  رخ می‌دهد، می‌پردازیم. با مقایسه شکل‌های ۶ (الف) تا (ج)، مسیرهای جریان محلی سوئیچ در هر سه حالت کاملاً با یکدیگر متفاوت است، به طوری که برای سوئیچ در حالت AA مسیرهای جریان بیشتری بین اتم‌ها در لایه‌های یکسان و همچنین بین اتم‌ها در لایه‌های متفاوت وجود دارد. همچنین مطابق شکل (۳) ضریب انتقال محلی سوئیچ در حالت AA در انرژی  $0.24 \text{ eV}$  بیشتر از ضریب انتقال سوئیچ در حالت‌های Aa و Aa2 به ترتیب در انرژی‌های  $0.2 \text{ eV}$  و  $-0.24 \text{ eV}$  است.

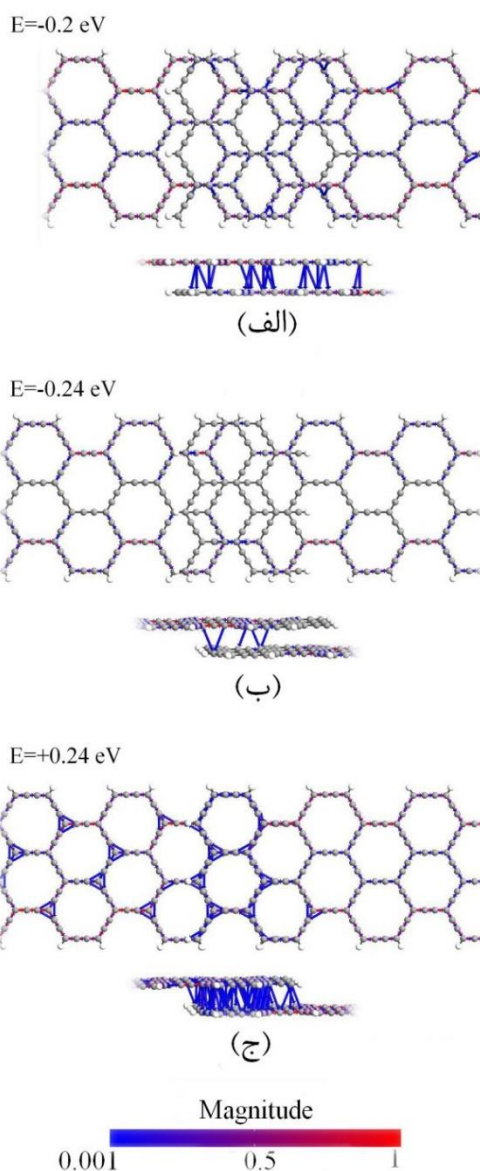
با توجه به نتایج به دست آمده، چینش‌ها و موقعیت‌های متمایز لایه بالایی نسبت به لایه پایینی باعث می‌شود برای سوئیچ در هر حالت، مسیرهای جریان محلی مختلفی در لایه‌های یکسان یا میان لایه‌ها ایجاد شود. این موضوع سبب می‌گردد در یک ولتاژ بایاس مشخص، طیف انتقال و جریان سوئیچ از حالتی به حالت دیگر، تغییرات قابل ملاحظه‌ای را نشان دهد.

همچنین نوار رنگی نشان داده شده در شکل (۶) اندازه و بزرگی مسیرهای انتقال محلی را نشان می‌دهد که شدت آن‌ها از رنگ آبی به قرمز افزایش می‌یابد. در این شکل، مسیرهای قرمز رنگ در لایه‌های بالایی یا پایینی مشاهده می‌شود و بیانگر آن است که شدت جریان عبوری از میان اتم‌های داخل یک صفحه بیشتر است.

شکل ۷ بیشترین ضریب سوئیچینگ افزاره پیشنهادی را در ولتاژهای بایاس  $0.6 \text{ V}$ ،  $0.8 \text{ V}$ ،  $1 \text{ V}$  و  $1.2 \text{ V}$  نشان می‌دهد. بیشترین ضریب سوئیچینگ افزاره پیشنهادی در یک ولتاژ مشخص، از نسبت جریان سوئیچ در حالتی که بیشترین مقدار جریان را دارد، به جریان سوئیچ در حالتی که کمترین مقدار جریان را دارد، حاصل می‌شود. با توجه به مقادیر جریان (شکل ۲)، کمترین مقدار جریان سوئیچ در ولتاژهای اعمالی  $0.6 \text{ V}$ ،  $0.8 \text{ V}$ ،  $1 \text{ V}$  و  $1.2 \text{ V}$  در حالت Aa2 است؛ اما بیشترین مقدار آن در هر ولتاژ بایاس مفروض، نسبت به نوع چیدمان لایه‌ها تعیین می‌شود. بنابراین برای



