

Simulation of Gamma Graphyne Nanoribbon Transistor

Hamed Jafarzadeh¹, Mohammad Hossein Gholamyan²

¹Assistant Professor, Quchan University of Technology, Quchan, Iran

h.jafarzadeh@qiet.ac.ir

²PhD Student, Department of Electrical Engineering, Bojnourd Branch, Islamic Azad University, Bojnourd, Iran

hossein.gholamyan.14@gmail.com

Abstract:

In this research, the electronic properties of gamma graphyne nanoribbons have been investigated and a nano-transistor has been designed and simulated based on it. Density functional theory method and non-equilibrium Green's function have been used in calculations with the help of Quantum ATK calculation package. The results obtained from the band structure and density of states electronic indicate the quasi-metallic behavior and semi-conductivity of nanoribbons based on the shape of their edges. The field effect transistor with a gamma armchair handle nano channel has been designed and its characteristic curves have been obtained. The results show that the current of this transistor is much higher compared to the graphene transistor. The simulations show that the current in the gamma graphene transistor is well controlled by the gate voltage.

Keywords: Nano transistor, Field effect transistor, Gamma graphyne, Density function theory

Article Type: Research

Received: 15. 05. 2023

Revised: 03. 11. 2024

Accepted: 28. 12. 2024

Corresponding author: H. Jafarzadeh

Corresponding author's address: Quchan University of Technology, Quchan, Iran



1. Motivation of the work

The research aims to overcome the limitations of silicon-based technologies by leveraging gamma-graphyne nanoribbons. These materials exhibit enhanced mobility and tunable properties, making them ideal for advanced nanoelectronics.

2. Contributions

The primary advantage of this work is its exploration of gamma-graphyne nanoribbons as a superior material for nanoelectronics, addressing the limitations of graphene-based devices. Gamma-graphyne offers unique advantages, such as higher charge carrier mobility, exceptional flexibility, lower thermal conductivity, and better charge transfer characteristics. These properties make gamma-graphyne particularly suitable for field-effect transistors (FETs), where precise current control and efficient charge transport are critical. Unlike graphene, which exhibits a zero bandgap and limited versatility in semiconducting applications, gamma-graphyne nanoribbons allow for tunable electronic properties depending on edge configurations (armchair or zigzag).

This work emphasizes a significant improvement in transistor performance by designing a nano-transistor based on gamma-graphyne nanoribbons, which demonstrates higher current output and better gate voltage control compared to graphene-based transistors. By leveraging the quasi-metallic behavior of zigzag nanoribbons for electrodes and the semiconducting properties of armchair nanoribbons for the channel, this study achieves an optimized structure for enhanced device efficiency.

The study's objectives are clear: to investigate the electronic properties of gamma-graphyne nanoribbons and demonstrate their applicability in designing high-performance nano-transistors. Through comprehensive modeling and simulation, the work establishes a detailed understanding of the material's potential. The insights gained are not limited to academic interest but hold practical relevance in developing next-generation nanoelectronic devices, with applications in energy-efficient computing, flexible electronics, and advanced semiconductors. These advantages prioritize gamma-graphyne as a material of choice for future research and industrial applications.

3. Procedures

This study focuses on gamma-graphyne nanoribbons as the primary subject, specifically investigating their electronic properties and application in nano-transistor design. The research utilized theoretical models and computational simulations rather than physical subjects. The electronic properties of gamma-graphyne nanoribbons with different edge configurations—armchair and zigzag—were analyzed under specific

conditions to explore their behavior as quasi-metallic and semiconducting materials.

The computational framework was based on density functional theory (DFT) and the non-equilibrium Green's function (NEGF) method, implemented using the Quantum ATK software. The study involved designing and simulating a nano-transistor with a channel made of armchair gamma-graphyne nanoribbons, combined with zigzag nanoribbons as electrode interfaces. The channel's width and length were optimized for performance, with widths of 11.45 Å and lengths equivalent to three-unit cells. The interface structure was rotated by 30 degrees for effective connection, and dangling bonds were passivated with hydrogen atoms.

