

Comparison of electron transport in Graphyne ring and benzene using tight-binding model and density functional theory

Mohammad Qasemnazhand*, Farhad Khoeini*, Elham Mirzaii

Department of Physics, University of Zanjan, P.O. Box 45195-313, Zanjan, Iran

Received: 12.9.2020 Final revised: 30.07.2023 Accepted: 09.10.2023

Doi: [10.22055/jrmbms.2024.18894](https://doi.org/10.22055/jrmbms.2024.18894)

Abstract

In this paper, we study the electrical conductance of a molecular bridge consisting of a graphyne ring with the chemical formula $C_{18}H_6$ connected to two cumulene electrodes using the tight-binding model. We then compare its conductance to a similar system in which the graphyne ring has been replaced by a benzene molecule. To do this, we first obtain the structural characteristics of the studied rings using density functional theory, and then use the method of matching levels, to obtain the tight-binding parameters, i.e., the on-site and hopping energies for the benzene and graphyne rings. Using these parameters, we study the electrical conductance for these two molecules, the benzene and the graphyne rings. We conclude that when these two molecules are in the same position between two cumulene electrodes, they exhibit the same electrical properties. However, in the graphyne ring, a phase transition from metal to semiconductor or vice versa can be created with less energy than in a benzene ring.

Keywords: Tight-Binding Model, Graphyne, Benzene, Density Functional Theory, Cumulene.

* Corresponding authors: khoeini@znu.ac.ir, nazhand@znu.ac.ir

مقایسه ترابرد الکترونی حلقه گرافینی با مولکول بنزن با استفاده از مدل

تنگ‌بست و نظریه تابعی چگالی

محمد قاسم‌نزند^{*}، فرهاد خوئینی^{*}، الهام میرزایی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران

دریافت: ۱۳۹۹/۰۶/۲۲ ویرایش نهائی: ۱۴۰۲/۰۵/۰۸ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۷/۱۷

Doi: [10.22055/jrmbbs.2024.18894](https://doi.org/10.22055/jrmbbs.2024.18894)

چکیده

در این مقاله، ما رسانش الکتریکی یک پل مولکولی متشکل از یک حلقه گرافینی با فرمول شیمیایی $C_{18}H_6$ متصل به دو الکتروند از جنس کومولن را با استفاده از مدل تنگ‌بست بررسی می‌کنیم. سپس رسانش آن را با سیستمی مشابه که در آن حلقه گرافینی با مولکول بنزن با فرمول شیمیایی C_6H_6 جایگزین شده است، مورد مقایسه قرار می‌دهیم. برای این کار نخست مشخصات ساختاری حلقه‌های مورد بررسی را با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی به دست آورده و سپس با استفاده از روش تطابق ترازوی پارامترهای تقریب تنگ‌بست یعنی انرژی جایگاهی و جهش را برای مولکول بنزن و حلقه گرافینی به دست می‌آوریم. با استفاده از این پارامترها رسانش الکتریکی را برای دو مولکول بنزن و حلقه گرافینی بررسی نموده و نتیجه می‌گیریم زمانی که این دو مولکول در موقعیت مشابه در بین دو الکتروند کومولنی واقع شود، ویژگی الکتریکی یکسانی بروز می‌دهند ولی با این وجود در حلقه گرافینی در مقایسه با حلقه بنزنی با انرژی کمتری می‌توان گذار فاز از فلز به نیم‌رسانا یا برعکس ایجاد کرد.

کلیدواژگان: مدل تنگ‌بست، گرافین، بنزن، نظریه تابعی چگالی، کومولن

مقدمه

اتم‌های کربن با هیبریداسیون sp^2 با یکدیگر پیوند برقرار می‌کنند [۱-۳]. نانوالکترونیک علمی است که در آن گرافین جایگاهی بدون رقیب دارد برای همین تلاش‌ها در این علم به سوی مهندسی این ساختار است. گرافین، یک ورقه از اتم‌های کربن است که در یک ساختار شش گوش با یکدیگر پیوند خورده‌اند. سرعت بالای حرکت الکترون در گرافین موجب می‌شود که این ساختار کربنی، انتخابی مناسب برای استفاده در ترانزیستورها باشد. ولی با این وجود، گرافین دارای گاف نواری صفر است که باعث می‌شود یک نیم‌فلز محسوب شود که در نتیجه نمی‌تواند قابل استفاده در فرآیند ساخت ترانزیستور

کربن در طبیعت به صورت‌های مختلفی دیده می‌شود. متداولترین شکل کربن در طبیعت آلوتروپ‌های الماس، گرافیت، کربن بی‌شکل^۱ و ... است، که همگی جامد هستند. در الماس هر اتم کربن با چهار اتم کربن دیگر پیوند دارد و هیبریداسیون اتم‌های کربن در این ساختار، به شکل sp^3 است. در گرافیت شش گوش‌های منتظم کربنی لایه‌هایی را ایجاد کرده‌اند که بر روی یکدیگر انباشته شده و هر لایه از طریق پیوندهای سست وان‌دروالس به لایه زیرین متصل است. به هر یک از لایه‌های گرافیت، گرافین^۲ گفته می‌شود که در آن

* نویسنده مسئول: khoeini@znu.ac.ir, nazhand@znu.ac.ir

¹ Amorphous carbon² Graphene

باشد [۴]. تلاش‌های بسیاری برای ایجاد گاف نواری در گرافین انجام گرفته است. برای این کار محققان از محدود سازی کوآتومی و عامل‌دار کردن سطح استفاده می‌کنند. از دیگر روش‌های مهندسی گاف نواری می‌توان به تغییر ساختار نیز اشاره کرد. ساختارهای دوبعدی کربنی جدیدی به نام گرافاین^۱ معرفی شده‌اند که دارای ویژگی‌های الکتریکی متفاوتی نسبت به گرافین هستند [۵]. در ساختار گرافاین پیوندهای سه‌گانه با هیبریداسیون sp نیز دیده می‌شود. پیش از این نشان داده شده است که گاف نواری با تغییر تعداد پیوندهای سه‌گانه قابل تنظیم است [۶].

گرافاین با وجود اینکه مسألهٔ گاف صفر را حل می‌کند ولی ساخت این مادهٔ دوبعدی تا به امروز عملی نشده است. به‌طور کلی ساخت و رشد ساختارهای دوبعدی یکی از مشکلات اساسی نانوالکترونیک است. استفاده از مولکول‌ها به‌جای نانوساختارها ایده‌ای مناسب برای حل مسائلی است که نانوالکترونیک با آن روبروست، که این باعث می‌شود شاخهٔ علمی جدیدی با نام نانوالکترونیک مولکولی مطرح شود.

علم نانوالکترونیک مولکولی با محدودیت وجود مصالح مناسب نانوساختاری مواجه نخواهد بود چرا که برای پیدا کردن مولکول مناسب انتخاب‌های بسیاری وجود دارد که قبلاً در علم شیمی مشخصات آنها بررسی شده و از طرف دیگر به‌طور آزمایشگاهی نیز تهیه شده‌است. فراتر از موارد مطرح شده، همان‌طور که علم الکترونیک براساس قانون مور^۲، برای ادامه نیاز داشت به سمت نانوالکترونیک حرکت کند؛ به‌همان دلیل علم نانوالکترونیک نیز باید به سمت نانوالکترونیک مولکولی حرکت کند.