شکل ۵- طیف انتقال سوئیچ در حالت AA برای ولتاژهای بایاس  $0.6 \text{ V}$  و  $0.8 \text{ V}$



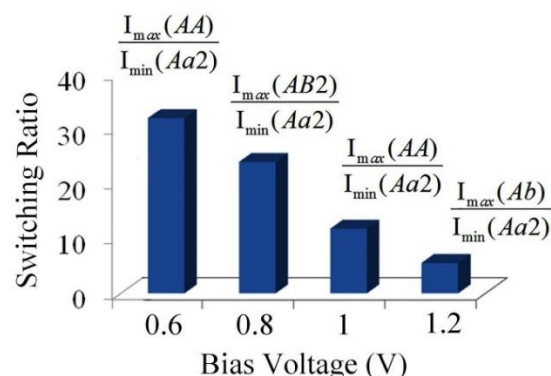
شکل ۶- مسیرهای انتقال محلی مدل اتمی سوئیچ در حالت‌های (الف) Aa در  $E = -0.2 \text{ eV}$ ، (ب) Aa2 در  $E = -0.24 \text{ eV}$  و (ج) AA در  $E = +0.24 \text{ eV}$  تحت ولتاژ بایاس  $1 \text{ V}$

گردد که این حالت‌ها به ترتیب  $Aa$ ,  $Ab$ ,  $AB$ ,  $AB2$ ,  $Aa2$  و نام گذاری شدند. جریان عبوری از سوئیچ مذکور در حالت‌های مختلف نسبت به ولتاژ بایاس اعمالی محاسبه شد. نتایج حاکی از آن است که لغزش لایه بالایی بر روی لایه پایینی، تغییرات زیادی را در مشخصه جریان-ولتاژ سوئیچ ایجاد می‌کند به گونه‌ای که با جابه‌جایی اندک لایه بالایی شاهد تغییرات چشمگیر در جریان و همچنین هدایت الکتریکی آن هستیم. برای بررسی هرچه دقیق‌تر جریان سوئیچ، طیف انتقال، ساختار نوار انرژی، طیف انرژی مولکولی و توزیع فضایی هامیلتونین خودسازگار تصویر شده اوربیتال‌های مولکولی در ولتاژهای بایاس مختلف، تحلیل و بررسی شد. نتایج نشان داد که تراپد الکترونی سوئیچ در یک ولتاژ اعمالی مشخص، به تعداد ترازهای انرژی الکترون چپ و راست شرکت کننده در پنجره بایاس و میزان هم‌پوشانی آن‌ها، تعداد سطوح انرژی مولکولی ناحیه پراکندگی و توزیع فضایی توابع موج آن‌ها بستگی دارد.

مقایسه نتایج حاصل از مسیرهای انتقال محلی سوئیچ در حالت‌های مختلف و تحت ولتاژ بایاس یکسان نشان داد با توجه به چیدمان لایه‌ها، مسیرهای جریان محلی مختلفی ایجاد شده، در نتیجه طیف انتقال سوئیچ پیشنهادی در هر حالتی با حالت دیگر آن متفاوت می‌شود. با توجه به اینکه مقدار جریان به ولتاژ بایاس اعمالی و نوع چیدمان لایه‌ها حساس است، چنین قابلیتی می‌تواند در مدل سازی اتمی و به کارگیری سوئیچ پیشنهادی در سیستم‌های نانوالکترومکانیکی مفید باشد. همچنین طبق نتایج به دست آمده، سوئیچ پیشنهادی در سه حالت  $Aa$ ,  $AB2$  و  $AA$  از خود مقاومت دیفرانسیلی منفی نشان داد و برای سوئیچ در حالت  $AB2$  بیشترین مقدار مقاومت منفی  $K\Omega$   $884/95$  در محدوده ولتاژ بایاس  $V$  [۱ و  $0/8$ ] مشاهده شد. بنابراین سوئیچ پیشنهادی در سه حالت  $Aa$ ,  $AB2$  و  $AA$  قابلیت استفاده در ادوات کوانتومی تونلی را دارد.

عملکرد این افزاره به عنوان سوئیچ الکترومکانیکی کافی است موقعیت اولیه لایه بالایی همواره در  $Aa2$  در نظر گرفته شود و با توجه به ضریب سوئیچینگ مورد نیاز در یک ولتاژ بایاس خاص، لایه بالایی جابه‌جا شده، در موقعیت‌های  $AA$ ,  $AB2$  و  $Ab$  قرار گیرد.