The simulations were conducted under varying conditions of gate-source and drain-source voltages. The study measured parameters such as the energy band structure, density of states, current-voltage (I-V) characteristics, and energy bandgap variations. These measurements were compared across different configurations and dimensions of the nanoribbons, with a focus on identifying optimal designs for nano-transistor performance.

Key comparisons included gamma-graphyne versus graphene-based transistors, zigzag versus armchair configurations, and the impact of nanoribbon width on electronic properties. The results highlighted the superior current modulation and gate voltage control of gamma-graphyne transistors, demonstrating their potential as a high-performance alternative to graphene in nanoelectronics. This comprehensive approach allowed for a detailed understanding of the material's behavior under realistic device conditions.

4. Findings

The major findings of this study reveal the exceptional potential of gamma-graphyne nanoribbons for application in nanoelectronics, particularly in field-effect transistors (FETs). The research demonstrates that the electronic properties of gamma-graphyne are highly dependent on the edge configuration of the nanoribbons. Zigzag nanoribbons exhibit quasi-metallic behavior with a minimal energy bandgap of approximately 0.03 eV, while armchair nanoribbons are semiconducting with a larger energy bandgap of 0.43 eV. Additionally, increasing the width of the nanoribbons reduces the bandgap, a trend consistent with graphene but more pronounced in gamma-graphyne, providing greater tunability for electronic applications.

The study's most significant finding is the superior performance of gamma-graphyne-based transistors compared to graphene-based ones. The gamma-graphyne FET, designed with an armchair nanoribbon as the channel and zigzag nanoribbons as electrodes, exhibits much higher current output and excellent gate voltage control. The I-V characteristics confirm a consistent increase in current with both gate-source and drain-source voltages, achieving current modulation at microampere levels—significantly outperforming

graphene transistors. This is attributed to gamma-graphyne's higher charge carrier mobility, exceptional flexibility, and better charge transfer efficiency.

These findings are significant as they establish gamma-graphyne as a promising material for high-performance, energy-efficient nano-transistors. The ability to control electronic properties through structural configurations and dimensions enhances its versatility for next-generation nanoelectronic devices. This study not only advances the understanding of gamma-graphyne but also provides a clear pathway for its practical application in flexible electronics, low-power computing, and advanced semiconductor technologies. By addressing the limitations of graphene, the research opens new opportunities for the development of cutting-edge nanoelectronics and reinforces gamma-graphyne's relevance in the ongoing evolution of carbon-based materials.

5. Conclusion

The major outcome of the study is the demonstration that gamma-graphyne nanoribbon-based transistors significantly outperform graphene transistors in current modulation and gate voltage control. This establishes gamma-graphyne as a superior material for high-performance nanoelectronics, offering enhanced charge mobility, tunable electronic properties, and energy-efficient transistor designs for next-generation semiconductor technologies.

شبیه‌سازی نانو ترانزیستور اثر میدان نانونوار گاما گرافین

حامد جعفرزاده^۱، محمد حسین غلامیان^۲

۱- استادیار- دانشگاه صنعتی قوچان- قوچان- ایران

h.jafarzadeh@qiet.ac.ir

۲- دانشجوی دکتری- گروه برق- واحد بجنورد- دانشگاه آزاد اسلامی- بجنورد- ایران

hossein.gholamyan.14@gmail.com

چکیده: در این پژوهش ویژگی‌های الکترونیکی نانو نوارهای گرافین گاما مورد بررسی قرار گرفته و یک نانو ترانزیستور بر پایه آن طراحی و شبیه‌سازی شده است. در محاسبات از روش نظریه تابعی چگالی و تابع گرین غیر تعادلی به کمک بسته محاسباتی Quantum ATK استفاده شده است. نتایج بدست آمده از ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی نشان دهنده رفتار شبه فلزی و نیمه رسانایی نانو نوارها براساس شکل لبه آن‌ها است. ترانزیستور اثر میدانی با کانال نانو نوار دسته میلی گاما طراحی شده و منحنی‌های مشخصه آن بدست آمده است. نتایج نشان می‌دهد که جریان‌دهی این ترانزیستور در مقایسه با ترانزیستور گرافینی بسیار بیشتر است. شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهد که جریان در ترانزیستور گرافین گاما بخوبی با ولتاژ گیت کنترل می‌شود.