ما در این تحقیق مولکول‌هایی که به ساختار گرافین و گرافاین مربوط می‌شوند را از نظر چگونگی ترابرد الکترونی مورد بررسی قرار داده‌ایم. مولکول‌های شش ضلعی حلقوی که خیلی سال‌ها قبل‌تر از گرافین و گرافاین شناخته شده بودند و حتی روش‌هایی برای ساختن نانوساختارها از این مولکول‌ها گزارش شده‌است [۷]. با این وجود پایداری مولکول‌ها و سامانه‌های ساختار یافتهٔ مورد نظر براساس سطح انرژی بهینه و فرکانس ارتعاشات زیر قرمز^۳ بررسی شده‌اند و برای این کار از روش شبیه‌سازی نظریهٔ تابعی چگالی استفاده شده است [۸-۱۳].

مسئلهٔ دیگری که می‌توان به آن اشاره کرد این مطلب است که همان‌طور مولکول‌هایی مثل بنزن^۴ در اثر تجمع می‌توانند قفس‌های مولکولی همچون خانوادهٔ فولرن‌ها را پدید آورند، تجمع مولکول‌های گرافاینی نیز می‌تواند قفس‌های مولکولی متمایز با خانوادهٔ فولرن‌ها تشکیل دهند که با قوانین آیوپاک می‌توان آنها را فولراین^۶ نامید.

همچنین در این پژوهش برای بررسی ترابرد الکترونی ساختارهای مورد نظر فرض می‌کنیم که ساختارهای مورد بررسی در بین دو الکتروند اتمی کربنی که از نظر الکترونی فلز محسوب می‌شوند قرار می‌گیرد سپس با مدل تنگ‌بست ترابرد الکترونی سامانهٔ ساختار یافته مورد قضاوت واقع می‌شود [۱۴].

روش محاسبات

در این تحقیق برای به‌دست آوردن ساختارهای مولکولی بهینه و بررسی پایداری آنها، از محاسبات نظریهٔ تابعی چگالی^۷ کمک گرفته شده است. برای این محاسبات، تابعی هیبریدی B3LYP همراه با توابع پایه

⁵ Fullerene

⁶ Fulleryne

⁷ Density functional theory (DFT)

¹ Graphyne

² Moore's Law

³ Infrared spectrum

⁴ Benzene

نشان می‌دهد. برای محاسبه تابع گرین از رابطه ۴ استفاده می‌کنیم [۱۹]:

$$G(E) = ((E + i\eta) - H_S - Q_L - Q_R)^{-1} \quad ۴$$

و در نهایت برای محاسبه ضریب عبور با استفاده از رابطه ۵ می‌توان نتیجه گرفت [۲۰]:

$$T_e(E) = \text{Trace}[(Q_L - Q_L^\dagger)G(E)(Q_R^\dagger - Q_R)G(E)^\dagger] \quad ۵$$

که رسانش با ضریب عبور به صورت رابطه ۶ با هم متناسب هستند [۲۱]:

$$G_e(E) = \frac{2e^2}{h} T_e(E) \quad ۶$$

در ادامه به توصیف ساختارهای مورد بررسی و الکترودهای به کار گرفته شده برای تشکیل پل مولکولی^۴ مورد نظر می‌پردازیم.

حلقه‌ها و زنجیر کربنی

حلقه‌هایی که در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفته است، در حقیقت کوچکترین واحدهای تکرار شونده دو ساختار گرافین و گرافین هستند که در شکل مولکول پایدار خود قرار گرفته‌اند. کوچکترین واحد تکرار شونده صفحه گرافینی با هیدروژن‌دار شدن، مولکول بنزن با فرمول شیمیایی C_6H_6 را تشکیل می‌دهد.

ما با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی نشان داده‌ایم که واحدهای صفحه گرافین نیز می‌تواند مولکول حلقوی $C_{18}H_6$ را تشکیل دهد. بدین صورت که ما با محاسبه فرکانس ارتعاشات اتم‌های حلقه گرافینی، مشاهده می‌کنیم که هیچ فرکانس منفی در

با لایه شکافته^۱ $6-31+G(d,p)$ استفاده شده است، و اجرای آن با استفاده از نرم افزار گوسین^۲ انجام شده است [۱۵-۱۸]. برای بررسی رسانش حلقه‌های مورد نظر، از روش تنگ‌بست با تقریب نزدیکترین همسایه‌ها به همراه تابع گرین استفاده شده است که برای هامیلتونی هر سیستمی با توجه به رابطه ۱ در مدل تنگ‌بست می‌توان نوشت [۱۹]:

$$H = \sum (\epsilon_n |n\rangle\langle n| + t_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1| + t_{n+1,n} |n+1\rangle\langle n|) \quad ۱$$

برای بررسی رسانش یک سامانه، آن را به صورت یک قطعه‌ای در نظر می‌گیریم که در میان دو الکتروود قرار دارد. هامیلتونی کل آن به صورت رابطه ۲ خلاصه می‌شود [۱۹]:

$$H = H_L + H_{LS} + H_S + H_{SR} + H_R \quad ۲$$

هامیلتونی کل از چپ به راست به ترتیب نشانگر هامیلتونی الکتروود سمت چپ (H_L)، هامیلتونی اتصال الکتروود چپ به قطعه (H_{LS})، هامیلتونی قطعه مورد بررسی (H_S)، هامیلتونی اتصال الکتروود راست به قطعه (H_{SR})، و در نهایت هامیلتونی الکتروود راست (H_R) را شامل می‌شود. در این تحقیق چون الکترودها به صورت سیم کربنی رسانا در نظر گرفته شده‌اند برای خود انرژی الکترودها از رابطه ۳ استفاده می‌کنیم [۲۰]:

$$Q_{L/R} = \frac{\beta^2}{\gamma} \left[\frac{E \pm eV}{2\gamma} - i \sqrt{1 - \left(\frac{E \pm eV}{2\gamma} \right)^2} \right] \quad ۳$$

که در رابطه تحلیلی بالا γ انرژی جهش^۳ بین اتم‌های الکترودها و β جفت‌شدگی قطعه با الکترودها را

³ Hopping

⁴ Molecular Bridge

¹ Split valence basis set

² Gaussian

$$t' = \left(\frac{a}{a'}\right)^2 t$$

۷

که در آن a و a' به ترتیب طول پیوندهای وابسته به انرژیهای پرش آن t و t' است. مبنایی که برای به دست آوردن انرژی جهش داریم، پیوندها و انرژی جهش در گرافین است که به ازای طول پیوند ۱٫۴۲ آنگسترومی انرژی جهش در حدود ۲٫۷- الکترون ولت است [۲۵].