برای نمونه، در ولتاژ بایاس  $0/6V$ ، سوئیچ در حالت  $AA$  بیشترین مقدار جریان و در حالت  $Aa2$  کمترین مقدار جریان را دارد و نسبت سوئیچینگ جریان افزاره در این دو حالت، برابر ۳۴ است.



شکل ۷- بیشترین ضریب سوئیچینگ افزاره پیشنهادی در ولتاژهای بایاس  $0/6V$ ,  $0/8V$ ,  $1V$  و  $1/2V$

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، مدل سازی اتمی سوئیچ الکترومکانیکی مبتنی بر نانو نوار گرافین آلفا دولایه با چینش‌های متنوع لایه‌ها نسبت به یکدیگر ارائه شد و ویژگی‌های انتقالی الکترونیکی آن با بهره‌گیری از نظریه تابعی چگالی در ترکیب با تابع گرین غیرتعدالی مورد بررسی قرار گرفت. به منظور مدل سازی سوئیچ الکترومکانیکی با نانو نوار گرافین آلفا دولایه، لایه پایینی ثابت در نظر گرفته شد و لایه بالایی به اندازه  $1/36 \text{ \AA}$ ,  $2/61 \text{ \AA}$ ,  $3/97 \text{ \AA}$ ,  $8/41 \text{ \AA}$ ,  $9/44 \text{ \AA}$  و  $12/06 \text{ \AA}$  در راستای محور افقی جابه‌جا گردید. عدم تطابق موقعیت مکانی اتم‌ها در لایه بالایی و پایینی، موجب شد تا برای سوئیچ پیشنهادی شش حالت متمایز ایجاد

#### مراجع

- [1] A.K. Geim, K.S. Novoselov, "The rise of graphene", Nature Materials, Vol. 6, March 2007, pp. 183-191
- [2] رحمان زینالی، کامران قاسم‌زاده و علیرضا بهروزسرن، «مدل سازی عملکرد غشای نانوکامپوزیتی گرافینی جهت جداسازی هیدروژن به کمک روش دینامیک سیالات محاسباتی»، مجله مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۶، شماره ۵۵، زمستان ۱۳۹۷، صفحه ۷۷-۸۶.
- [3] محمد همت اسفیه، مجتبی بیگلری، سیف‌الله سعدالدین و سید هادی رستمیان، «ارزیابی تجربی خواص ترموفیزیکی، انتقال حرارت جابه‌جایی و افت فشار در نانوسیال آب- نانولوله کربنی چندجداره عامل دار شده»، مجله مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۵، شماره ۴۸، بهار ۱۳۹۶، صفحه ۷۳-۸۴.