کلمات کلیدی: نانو ترانزیستور، ترانزیستور اثر میدانی، نظریه تابعی چگالی، گاما گرافین، نانو نوار

نوع مقاله: پژوهشی

دریافت: ۱۴۰۲/۰۲/۲۵

بازنگری: ۱۴۰۲/۰۸/۱۳

پذیرش: ۱۴۰۳/۱۰/۰۸

نام نویسنده‌ی مسئول: دکتر حامد جعفرزاده

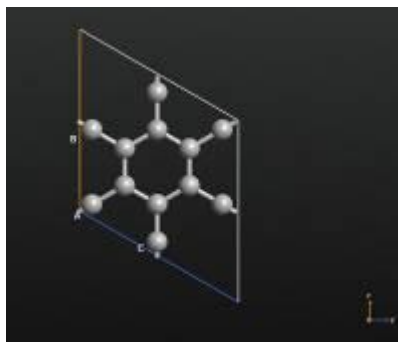
نشانی نویسنده‌ی مسئول: ایران-قوچان- دانشگاه صنعتی قوچان

۱- مقدمه

محاسبه ساختار نواری الکترونی، چگالی حالت‌های الکترونی برپایه روش اصول اولیه و با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام شد. در این محاسبات از تقریب برهمکنش تبادلی (GGA) استفاده گردید. شبیه‌سازی ترانزیستور اثر میدانی برپایه نانو نوار گرافاین گاما به منظور محاسبه منحنی مشخصه و سایر مشخصات با بکارگیری روش تابع گرین غیر تعادلی صورت گرفته است. بهینه‌سازی هندسی ساختار سلول واحد گرافاین گاما با حداکثر اندازه قابل قبول ۰.۰۱ و دقت نیرو ۰.۰۵ و دقت خطای استرس ۰.۰۱، در نظر گرفته شده است. کلیه محاسبات با استفاده از نرم افزار Quantumwise Atomistix Toolkit (ATK) انجام شده است [۸].

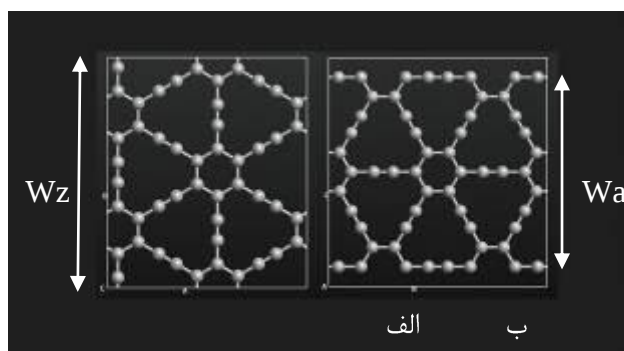
۲-۲- نانو ریبون گرافاین زیگزاگ و آرچر

نانو نوارهای گرافاین گاما به دو شکل دسته مبلی و زیگزاگ بررسی می‌شوند و همانند نانو نوارهای گرافنی گاف انرژی برای حالت زیگزاگ شبیه به فلز و نزدیک به صفر است و برای حالت دسته مبلی غیر صفر است. مشابه حالت گرافن، نوع نانو نوارهای گرافاین نیز باتوجه به شکل لبه‌های آن‌ها مشخص می‌شود. شکل ۱ سلول واحد یک گرافاین گاما را نشان می‌دهد.



شکل (۱): سلول واحد گرافاین گاما

در شکل (۲) سلول‌های واحد نانو نوار زیگزاگ و دسته مبلی را نشان می‌دهد. عرض نانو نوار زیگزاگ $W_z = 13.36 \text{ \AA}$ و نانو نوار دسته مبلی $W_a = 11.45 \text{ \AA}$ می‌باشد.