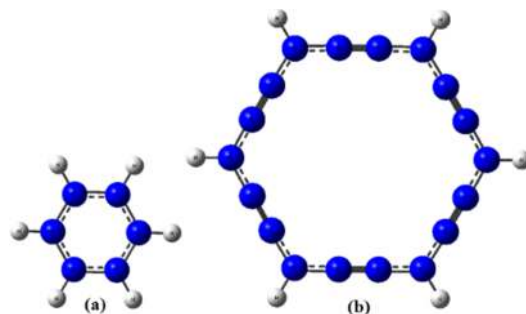
قانون هریسون برای زمانی قابل استفاده است که هیبریداسیون اوربیتالی بین اتمها فقط شامل اوربیتالهای s و p باشد. از آنجایی که اتمهای کربن در زنجیر کومولن با هیبریداسیون sp با یکدیگر برهم کنش دارند، برای همین انرژی جهش بین اتمهای کربن در الکترودهای کومولنی را با استفاده از قانون هریسون تقریب زده‌ایم.

قانون هریسون از نظر انرژی جهش بین پیوندهای سه‌گانه حلقهٔ گرافاینی و پیوندهای رزونانسی بنزنی تمایز زیادی قائل نمی‌شود، برای همین انرژی جهش در بین اتمهای حلقه‌ها را به روش دیگری به دست می‌آوریم. ما از روش تطبیق ترازهای انرژی مهم حاصل از روش تنگ‌بست با ترازهای به دست آمده از نظریهٔ تابعی چگالی استفاده می‌کنیم [۲۶]. یعنی ما به دنبال مقداری برای انرژی جهش هستیم که با ملاحظه کردن آن، سطح انرژی ترازهای هومو و لومو مدل تنگ‌بست با ترازهای به دست آمده از نظریهٔ تابعی چگالی یکی شوند.

بحث و بررسی نتایج

باتوجه به اینکه حلقه‌هایی که در ساختار دو بعدی قرار دارند وقتی از صفحه خارج می‌شوند و به صورت آزاد^۴ و مولکولی می‌شوند، طول پیوندها در آنها تغییر

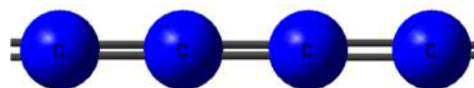
طیف زیر قرمز آن وجود ندارد [۲۲]. ساختار دو حلقهٔ مورد بررسی بنزنی و گرافاینی در شکل ۱ آمده است:



شکل ۱. ساختار دو مولکول حلقوی بنزن (a) با فرمول شیمیایی C_6H_6 و حلقهٔ گرافاینی (b) با فرمول شیمیایی $C_{18}H_6$.

به طور پیش فرض می‌دانیم که هیبریداسیون مولکولی اتمهای کربن در مولکول بنزن به صورت sp^2 است و کربن در صفحهٔ گرافاینی دارای دو نوع هیبریداسیون مولکولی sp و sp^2 است، یعنی دو نوع پیوند کربن-کربن در صفحهٔ گرافاین وجود دارد.

برای به دست آوردن رسانش الکتریکی، دو حلقهٔ مولکولی مورد نظر را در بین دو الکتروود از رشته‌های کربنی پلینی^۱ به نام کومولن^۲ قرار می‌دهیم [۲۳]. زنجیر کومولن از ساختارهای آلنی^۳ متوالی تشکیل شده است. به ترکیباتی که سه کربن با پیوندهای دوگانه پشت سر هم به یکدیگر متصل هستند آلن گفته می‌شود. مدل گلوله و میله برای زنجیر کومولنی در شکل ۲ آمده است.



شکل ۲. یک زنجیر کومولنی با ساختارهای آلنی متوالی.

در مدل تنگ‌بست هر چقدر اتمها از همدیگر فاصله بگیرند، پارامتر انرژی جهش متناظر آنها کمتر خواهد بود. با استفاده از قانون هریسون، تناسب انرژی پرش و طول پیوند با یکدیگر به صورت رابطهٔ ۷ است [۲۴]:

³ Allene

⁴ Freestanding

¹ Polyene

² Cumulene

$$\varepsilon = \frac{E_{LUMO} + E_{HOMO}}{2} \quad 10$$

رابطه ۱۰ نشان می‌دهد انرژی جایگاهی بیانی دیگر از پتانسیل شیمیایی (μ) است.

انرژی جهش الکترونی به‌طور ویژه برای بنزن و مولکول‌هایی که ساختاری شبیه به بنزن دارند از روش تطابق تراز [۲۹] استخراج می‌شود که معادل با سختی شیمیایی مولکول بنزن است [۳۰]:

$$t = \frac{E_{LUMO} - E_{HOMO}}{2} \quad 11$$

اما در حلقه گرافایی چون دو نوع پیوند وجود دارد پس برای همین دو انرژی جهش متناظر نیز وجود دارد. لازم به ذکر است که ما تناسب هریسون را برای انرژی جهش بین دو پیوند در پیش فرض تطابق تراز مربوط به حلقه گرافایی لحاظ کرده‌ایم. طول پیوند بین اتم‌های کربن حلقه‌های مورد بررسی، نوع هیبریداسیون‌های اوربیتالی و انرژی‌های جهش مربوطه، در جدول ۲ آمده‌است.

جدول ۲. مشخصات الکترونی حلقه‌های C_6H_6 و $C_{18}H_6$.

حلقه‌ها	طول پیوند	هیبریداسیون اوربیتالی	انرژی‌های جهش	
C_6H_6	۱,۴۰	sp^2	t	-۳,۳۰
$C_{18}H_6$	۱,۲۴	$sp^{1.86}$	t ₁	-۴,۱۵
	۱,۳۷	$sp^{0.97}$	t ₂	-۵,۰۷

محاسبات ما نشان می‌دهد طول پیوند اتم‌های کربن در زنجیر کومولنی حدود ۱,۳۰ آنگستروم است و طول پیوند محل اتصال اتم کربن حلقه بنزنی و گرافایی با اتم کربن الکترو کومولنی به ترتیب ۱,۳۷ و ۱,۳۵ آنگستروم است. پس براساس طول پیوندهای به دست آمده، انرژی جهش بر روی زنجیر کومولنی را نیز با

می‌کند، چرا که ساختارهای دو بعدی فقط از یک جهت فضا محدود هستند ولی برای مولکول‌ها محدودیت از سه جانب مطرح است. در نتیجه ما نمی‌توانیم از اطلاعات ساختاری موجود در مقالات مواد دوبعدی برای این حلقه‌های مولکولی نیز استفاده کنیم.

در این مقاله مشخصات الکترونی و ساختاری حلقه‌های مولکولی مورد بررسی را با روش نظریه تابعی چگالی به دست آورده‌ایم. در جدول ۱ مشخصات الکترونی همچون تراز هومو و لومو مربوط به دو حلقه C_6H_6 و $C_{18}H_6$ ، و گاف و انرژی فرمی متناظر آمده است.

جدول ۱. مشخصات الکترونی حلقه‌های بنزنی و گرافایی، که واحد مقادیر برحسب الکترون ولت است (eV).