- [۴] بهروز عبدی تهنه و علی نادری، «ساختار جدید ترانزیستور اثر میدانی نانولوله کربنی تونلرزی با دوپینگ خطی در ناحیه درین: شبیه سازی عددی کوانتومی»، مجله مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۶، شماره ۵۲، بهار ۱۳۹۷، صفحه ۱۰۹-۱۱۷.
- [5] S. Michael Fuhrer, V. Nikhil Medhekar, "Dirac-point photocurrents due to the photothermoelectric effect in non-uniform graphene devices", *Nature Nanotechnology*, Vol. 15, February 2020, pp.241–243.
- [6] C.H.A. Tsang, H. Huang, J. Xuan, H. Wang and D.Y.C. Leung, "Graphene materials in green energy applications: Recent development and future perspective", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. 120, March 2020, pp.109656.
- [7] N.H. Van, M. Muruganathan, J. Kulothungan and H. Mizuta, "All Two-Dimensional Materials Three-Terminal Graphene Nanoelectromechanical Switch", *Nanoscale*, Vol. 10, April 2018, pp. 12349.
- [8] Y. Qian, K.T. Lam, C. Lee and G. Liang, "The effects of interlayer mismatch on electronic properties of bilayer armchair graphene nanoribbons", *Carbon*, Vol. 50, April 2012, pp.1659.
- [9] J. Zheng, P. Guo, Z. Ren, Z. Jiang, J. Bai and Z. Zhang, "Conductance fluctuations as a function of sliding motion in bilayer graphene nanoribbon junction: A first-principles investigation", *Applied Physics Letters*, Vol.101, August 2012, pp. 083101.
- [10] Y. Xie, S. Cao, X. Wu, B.Y. Yu, L.Y. Chen and J.M. Zhang, "Density functional theory study of hydrogen sulfide adsorption onto transition metal-doped bilayer graphene using external electric fields", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 124, October 2020, pp. 114252.
- [11] A.A. Shokri, and N. Salami, "Quantum transport of tunnel field effect transistors based on bilayer-graphene nanoribbon heterostructures", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 119, May 2020, pp. 113908.
- [12] Z. He, C. Yu, Q. Liu, X. Song, X. Gao, J. Guo, C. Zhou, S. Cai and Z. Feng, "High temperature RF performances of epitaxial bilayer graphene field-effect transistors on SiC substrate", *Carbon*, Vol. 164, August 2020, pp. 435-441.
- [13] M. Huang, P.V. Bakharev, Z.J. Wang, M. Biswal, Z. Yang, S. Jin, B. Wang, H.J. Park, Y. Li, D. Qu, Y. Kwon, X. Chen, S.H. Lee, M.G. Willinger, W.J. Yoo, Z. Lee and R.S. Ruoff, "Large-area single-crystal AB-bilayer and ABA-trilayer graphene grown on a Cu/Ni(111) foil", *Nature Nanotechnology*, Vol. 15, January 2020, pp.289–295.
- [14] Y.D. W. Zhou, J. Gao, X. Pan and Y. Li, "Fundament and Application of Graphdiyne in Electrochemical Energy", *Accounts of Chemical Research*, Vol. 53, No. 2, February 2020, pp. 459-469.
- [15] X. Zhang, H. Wang, K. Wu, Q. Li, Z. Shao, Q. Yang, C. Chen, X. Cui, J. Chen and J. Wang, "Two-dimensional  $\gamma$ -graphyne for ultrafast nonlinear optical applications", *Optical Materials Express*, Vol. 10, 2020, pp. 293-301.
- [16] G. Li, Y. Li, H. Liu, Y. Guo, Y. Lia and D. Zhua, "Architecture of graphdiyne nanoscale films", *Chemical Communication*, Vol. 46, January 2010, pp. 3256-3258.
- [17] W. Wu, W. Guo and X.C. Zeng, "Intrinsic electronic and transport properties of graphyne sheets and nanoribbons", *Nanoscale*, Vol. 5, July 2013, pp. 9264 -9276.
- [18] B. Bhattacharya, U. Sarkar and N. Seriani, "Electronic Properties of Homo and Hetero Bilayer Graphyne: The Idea of a Nanocapacitor", *Journal of Physical Chemistry*, Vol. 120, November 2016, pp. 26579–26587.
- [19] S. Wu, Y. Yuan, H. Ai, J.Y. Lee and B. Kang, "Effects of Double-atom Vacancy on the Electronic Properties of Graphyne: A DFT Investigation", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 20, August 2018, pp. 22739-22743.
- [20] Y. Hang, W. Wen-Zhi, J. Yu and W.L. Guo, "Tuning the energy gap of bilayer  $\alpha$ -graphyne by applying strain and electric field", *Chinese Physics B*, Vol. 25, December 2016, pp. 023102.
- [21] O. Leenaerts, B. Partoens and F.M. Peeters, "Tunable double Dirac cone spectrum in bilayer  $\alpha$ -graphyne", *Applied Physics Letters*, Vol.103, No. 1, July 2013, pp. 013105.
- [22] D. Jariwala, A. Srivastava and P.M Ajayan, "Graphene Synthesis and Band Gap Opening", *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol. 11, November 2011, pp. 6621-6641.
- [23] Y. Liu, M. Bo, C.Q. Sun and Y. Huang, "The Band-Gap Modulation of Graphyne Nanoribbons by Edge Quantum Entrapment", *Nanomaterials*, Vol. 8, February 2018, pp. 92.

- [24] W. Koch and M.C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, 2<sup>th</sup> ed, Wiley, NJ, USA, 2001.
- [25] S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge University Press, 2<sup>th</sup> ed Cambridge, United Kingdom, 2005.
- [26] J. Chen, K.S. Thygesen and K.W. Jacobsen, "Ab-initio non-equilibrium quantum transport and forces with the real space projector augmented wave method", *Physical Review B*, Vol. 85, April 2012, 155140.
- [27] X. Xua and W.A. Goddard, "The extended Perdew-Burke-Ernzerhof functional with improved accuracy for thermodynamic and electronic properties of molecular systems", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 121, No. 9, September 2004, pp. 4068.
- [28] G.C. Solomon, C. Herrmann, T. Hansen, V. Mujica and M.A. Ratner, "Exploring local currents in molecular junctions", *Nature Chemistry*, Vol. 2, February 2010, pp.223–228.