شکل (۲): الف سلول واحد نانو نوار زیگزاگ گرافاین گاما - ب سلول واحد نانو نوار دسته مبلی گرافاین گاما

اتم کربن می‌تواند دارای هیبریداسیون‌های SP^3 ، SP^2 و SP باشد و بنابراین می‌تواند پیوندهای مختلفی را تشکیل بدهد، برهمین اساس می‌توان با کربن مواد صفر، یک و دو بعدی تشکیل داد که علاوه بر گرافن می‌توان به فولرین (C60)، تیوب‌های نانو و نوارهای نانو اشاره کرد. گرافن به عنوان یک صفحه دوبعدی کربنی در سال ۲۰۰۴ مطرح شد که دارای ویژگی‌های فیزیکی منحصر بفردی می‌باشد. به مرور زمان تلاش فراوانی صورت گرفت تا ساختارهای دوبعدی بیشتر بررسی بشود تا ویژگی‌های جذابی همانند گرافن داشته باشد که در این میان ساختارهای دوبعدی کربن، گرافین‌ها و گرافدین‌ها گزینه‌های جدی‌تری بوده است [۱۳، ۱۲، ۱۱]. اتم‌های کربن در انواع مختلف گرافاین دارای دو هیبریداسیون SP^2 و SP می‌باشند که گاما گرافاین دارای بیشترین پایداری در بین گرافاین‌ها است [۱۱]. گاما گرافاین دارای تحرک پذیری بالا $(10^5 - 10^4 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1})$ ، قابلیت انعطاف پذیری استثنایی، رسانایی حرارتی پایین، انتقال بار بهتر در مقایسه با گرافن تک لایه می‌باشد که دلایل خوبی برای استفاده از این ساختار در ادوات نیمه هادی می‌باشد [۱۳، ۱۲، ۱۱]. همچنین تحقیقات اخیر نشان می‌دهد که گاما گرافاین بسبب پیوندهای $C \equiv C$ ویژگی‌های ترموالکتریک بهتری نسبت به گرافن دارد [C]. گرافین و گرافدین برای اولین بار توسط باگمن و همکارانش در سال ۱۹۸۷ پیشنهاد و در سال ۲۰۱۰ توسط گروه لی سنتر شد [۱۲، ۶، ۲]. گاف انرژی برای انواع مختلف خانواده گرافاین‌ها بین ۰.۴۶ eV تا ۱.۲۲ eV گزارش شده است. با اضافه شدن به ترتیب یک، دو و ... اتم کربن به اتصالات استیلنی موجود در ساختارهای گرافاینی، نانوساختارهای گرافدین، گرافدین ۲ و ... شکل می‌گیرد.

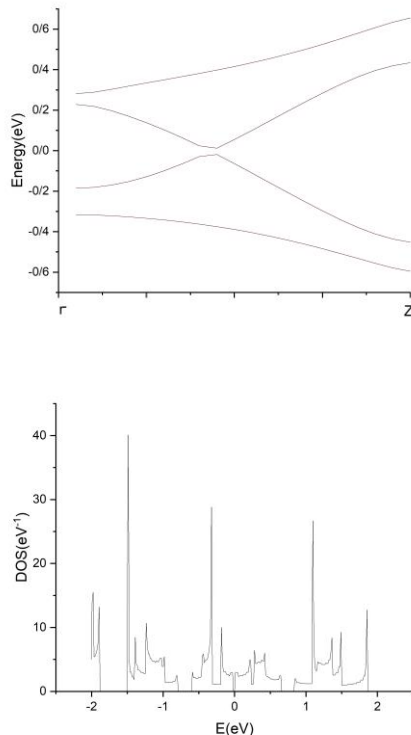
از طرفی محاسبات نظری و نتایج آزمایشگاهی موید تغییر ویژگی‌های فیزیکی نانوساختارها با محدودیت‌های کوانتومی است و لذا نانو ساختارهای شبه یک بعدی مانند نانو نوارها و یا نانو لوله‌ها می‌توانند گزینه‌های مناسبی برای تغییر ویژگی‌ها با تغییر بعد باشند [۱۵، ۱۴، ۵، ۴، ۳]. باتوجه به فراوانی عنصر کربن در طبیعت و قابلیت طبیعی اتصالات آن به شکل‌های مختلف هزینه‌های ساخت نسبت به نمونه‌های سیلیکونی قابل کاهش یافتن است.