حلقه‌ها	HOMO	LUMO	E _{Gap}	E _F
C_6H_6	-۷,۰۱	-۰,۴۲	۶,۵۹	-۳,۷۲
$C_{18}H_6$	-۵,۹۹	-۳,۰۹	۲,۹۰	-۴,۵۴

با استفاده از روابط ۸ و ۹ می‌توان گاف هومو-لومو و انرژی فرمی مربوط به هر یک از ساختارها را به دست آورد [۲۷]:

$$E_{Fermi} = \frac{E_{LUMO} + E_{HOMO}}{2} \quad 8$$

$$E_{Gap} = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad 9$$

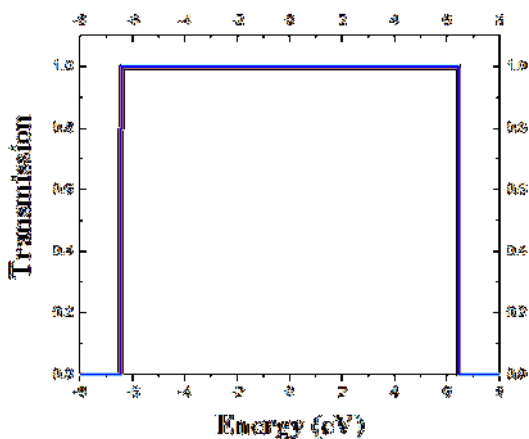
ما برای دو حلقه مورد بررسی هامیلتونی‌های قطعه را تشکیل دادیم و با استفاده از تطابق ویژه‌مقدارهای آن با ترازهای انرژی هومو و لومو به دست آمده از DFT، مقادیری برای انرژی جهش و جایگاهی^۱، به دست آوردیم به طوری که به کمک این دو مقدار می‌توان ترازهای هومو و لومو را باز تولید کرد. ما با تطابق ترازها نشان داده‌ایم که انرژی فرمی معادل انرژی جایگاهی سیستم‌های خالص است [۲۸]:

¹ On-site energy

لازم به یادآوری است که به فولرن‌هایی که با اتم‌های هیدروژن اشباع شده باشند فولرن گفته می‌شود، و به کوچکترین فولرن با ساختار **دودکاهدرن**^۲ یعنی دوازده وجهی منتظم **دودکاهدران** می‌گویند.

اگر احتمال ترابرد الکترون را برای زنجیر کومولنی به دست آوریم مشخص می‌شود اگر انرژی الکترونی در پنجره انرژی یا بازه $-6,44$ تا $+6,44$ الکترون‌ولت، قرار بگیرد احتمال عبور الکترون برابر واحد است.

اگر انرژی الکترونی بیشتر یا کمتر از انرژی بازه بالا باشد احتمال عبور برای چنین الکترونی صفر است. در نتیجه می‌توان گفت بر اساس روش تنگ‌بست فقط الکترون‌هایی از زنجیر کومولنی امکان ترابرد را دارند که انرژی آنها از دو برابر قدرمطلق انرژی جهش بین اتم‌های زنجیر کومولنی کمتر باشد. چرا که دو همسایهٔ نزدیک از اتم‌های کربن در زنجیر کومولنی در روند ترابرد دخیل هستند. نمودار شکل ۳ مربوط به ضریب عبور برای زنجیر کومولنی است.



شکل ۳. نمودار ضریب عبور الکترون از زنجیر کومولنی.

به‌خاطر شش ضلعی بودن حلقه‌های مورد بررسی، سه وضعیت اتصال الکترونها به حلقه را در نظر می‌گیریم، که در شکل ۴ طرحی از سه حالت ترسیم شده است.

رابطهٔ هریسون بر مبنای مقدار انرژی جهش در ساختار گرافین، حدود $3,22$ الکترون ولت برآورد می‌کنیم [۲۵].

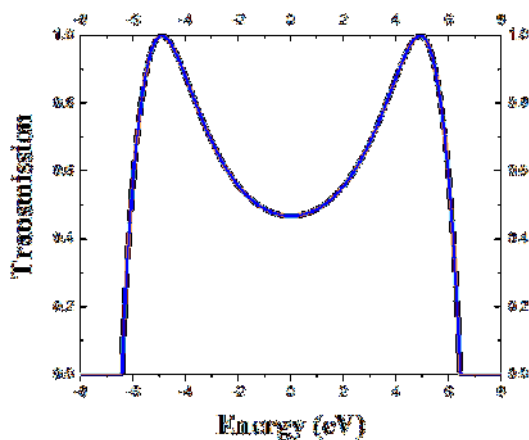
از آنجایی که قطعه و الکترونها هر دو پایهٔ کربنی هستند پس می‌توان انرژی جایگاهی اتم‌های کربن را برای همهٔ اجزا یکسان و برابر صفر در نظر گرفت. همچنین حضور هیدروژن را به صورت غیرمستقیم در سامانه‌های مورد بررسی خود در نظر می‌گیریم. بدین صورت که حضور هیدروژن نوع هیبریداسیون اوربیتالی تشکیل یافته در پیوند بین دو کربن را تغییر و تعیین می‌کند. در حلقه‌های کربنی، اگر اتم‌های کربن با هیچ اتم هیدروژنی برهم‌کنش نداشته باشند در این صورت اوربیتال‌های مولکولی پیرامون آنها از نوع sp خواهد بود و اگر هر کربنی با یک هیدروژن تشکیل پیوند دهد در این صورت اتم کربن متناظر در بین اوربیتال‌های مولکولی sp^2 قرار می‌گیرد و در نهایت اگر اتم کربن واقع شده در حلقه با دو هیدروژن پیوند داشته باشد در این صورت در اطراف آن اوربیتال‌های sp^3 شکل می‌گیرند.

به‌طور کلی تغییرات هیبریداسیون اوربیتالی در ساختارهای بدین شکل را می‌توان به صورت غیر مستقیم در مقدار انرژی جهش بین اتم‌های کربن بروز داد. یعنی چون حضور اتم هیدروژن نوع اوربیتال مولکولی بین اتم‌های کربن حلقه را تغییر می‌دهد پس طول پیوند بین اتم‌های کربن نیز تغییر می‌کند که در نتیجه، این تغییرات با مقدار انرژی جهش در ماتریس هامیلتونی لحاظ می‌شود. از این روش برای توصیف ترابرد الکترونی مربوط به ساختارهای پایه بنزن و فولرن‌هایی همچون دودکاهدران^۲، به کار گرفته شده است [۳۱-۳۳].

³ Dodecahedron

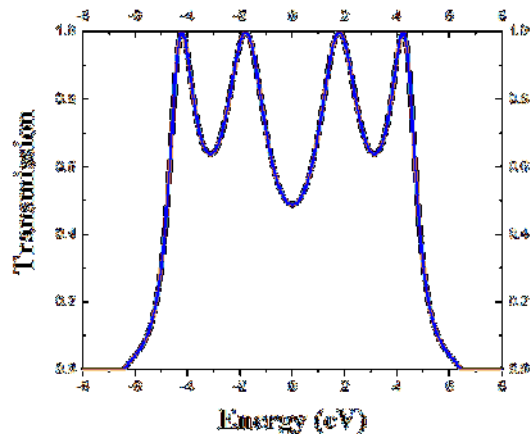
¹ Fullerane

² Dodecahedrane



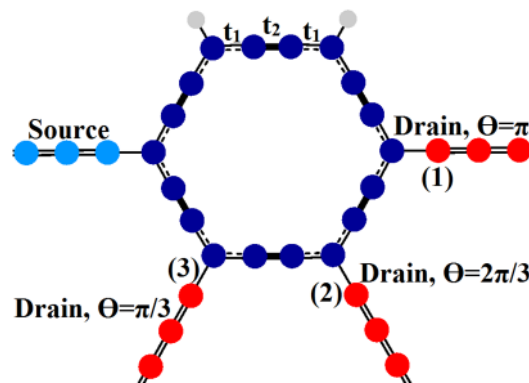
شکل ۵. نمودار احتمال عبور الکترون از پل مولکولی بنزنی در حالتی که الکترودها نسبت به هم زاویه 180° دارند.