در این مقاله ما به بررسی ویژگی‌های الکترونیکی نانو نوارهای دسته مبلی و زیگزاگ گرافاین گاما می‌پردازیم. از این نانو نوارها به عنوان کانال و الکترودهای نانو ترانزیستور اثر میدانی استفاده شده و شبیه‌سازی انجام شده است.

۲- روش انجام محاسبات

۲-۱- مدل‌ها و شبیه سازی

نشان دهنده رفتار شبه فلزی این نانو ساختار یک بعدی است. شکل (۵) الف سلختار نواری الکترونی و شکل (۵) ب چگالی حالت‌های الکترونی را برای نانو نوار زیگزآگ با عرض Wz نمایش می‌دهد.



شکل (۵): الف ساختار نواری الکترونی برای نانو نوار زیگزآگ با عرض Wz
_ ب چگالی حالت‌های الکترونی برای نانو نوار زیگزآگ با عرض Wz

شکل (۶) الف ساختار نواری الکترونی نانو نوار دسته مبلی و شکل (۶) ب چگالی حالت‌های الکترونی را برای نانو نوار دسته مبلی با عرض Wa نشان می‌دهد. برای نانو نوار دسته مبلی گاف انرژی 0.43eV بدست می‌آید. با دوبرابر کردن عرض نانو نوارهای گرافایینی زیگزآگ و دسته مبلی گاف انرژی بترتیب به مقادیر 0.12eV و 0.12eV کاهش می‌یابد که در شکل (۷) قابل مشاهده است [۱۱ و ۱۳].

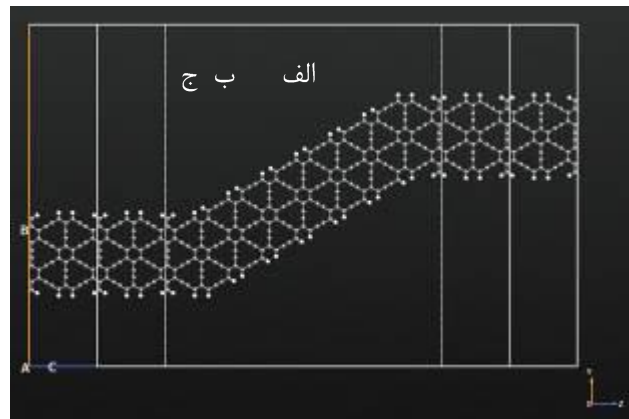
بنابراین روند کلی، شبه فلز بودن نانو نوارهای زیگزآگ و نیمه هادی بودن نانو نوارهای دسته مبلی مشاهده می‌شود. همچنین با افزایش عرض نانو نوارها مطابق انتظار و مشابه حالت گرافانی گاف انرژی کاهش می‌یابد. از همین رو بهترین انتخاب برای نانو ترانزیستور گرافایینی گاما استفاده از نانو نوارهای با عرض Wa و Wz می‌باشد که از نانو نوار دسته مبلی برای کانال و زیگزآگ برای واسط الکترودها استفاده شده است [۱۱ و ۱۲ و ۱۳].

منحنی مشخصه‌های ولتاژ-درین-سورس و جریان کانال برای نانو ترانزیستور گرافایینی در شکل (۸) آورده شده است. سورس به زمین متصل می‌باشد و ولتاژ درین تا 0.5V افزایش می‌یابد. برای مقادیر ولتاژ گیت 0.1 و 0.2 و 0.3 ولت، منحنی مشخصه تغییرات جریان کانال (درین به سورس) براساس ولتاژ درین رسم شده است. همان طور

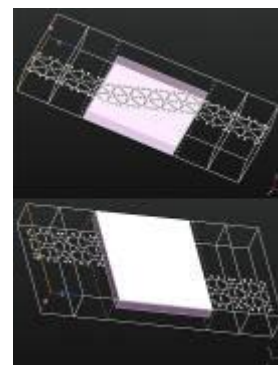
بدلیل مساحت کوچک کنتاکت‌ها و دشواری اتصال فلز به ملکول برای دستیابی به اتصال اهمی بالای الکترود فلزی و افزاره مولکولی باید از ساختار فلزی نانوریون زیگ زاگ بعنوان واسط استفاده بشود [۷، ۸، ۹].

۳-۲- طراحی ساختار نانو ترانزیستور

در ابتدا به منظور شبیه سازی بخش کانال، یک نانو نوار دسته مبلی گرافاین گاما با عرض Wa و طول 3.8 نانومتر که سه برابر سلول واحد تکرار شده است، در نظر گرفته شد. به منظور اتصال کانال به نانوریون گرافایینی زیگزآگ واسط، آن را 30 درجه چرخش داده می‌شود [۷، ۸]. بعد از اتصال بخش کانال مرکزی با بخش واسط باید الکترودها جهت اعمال ولتاژ ایجاد شود. باندهای آویزان اتم‌های کربن در کانال و تمام قسمت‌های دیگر به هیدروژن متصل شده‌اند. در انتها یک صفحه فلزی به واسطه یک دی‌الکتریک به عنوان گیت ترانزیستور ایجاد می‌شود. ضریب دی‌الکتریک معادل ϵ_0 با $4\epsilon_0$ و لایه فلزی گیت بسیار نازک است [۷، ۸].



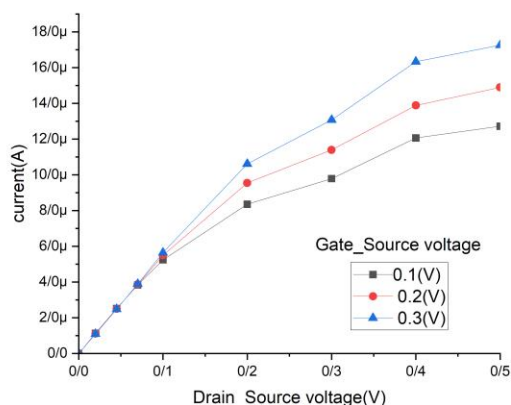
شکل (۳): الف کانال_ ب نانوریون واسط_ ج الکترود (درین یا سورس)



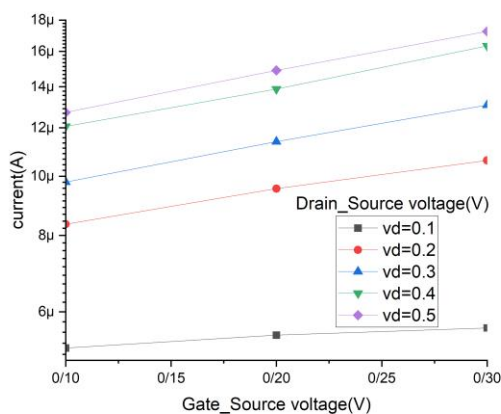
شکل (۴): دو نمای متفاوت از بالا و پایین ساختار کامل نانو ترانزیستور

۳- نتایج و مباحث

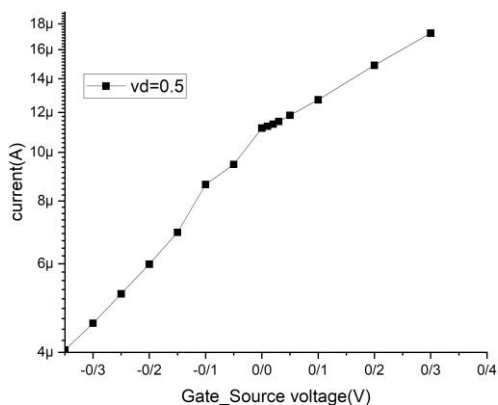
ابتدا ساختار نواری الکترونی و چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) را برای نانو نوار گرافایینی زیگزآگ و دسته مبلی بررسی و سپس با دوبرابر کردن عرض نانو نوار مشاهده می‌شود که باند انرژی کاهش می‌یابد. برای نانو نوار زیگزآگ گاف انرژی 0.43eV بدست آمد که