رسانش الکترون در مولکول بنزن در وضعیت یاد شده الکترودها به صورت یک فلز است. چرا که در انرژی صفر احتمال عبور الکترون از مولکول غیر صفر است. در وضعیتی مشابه برای پل مولکولی گرافایینی نیز نمودار ضریب احتمال عبور الکترون در شکل ۶ آمده است.



شکل ۶. نمودار احتمال عبور الکترون از پل مولکولی گرافایینی در حالتی که الکترودها نسبت به هم زاویه 180° دارند.

احتمال عبور الکترون از حلقه گرافایینی نیز برای حالتی که یک الکترون هیچ انرژی اضافی ندارد صفر نیست



شکل ۴. طرح اتصال الکترودها به حلقه گرافاین در سه حالت.

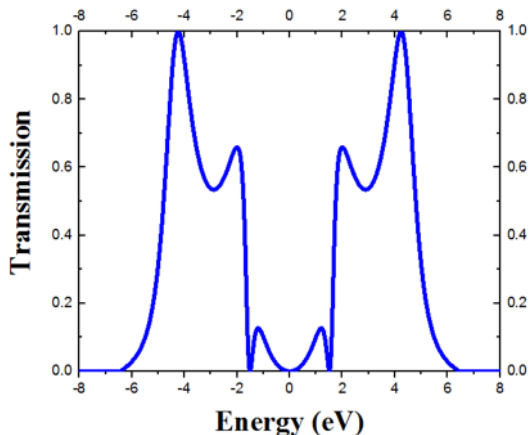
جایگاه الکترودها سمت چپ (Source) را ثابت در نظر می‌گیریم اما جایگاه الکترودها سمت راست (Drain) را در سه وضعیت تغییر می‌دهیم. حالت اول اینکه الکترودها نسبت به هم دورترین وضعیت ممکن را داشته باشند که در این صورت الکترودها نسبت به هم زاویه 180° درجه تشکیل می‌دهند. در حالت دوم الکترودها نسبت به هم زاویه 120° درجه می‌سازند. در نهایت برای حالت سوم، الکترودها نسبت به هم نزدیکترین حالت ممکن را دارند، که زاویه بین آنها 60° درجه است.

در ابتدا ضریب عبور را برای پل مولکولی بنزن در حالت اول بررسی می‌کنیم یعنی در حالتی که الکترودها چشمه^۱ و چاهک^۲ در دورترین حالت ممکن از یکدیگر قرار دارند و نسبت به هم زاویه 180° درجه تشکیل می‌دهند. نمودار شکل ۵ مربوط به ضریب عبور برای حلقه بنزنی در حالت اول است. انرژی فرمی الکترودها را برابر صفر در نظر می‌گیریم.

² Drain

¹ Source

در شکل ۷ الگوی ترابرد الکترونی مولکول بنزن را می‌بینید که الکترودهای چشمه و چاه نسبت به هم در موقعیت ۱۲۰ درجه قرار گرفته‌اند. همان‌طور که نمودار فوق نشان می‌دهد نمودار احتمال گذر الکترون در این حالت برای مولکول بنزن یک گاف انرژی نشان می‌دهد. یعنی پل مولکولی در این حالت به صورت یک نیم‌رسانا رفتار می‌کند. چرا که احتمال عبور الکترون از حلقهٔ بدون اعمال میدان یا ولتاژ خارجی، صفر است. نمودار شکل ۸ نیز احتمال رسانش حلقهٔ گرافایینی را در وضعیتی که الکترودهای پل مولکولی نسبت به هم زاویهٔ ۱۲۰ درجه تشکیل داده‌اند، نشان می‌دهد.



شکل ۸. نمودار ضریب احتمال عبور الکترون از پل مولکولی گرافایینی در حالتی که الکترودها نسبت به هم زاویهٔ ۱۲۰ دارند.

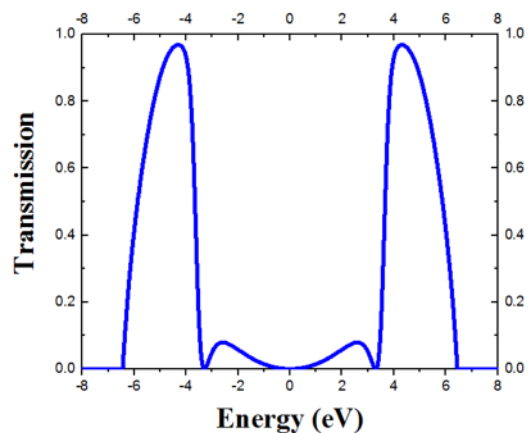
نمودار ضریب عبور نشان می‌دهد که حلقهٔ گرافایینی نیز در وضعیتی که الکترودهای چشمه و چاه نسبت به هم در وضعیت ۱۲۰ درجه قرار دارند یک پل مولکولی نیم‌رسانا محسوب می‌شود ولی با این تفاوت که نسبت به پل بنزنی، با انرژی کمتری می‌توان عبور الکترون را از این پل محتمل کرد.

نکته قابل توجه دیگری که با توجه به نمودارهای شکل ۷ و ۸ به نظر می‌رسد این است که الگوی نمودارهای ضریب عبور الکترون در حالت دوم، گاف هومو-لومو را نشان می‌دهد چرا که پهنای درهٔ نمودار ضریب عبور برای مولکول بنزن حدود ۶ الکترون ولت و برای حلقهٔ گرافایینی حدود ۳ الکترون ولت است.

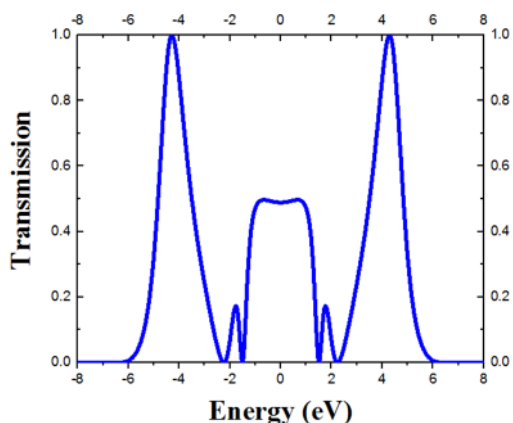
پس حلقهٔ گرافایینی نیز در حالت اول به صورت فلز عمل می‌کند.

دو نمودار مربوط به شکل‌های ۵ و ۶ نشان می‌دهند که حلقه‌های بنزنی و گرافایینی از تبهگنی بالایی برخوردارند چرا که تعداد قله‌های نمودارهای ضریب عبور کمتر از تعداد اتم‌های حلقه‌های مربوطه است. در نمودار حلقهٔ بنزنی به جای شش قله، دو قله مشاهده می‌شود و در نمودار حلقهٔ گرافایینی به جای هجده قله، چهار قله وجود دارد که این نشان می‌دهد که تبهگنی در حلقهٔ گرافایینی بیشتر از حلقهٔ بنزنی وجود دارد. همچنین قله‌های نمودار، نقاط تشدید و مربوط به ویژه‌مقادیر انرژی هامیلتونی حلقه می‌باشد. به زبان ساده در این نقاط تداخل سازنده بین امواج الکترونی رخ داده است اما دره‌های نمودار یا نقاط پاد تشدید، حاصل از تداخل ویرانگر بین امواج الکترونی عبوری از دو مسیر حلقه است.

با تغییر موقعیت الکترودها قابل انتظار است که الگوی رسانش حلقه‌ها نیز تغییر کند چرا که الکترودهای چشمه و چاه را اگر به عنوان نقطهٔ شروع و پایان حرکت الکترون در نظر بگیریم با تغییر موقعیت آنها اختلاف راه‌هایی پدید خواهد آمد که متناسب با آن تداخل‌های سازنده یا ویرانگری ایجاد خواهد شد.



شکل ۷. نمودار احتمال عبور الکترون از پل مولکولی بنزنی در حالتی که الکترودها نسبت به هم زاویهٔ ۱۲۰ دارند.

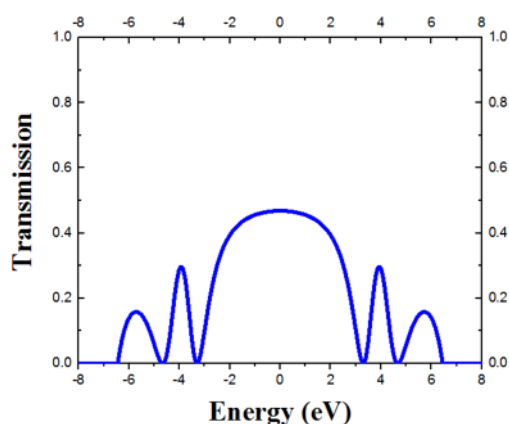


شکل ۱۰. نمودار احتمال عبور الکترون از پل مولکولی گرافاینی در حالتی که الکترودها نسبت به هم زاویه 60° دارند.

نمودار فوق نشان می‌دهد حلقه گرافاینی نیز در حالت زاویه بسته برای عبور الکترون به صورت فلز عمل می‌کند.

با توجه به نمودار ترابرد الکترونی حلقه‌های بنزنی و گرافاینی در حالتی که دو الکترودها به صورت 180° درجه به هم متصل می‌شوند می‌توان نتیجه گرفت که اختلاف راهی بین دو مسیر وجود ندارد. اما در حالت 120° درجه به اندازه دو ضلع شش ضلعی اختلاف راه برای حلقه بنزنی و گرافاینی وجود دارد که هر ضلع در بنزنی و گرافاینی به ترتیب حدود 1.4 و 4 آنگستروم است. همچنین در حالت 60° درجه نیز اختلاف راه به اندازه 4 ضلع می‌شود که در این وضعیت الگوی ترابرد الکترونی حلقه‌ها به حالت 180° درجه شبیه می‌شود. با در نظر گرفتن تداخل ویرانگر در حالت‌های 120° درجه برای حلقه بنزنی و گرافاینی می‌توان طول موج الکترون را در ترابرد الکترونی برای هر یک از مولکول‌های به‌طور حدودی محاسبه کرد. در اینجا حلقه‌های بنزنی و گرافاینی مانند تداخل سنج الکترونی رفتار می‌کنند. هنگامی که الکترون از الکترودها چشمه وارد حلقه می‌شود دو مسیر برای عبور از حلقه و ورود به الکترودها

وضعیت نهایی که می‌توان برای نحوه قرارگیری الکترودها با مولکول‌های حلقوی مورد بررسی قرار داد، موقعیتی است که الکترودها در نزدیکترین حالت ممکن نسبت به هم قرار دارند، یعنی حالتی که الکترودها نسبت به هم زاویه 60° درجه درست می‌کنند. در شکل ۹ نمودار ضریب عبور مربوط به این حالت برای مولکول بنزن آمده است.



شکل ۹. نمودار احتمال عبور الکترون از پل مولکولی گرافاینی در حالتی که الکترودها نسبت به هم زاویه 60° دارند.

با ملاحظه نمودار فوق می‌توان متوجه شد که اگر الکترودهای چشمه و چاه با زاویه 60° درجه به مولکول بنزن متصل شوند این پل به صورت یک فلز عمل می‌کند هر چند می‌توان با اعمال میدان یا ولتاژ خارجی مناسب مولکول را به وضعیت عایق تبدیل کرد.

در نهایت نمودار احتمال عبور الکترون برای حلقه گرافاینی برای وضعیت‌هایی که الکترودهای چشمه و چاه نسبت به هم زاویه 60° درجه را می‌سازند در شکل ۱۰ قابل ملاحظه است.

صفر خواهد شد. نمودارهای ضریب گذار الکترون برای پل مولکولی بنزنی و گرافایی هر چند رفتار یکسانی را در وضعیت مشابه الکترودها نشان می‌دهند، ولی همان‌طور که اشاره کردیم پل گرافایی این مزیت را دارد که با انرژی کمتری می‌تواند تغییر وضعیت دهد. علاوه بر این مسأله، برای بررسی بهتر می‌توانیم دو حلقه را از نظر ویژگی‌های الکترونی مقایسه کنیم. با استفاده از روابط زیر می‌توان با توجه به داده‌های جدول ۱ مشخصاتی همچون انرژی یونش، الکترون خواهی، سختی شیمیایی و الکترون دوستی را برای حلقهٔ بنزنی و گرافایی به دست آورد [۳۴-۳۶].

$$IP = -E_{HOMO} \quad 12$$

$$EA = -E_{LUMO} \quad 13$$

$$\eta = \frac{E_{LUMO} - E_{HOMO}}{2} \quad 14$$

$$\omega = \frac{(E_{LUMO} + E_{HOMO})^2}{2(E_{LUMO} - E_{HOMO})} \quad 15$$

با استفاده از داده‌های جدول ۳ می‌توان ویژگی‌های الکتروشیمیایی دو حلقهٔ بنزنی و گرافایی را باهم مقایسه کرد.

جدول ۳. مشخصات الکتروشیمیایی حلقه‌های بنزنی و گرافایی، که واحد مقادیر برحسب الکترون ولت است (eV).

حلقه‌ها	IP	EA	η	ω
C ₆ H ₆	۷,۰۱	۰,۴۲	۳,۳۰	۲,۱۰
C ₁₈ H ₆	۵,۹۹	۳,۰۹	۱,۴۵	۷,۱۱

با استفاده از داده‌های جدول فوق می‌توان نتیجه گرفت که حلقهٔ بنزنی به راحتی الکترون از دست نمی‌دهد و تمایل زیادی هم به گرفتن الکترون ندارد پس در نتیجه طبیعی است که سختی شیمیایی بالایی داشته باشد ولی حلقهٔ گرافایی در مقایسه با حلقهٔ بنزنی داد و ستد الکترونی را با انرژی کمتری انجام می‌دهد و الکترون-دوست تر است [۳۷-۳۹].