شکل (۸): منحنی مشخصه ولتاژ-درین-سورس و جریان کانال نانو ترانزیستور گرافاین گاما



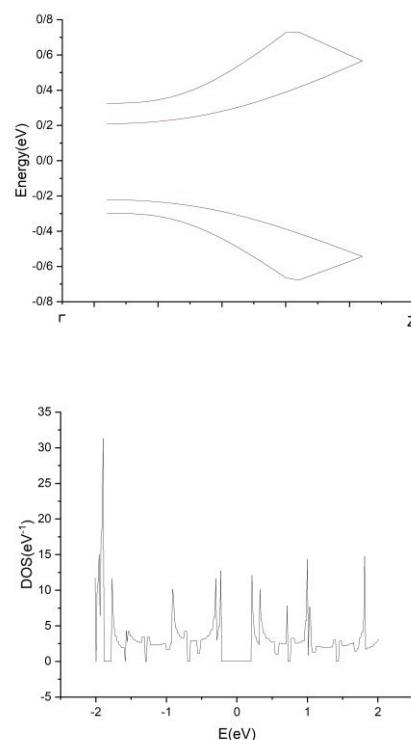
شکل (۹): منحنی مشخصه ولتاژ گیت و جریان کانال نانو ترانزیستور گرافاین گاما



شکل (۱۰): منحنی مشخصه ولتاژ گیت و جریان کانال نانو ترانزیستور گرافاین گاما برای ولتاژ درین ۰.۵ ولت

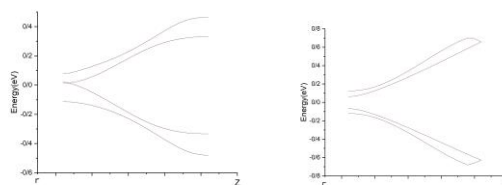
که از این شکل مشخص می شود با افزایش ولتاژ درین جریان افزایش می یابد و نتایج بدست آمده از ترانزیستور گرافانی بهتر شده است و جریان از مرتبه میکروآمپر می باشد [۷]. در شکل (۹) و شکل (۱۰) تغییرات ولتاژ گیت و جریان کانال برای مقادیر مختلف ولتاژ درین بررسی شده است که با افزایش ولتاژ گیت، افزایش پیوسته ای برای جریان ترانزیستور خواهیم داشت و با بیشتر شدن ولتاژ درین-سورس نیز به ازای هر ولتاژ گیت جریان خروجی بیشتری پیش بینی می شود.

باتوجه به منحنی مشخصه شکل (۸) و با استفاده از فرمول $r_o = \frac{\partial v_{DS}}{\partial I_{DS}}$ مقادیر r_o طبق جدول (۱) بدست آمد.



شکل (۶): الف ساختار نواری الکترونی برای نانو نوار دسته مبلی با عرض W_a

_ ب چگالی حالت های الکترونی برای نانو نوار دسته مبلی با عرض W_a



شکل (۷): الف ساختار نواری الکترونی برای نانو نوار زیگزاگ با دوبرابر عرض W_z _ ب چگالی حالت های الکترونی برای نانو نوار دسته مبلی با دوبرابر عرض W_a

<https://docs.quantumwise.com/v2017/manuals/ATKDFTHtml> (accessed on 14 October 2019).

- [9] Qimin. Yan, et al. "Intrinsic current-voltage characteristics of graphene nanoribbon transistors and effect of edge doping", Nano letters 7.6 (2007): 1469-1473.
- [10] Boyi. Zhang, et al. "A graphyne spoked wheel", Chem 8.10 (2022): 2831-2842.
- [11] Manaswee. Barua, Aditi Saraswat, and C. N. R. Rao. "A novel method for synthesis of γ -graphyne and their charge transfer properties", Carbon 200 (2022): 247-252.
- [12] Wen. Ding, et al. "Ultrasound-promoted synthesis of γ -graphyne for supercapacitor and photoelectrochemical applications", Ultrasonics Sonochemistry 61 (2020): 104850.
- [13] Hu, Yiming, et al. "Synthesis of γ -graphyne using dynamic covalent chemistry", Nature Synthesis (2022): 1-6.
- [14] M. Moradinassab, M. A. Fathipour, "Compact Model for Current-Voltage in Doped Carbon Nanotube Field Effect Transistors", Journal of Iranian Association of Electrical and Electronics Engineers 2011; 8 (2): 69-74
- [15] A. Naderi, M. ghodrati, "Novel Carbon Nanotube Field Effect Transistor with Lightly Doped channel and Dual Section Dielectric", Journal of Iranian Association of Electrical and Electronics Engineers 2018; 15 (2): 9-16.