مشاهده می‌کند. این دو مسیر را می‌توان بازوهای بالا و پایین حلقه نامید. تداخل کوآنتومی بین امواج الکترونی عبوری از دو بازو به صورت تداخل سازنده و یا ویرانگر خواهد بود. تداخل سازنده سبب تشکیل قله‌های تشدید در طیف رسانش سامانه می‌شود. همچنین تداخل ویرانگر باعث تشکیل نقاط پاد تشدید در طیف عبور می‌شود. هندسهٔ پل مولکولی و نوع اتصال آن به الکترودها، تعیین کننده نوع تداخل و شرایط آن خواهد بود. به عبارت دیگر، الکترون‌ها خود را از طریق این حلقه‌ها از الکترودها چشمه به الکترودها چشمه می‌رسانند. از این رو، امواج الکترونی که در امتداد دو شاخه از حلقه منتشر می‌شوند، ممکن است به دلیل تداخل کوآنتومی بین مسیرهای مختلفی که الکترون می‌تواند طی کند، دچار تغییر فاز بین خود شوند چنین اثراتی منجر به تقویت (اختلاف فاز صفر) یا تضعیف دامنه احتمال (اختلاف فاز π) عبور می‌شود. دلیل فیزیکی را می‌توان با توجه به فرمول‌بندی انتگرال مسیر فاینمن توضیح داد. مطابق این انتگرال مسیر، الکترونی که از الکترودها چشمه به الکترودها چشمه می‌رود، تمام مسیرهای موجود و ممکن در حلقه را انتخاب می‌کند. در این سامانه دو الکترونی فقط دو مسیر برای عبور الکترون وجود دارد. الکترونی که در انرژی فرمی وارد حلقه می‌شود دارای بردار موج دوبروی $k_F = \frac{\pi}{2a}$ است. a طول پیوند اتمی در حلقهٔ بنزنی یعنی ۱,۴ آنگستروم است. اکنون اگر الکترودها با یکدیگر زاویهٔ ۱۲۰ درجه بسازند، طول مسیرهای بالا و پایین حلقه به ترتیب چهار برابر و دو برابر طول پیوندی خواهد بود و اختلاف فاز دو مسیر برابر $k_F \cdot 2a = \pi$ می‌شود بنابراین در انرژی فرمی صفر تداخل ویرانگر است و طیف عبور برابر

همچنین می‌توان نتیجه گرفت با وجود اینکه بنزن یکی از مولکول‌های مهم در حوزه نانوالکترونیک به‌شمار می‌رود ولی حلقه گرافایینی به‌علت داشتن الکترون دوستی بالاتر و انرژی تغییر فاز و یونش پایین‌تر نسبت به بنزن، می‌تواند رقیب و حتی جایگزین برای بنزن باشد.

مرجع‌ها

- [1] F. Marsusi, N.D. Drummond, M.J. Verstraete, The physics of single-side fluorination of graphene: DFT and DFT+U studies, *Carbon* 144 (2019) 615-627. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.12.089>
- [2] F. Marsusi, I.A. Fedorov, S. Gerivani, Graphene-induced band gap renormalization in polythiophene: a many-body perturbation study, *Journal of Physics: Condensed Matter* 30 (2017) 035002. doi: [10.1088/1361-648X/aa9e68](https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa9e68)
- [3] S.M. Monavari, F. Marsusi, Improvement of performance of electronic devices based on polythiophene using band gap engineering in the presence of graphene, *Journal of Research on Many-body Systems* 8 (2019) 182-198. [In Persian] doi: [10.22055/jrmbs.2018.13968](https://doi.org/10.22055/jrmbs.2018.13968)
- [4] F. Schwierz, Graphene transistors, *Nature nanotechnology* 5 (2010) 487. <https://doi.org/10.1038/nnano.2010.89>
- [5] S.W. Cranford, J.B. Markus, Mechanical properties of graphyne, *Carbon* 49 (2011) 4111-4121. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2011.05.024>

علت الکترون دوستی بیشتر حلقه گرافایینی را می‌توان به‌نسبت پایین تعداد اتم‌های هیدروژن به‌اتم‌های کربن آن در مقایسه با حلقه بنزنی دانست، پژوهش‌های اخیر ما نشان می‌دهد که وجود اتم‌های هیدروژن باعث جایگزیدگی الکترون^۱ در ساختارهای مولکولی می‌شود. پس نسبت پایین تعداد اتم‌های هیدروژن به اتم‌های کربن در گرافاین افزون بر الکترون دوستی بالای آن نسبت به بنزن، به تراپرد بالای الکترونی آن نیز می‌انجامد [۳۲-۳۳].

نکته قابل توجه دیگری که می‌توان در مورد حلقه‌های بنزنی و گرافایینی اشاره کرد این است که این حلقه‌ها در اثر اضافه شدن اتم‌هایی همچون بور یا نیتروژن، خوشه‌های مولکولی ساختار یافته‌ای پدید می‌آورند که در مواجهه با الکترون‌هایی با اسپین متفاوت، رفتار تراپردی متفاوتی از خود نشان می‌دهند. این ویژگی باعث می‌شود که این ساختارها در اسپینترونیک نیز مورد توجه واقع شوند [۲۸].

نتیجه‌گیری

در این تحقیق با استفاده از روش تطابق ترازی توانستیم برای مولکول بنزن و حلقه گرافایینی پارامترهای مطرح در تقریب تنگ‌بست یعنی انرژی جایگاهی و جهش را به‌دست آوریم. با محاسبه رسانش الکتریکی برای دو مولکول $C_{18}H_6$ و C_6H_6 مشخص کردیم که زمانی که این دو مولکول در موقعیت مشابه در بین دو الکتروود کومولنی قرار می‌گیرند ویژگی الکتریکی یکسانی را بروز می‌دهند ولی با وجود این در حلقه گرافایینی در مقایسه با حلقه بنزنی با انرژی کمتری می‌توان گذار فاز از فلز به نیم‌رسانا یا برعکس ایجاد کرد.

¹ Localized electron

- Quantum Chemistry 114 (2014) 725-730. <https://doi.org/10.1002/qua.24655>
- [13] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, F. Marsusi, Fullerene, fullerane and the fulleryne: A comparative thermodynamic study for a new member of the carbon cage family, Results in Physics 43 (2022) 106066. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2022.106066>
- [14] S. Datta, Quantum transport: atom to transistor, Cambridge university press, 2005. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139164313>
- [15] E.S. Khodaparast, M. Qasemnazhand, F. Marsusi, Theoretical investigation of using armchair and zigzag carbon nano rings for DNA sequencing based on density functional theory, Iranian Journal of Physics Research 22 (2023) 879-897. [In Persian] <https://doi.org/10.47176/ijpr.22.4.51450>
- [16] M. Qasemnazhand, F. Marsusi, Theoretical study of opto-electronic properties of silafulleranes using density functional theory, Journal of Research on Many-body Systems 7 (2017) 77-87. [In Persian] <https://doi.org/10.22055/jrmb.2017.13328>
- [17] F. Marsusi, M. Qasemnazhand, Sila-fulleranes: promising chemically active fullerene analogs, Nanotechnology 27 (2016) 275704. [doi: 10.1088/0957-4484/27/27/275704](https://doi.org/10.1088/0957-4484/27/27/275704)
- [18] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, F. Marsusi, Optical response of sila-fulleranes in interaction with glycoproteins for environmental monitoring, Frontiers in Physics 9 (2021) 691034.
- [6] K. Srinivasu, K.G. Swapan, Graphyne and graphdiyne: promising materials for nanoelectronics and energy storage applications, The Journal of Physical Chemistry C 116 (2012) 5951-5956. <https://doi.org/10.1021/jp212181h>
- [7] R.V. Salvatierra, V.H. Souza, C.F. Matos, M.M. Oliveira, A.J. Zarbin, Graphene chemically synthesized from benzene at liquid-liquid interfaces, Carbon 93 (2015) 924-932. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.06.016>
- [8] A.K. Srivastava, I. Anusiewicz, S. Velickovic, W.M. Sun, N. Misra, Atomic Clusters: Theory & Experiments, Frontiers in Chemistry 9 (2021) 795113. <https://doi.org/10.3389>
- [9] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, Theoretical study of structural and electronic properties of sila-dodecahedrane as an optical-chemical sensor by density functional theory method, Nanoscale 8 (2021) 32-41. [In Persian] <https://dorl.net/dor/20.1001.1.24235628.1400.8.4.4.9>
- [10] M. Ahmadi, A. Ghaemi, M. Qasemnazhand, Lithium hydroxide as a high capacity adsorbent for CO₂ capture: experimental, modeling and DFT simulation, Scientific Reports 13 (2023) 7150. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-34360-z>
- [11] S.M. Monavari, F. Marsusi, N. Memarian, M. Qasemnazhand, Biosensors based on carbon nanotubes and carbon nano-rings: A DFT study, (2022). <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-1863167/v1>
- [12] J. Li, H. Bai, N. Yuan, Y. Wu, Y. Ma, P. Xue, Y. Ji, Density functional theory studies of Si₃₆H₃₆ and C₃₆H₃₆ nanocages, International Journal of

- [25] M. Rostami chayjan, I. Ahmadi, F. Khoeini, Highly tunable charge transport in defective graphene nanoribbons under external local forces and constraints: A hybrid computational study, *Results in Physics* 20 (2021) 103770. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2020.103770>
- [26] E. Manousakis, Electronic structure of C60 within the tight-binding approximation, *Physical Review B* 44 (1991) 10991. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.44.10991>
- [27] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, F. Marsusi, Predicting the new carbon nanocages, fullerynes: a DFT study, *Scientific reports* 11 (2021) 2511. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-82142-2>
- [28] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, S. Shekarfroush, Electronic transport properties in the stable phase of a cumulene/B7/cumulene molecular bridge investigated using density functional theory and a tight-binding method, *New Journal of Chemistry* 43 (2019) 16515-16523. <https://doi.org/10.1039/C9NJ02860A>
- [29] S.M. Mirzaniyan, A.A. Shokri, Electronic transport in a molecular junction as XOR and OR gates, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 77 (2015) 146-150. <https://doi.org/10.1016/j.jpics.2014.10.011>
- [30] M.A. Khishki, M. Qasemnazhand, F. Marsusi, Graphene based molecular bio-nanosensors to identify the components of DNA, *Nanoscale* 10 (2023) 40-47. [In Persian] <https://doi.org/10.3389/fphy.2021.691034>
- [19] F. Khoeini, Analytical study of electronic quantum transport in carbon-based nanomaterials, *Diamond and related materials* 47 (2014) 7-14. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2014.05.001>
- [20] K. Walczak, The role of quantum interference in determining transport properties of molecular bridges, *Open Chemistry* 2 (2004) 524-533. <https://doi.org/10.2478/BF02476205>
- [21] K. Ghaderi, F. Khoeini, Theoretical study of electronic conductance in a quantum system with two chain model leads, *Journal of Research on Many-body Systems* 3 (2013) 29-39. [In Persian] <https://jrmb.scu.ac.ir/?action=articleInfo&article=10714&lang=en&lang=fa>
- [22] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, F. Marsusi, Photoluminescence in a Glucose-coated Sila-fullerane and Its Nanomedicine Applications. Preprint (2021). <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-152222/v1>
- [23] C.S. Casari, M. Tommasini, R.R. Tykwinski, A. Milani, Carbon-atom wires: 1-D systems with tunable properties, *Nanoscale* 8 (2016) 4414-4435. <https://doi.org/10.1039/C5NR06175J>
- [24] W.A. Harrison, *Electronic structure and the properties of solids: the physics of the chemical bond*, Courier Corporation, (2012). ISBN 981-238-707-2

- properties of (ZnO) n ($n \leq 4$) nanoclusters, Journal of Research on Many-body Systems 6 (2016) 11-20. [In Persian] <https://doi.org/10.22055/jrmb.2016.12472>
- [36] M. Nadafan, E. Talebian, M.T. Rahimi, J.Z. Anvari, Computational and theoretical study of electronic, spectroscopic and chemical properties of (ZnS) n ($n \leq 4$) nanoclusters, Journal of Research on Many-body Systems 10 (2020) 111-124. [In Persian] <https://doi.org/10.22055/jrmb.2020.15921>
- [37] H. Tavakol, D. Shahabi, DFT, QTAIM, and NBO study of adsorption of rare gases into and on the surface of sulfur-doped, single-wall carbon nanotubes. The Journal of Physical Chemistry C 119 (2015) 6502-6510. <https://doi.org/10.1021/jp510508y>
- [38] R.G. Parr, L.V. Szentpály, S. Liu, Electrophilicity index. Journal of the American Chemical Society 121 (1999) 1922-1924. <https://doi.org/10.1021/ja983494x>
- [39] S.M. Monavari, F. Marsusi, N. Memarian, M. Qasemnazhand, Carbon nanotubes and nanobelts as potential materials for biosensor, Scientific Reports 13 (2023) 3118. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-29862-9>
- <https://dorl.net/dor/20.1001.1.24235628.1402.10.1.6.7>
- [31] A. Shokri, S.M. Mirzarian, Transport engineering design of AND and NOR gates with a 1, 4-2-phenyl-dithiolate molecule, Journal of molecular modeling 21 (2015) 1-7. <https://doi.org/10.1007/s00894-014-2544-6>
- [32] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, M. Badakhshan, Tuning transport properties of deformed carbon nanocages by electric field, electrode material, and type of coupling, Materials Today Chemistry 28 (2023) 101383. <https://doi.org/10.1016/j.mtchem.2023.101383>
- [33] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, M. Badakhshan, Investigation of electron transport properties in fullerene and fullerane nanocages, Iranian Journal of Physics Research 21 (2021) 441-448. [In Persian] <https://doi.org/10.47176/ijpr.21.3.01146>
- [34] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, F. Marsusi, Fulleryne, a new member of the carbon cages family, arXiv preprint arXiv:2003.09835, (2020). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.09835>
- [35] R. Habibpour Gharacheh, R. Vaziri, Computational and theoretical study of electronic, spectroscopic and chemical