جدول (۱): مقادیر مقاومت خروجی برحسب ولتاژ گیت-سورس

V_{GS}	0.1	0.2	0.3
r_o	69.62k	540.83k	416.66k

۴- نتیجه گیری

در این پژوهش ویژگی‌های الکترونیکی نانو نوارهای گرافاین گاما با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی بررسی شده و شبیه‌سازی نانو ترانزیستور با استفاده از آن‌ها و به کمک تابع گرین غیر تعادلی ارائه گردید. نتایج نشان دهنده نیمه هادی بودن نانو نوارهای دسته مبلی و شبه فلز بودن نانو نوارهای زیگزگ است. همچنین با افزایش عرض نوری گاف انرژی کاهش می‌یابد. از نانو نوار دسته مبلی با کمترین عرض و با طول سه برابر سلول واحد به عنوان کانال نانو ترانزیستور و جهت اتصال الکترودها از نانو نوار زیگزگ استفاده شد. منحنی‌های مشخصه ولتاژ-جریان مشابه حالت گرافن است به گونه‌ای که با افزایش ولتاژ گیت و یا درین-سورس جریان نانو ترانزیستور افزایش پیوسته‌ای خواهد داشت. با توجه به خواص ویژه گرافاین گاما مانند تحرک پذیری بالا ($104-105 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)، قابلیت انعطاف‌پذیری استثنایی، رسانایی حرارتی پایین، انتقال بار بهتر در مقایسه با گرافن تک لایه، این نانو ترانزیستور مورد توجه می‌باشد. محدوده جریان نانو ترانزیستور گرافاین گاما در مقایسه با گرافن بسیار بهتر بدست آمد و کنترل پذیری جریان از ولتاژ گیت بخوبی انجام می‌شود.

مرجع‌ها

- [1] A. Ivanovskii, "Graphynes and graphdynes", Progress in Solid State Chemistry, Vol.41, pp. 1, 2013.
- [2] R. Baughman; H. Eckhardt, and M. Kertesz; "Structure- property predictions for new planar forms of carbon: Layered phases containing sp² and sp atoms"; The Journal of chemical physics 87, No. 11 (1987) 6687-6699.
- [3] H. Jafarzadeh, S. Zahedi, A. M Bayani; "Electronic and Optical properties of 14, 14, 18 Graphyne as an anti-visible ray coating"; Optik (2019) 163905.
- [4] H. Jafarzadeh; M.R. Roknabadi; N. Shahtahmasebi and M. Behdani; "Electronic properties of α -graphyne nanoribbons under the electric field effect"; Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 67, (2015) 54-58.
- [5] H. Jafarzadeh, and M. Ghodrati; "Investigation of Electronic and Optical Properties of Zigzag α -Graphyne Nanotubes by Using a Tight-Binding Method"; Journal of Electronic Materials 48, No. 7
- [6] W. Yin, Y. Xie, L. Liu, R. Wang, X. Wei, L. Lau, J. Zhong and Y. Chen, "R-graphyne: a new two-dimensional carbon allotrope with versatile Dirac-like point in nanoribbons", J. Mater. Chem. A., Vol. 17, No. 1, pp. 5341-5346, 2013.
- [7] Muhammad Haroon. Rashid, Ants Koel, and Toomas Rang. "Simulations of graphene nanoribbon field effect transistor for the detection of propane and butane gases: A first principles study", Nanomaterials 10.1 (2020): 98.
- [8] QuantumWise User Manual, ATK-DFT Calculator. Available online: