

B/N 掺杂类直角石墨烯纳米带器件引起的整流效应

陈鹰 胡慧芳 王晓伟 张照锦 程彩萍

Rectifying behaviors induced by B/N-doping in similar right triangle graphene devices

Chen Ying Hu Hui-Fang Wang Xiao-Wei Zhang Zhao-Jin Cheng Cai-Ping

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 196101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.196101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.196101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I19>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

虹彩环形结构氧化铝薄膜的制备与研究

Preparation and study of anodic alumina thin films with rainbow rings

物理学报.2015, 64(7): 076102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.076102>

水热法合成纳米花状二硫化钼及其微观结构表征

Synthesis and characterization of flower-like MoS<sub>2</sub> microspheres by hydrothermal method

物理学报.2015, 64(1): 016102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016102>

低聚壳聚糖几何结构和物理化学属性的理论研究

Theoretical study on geometry and physical and chemical properties of oligochitosan

物理学报.2014, 63(7): 076102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.076102>

丝素氨基酸寡肽链生长过程中的尺寸效应

Size effect of silk fibroin peptide chains in the growth process

物理学报.2013, 62(23): 236101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.236101>

B/N 掺杂对于石墨烯纳米片电子运输的影响

The electronic transport properties affected by B/N doping in graphene-based molecular devices

物理学报.2013, 62(18): 186102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.186102>

# B/N掺杂类直三角石墨烯纳米带器件引起的整流效应\*

陈鹰 胡慧芳<sup>†</sup> 王晓伟 张照锦 程彩萍

(湖南大学物理与微电子科学学院, 长沙 410082)

(湖南大学微纳光电器件及应用教育部重点实验室, 长沙 410082)

(2015年3月21日收到; 2015年6月2日收到修改稿)

基于密度泛函理论结合非平衡格林函数的方法, 研究了硼(氮)非对称掺杂类直三角石墨烯纳米带器件的电子输运性能. 计算结果表明: 单个硼或氮原子取代类直三角石墨烯纳米带顶点的碳原子后, 增强了体系的电导能力, 并且出现了新颖的整流效应. 分析表明: 这是由于硼氮掺杂类直三角石墨烯纳米带器件在正负偏压下分子能级的移动方向和前线分子轨道空间分布的不对称而产生的. 最重要的是, 当左右类直三角石墨烯纳米带的顶端原子同时被硼和氮掺杂后, 体系的整流效应显著增强, 而且出现负微分电阻效应.

**关键词:** 分子器件, 整流效应, 输运特性, 非平衡格林函数方法

**PACS:** 61.46.-W, 61.48.De, 64.70.Nd

**DOI:** 10.7498/aps.64.196101

## 1 引言

近年来, 随着硅基电子器件的逐步微型化和微电子技术的迅速发展, 分子器件已经成为未来电子器件发展的重要研究对象. 分子器件的发展引起了众多领域研究者的广泛关注. 已经有很多的实验和理论研究表明使用单分子构建成一个电子器件的方法完全可实现电子器件的一些基本功能, 例如, 整流效应、负微分电阻、以及逻辑开关等<sup>[1-3]</sup>. 早在1974年, Aviram和Rather就首次提出了基于施主(Donor)和受主(Acceptor)(D-A)有机分子的分子整流器概念<sup>[4]</sup>. 逻辑电路中的二极管被称之为A-R二极管或D-A分子整流器. 受到他们的启发, 越来越多的研究组致力于分子整流器的研究. 然而, 关于分子器件的整流效率却一直不能得到实质性的提高. 例如, Taylor和Srokbro课题组在理论上证实了单个D-A分子整流器仅仅表现出一个极其微小的整流比<sup>[5]</sup>. 而Ford和Stadler等也研究

了D-A分子整流器的整流行为并且发现整流系数也相当的小<sup>[6,7]</sup>. 同时Zhang等的理论研究表明D-A分子整流器有时会出现明显的反向整流效应, 并且这种整流现象已经被Segalman等在实验上得以证实<sup>[8]</sup>. 这也就意味着单个D-A分子是不能实现A-R二极管的整流机理并且也不可能出现强烈的整流效应. 所以对于分子整流器的研究就很有必要拓展到其他材料领域, 来实现高性能的纳米级分子整流器.

石墨烯的出现为纳米电子器件的发展带来了新的契机. 越来越多的理论和实验研究表明有多种多样的方法可以打开石墨烯的能带使它功能化, 如掺杂<sup>[9,10]</sup>、缺陷<sup>[11]</sup>、边缘修复<sup>[12]</sup>、杂化连接<sup>[13]</sup>、吸附分子或官能团<sup>[14]</sup>以及几何裁剪<sup>[15]</sup>等. 近几年研究表明, 通过现代的光刻技术可以将石墨烯纳米带构建成分子器件<sup>[16-21]</sup>, 而且可以实现高精度的选择性裁剪石墨烯纳米带<sup>[17]</sup>. 到目前为止, 很多分子整流器被报道出来并分析了可能形成的机理<sup>[19-24]</sup>. 一些文献也报道了关于石墨烯可功能化

\* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CB932700)资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: guf68@hnu.edu.cn

调节能带而表现出整流行为。例如, 石墨烯异质结的整流行为, 闸控 Z 型石墨烯纳米带分子结整流器件和 N 掺杂石墨烯纳米带整流器件<sup>[25-28]</sup>。N 掺杂使锯齿 (zigzag) 型石墨烯的能带结构出现能隙, 使材料从金属型转变为半导体型<sup>[29]</sup>; Zhang 等对三角形 (zigzag) 型石墨烯进行 B-N 共掺杂后, 石墨烯的电子输运性能显示出整流特性<sup>[30,31]</sup>。由于三角形结构的特殊性, 通常主要是以正三角形结构为研究对象。然而, 对于具有双类型边缘结构 (类似于直角三角形) 的石墨烯纳米带器件的研究报道还很少, 这些研究是不全面的, 所以我们有必要对类直角三角形结构的石墨烯纳米带进行性能研究, 而且石墨烯纳米带器件整流效应的机理需要被广泛而深入的探讨。

本文采用基于第一性原理的密度泛函理论结合非平衡格林函数的方法以类直三角石墨烯纳米带为研究对象, 以锯齿型石墨烯作为电极, 分别进行 B(N) 掺杂和 BN 共掺杂的研究, 主要研究掺杂对类直三角石墨烯纳米带器件的输运性能的影响以及掺杂对类直三角石墨烯纳米带器件整流行为的影响。

## 2 理论模型以及计算方法

本文以类直三角石墨烯纳米带为研究对象, 通过对锯齿 (zigzag) 型边缘的石墨烯纳米条带进行裁剪, 裁剪成由两个顶点格点碳原子连接起来的两个类直角三角形结构 (图 1 所示), 所裁剪成的类直角三角形结构是同时具有扶手 (armchair) 型边缘和锯齿 (zigzag) 型边缘的特殊结构, 边缘均用氢钝化。为了探究不同的原子 B 或 N 顶点掺杂对类直三角石墨烯纳米带异质结电子输运性能的影响, 我们考虑了以下模型, 分别为 M1 器件结构是没有进行 B(N) 掺杂的理想体系, 作为对比模型, M2 器件结构是在格点 1 进行 B 原子取代掺杂, M3 器件结构是在格点 1 进行 N 原子取代掺杂, M4 器件结构则为在格点 1 和 2 分别用 N 和 B 原子取代共掺杂。整个体系包括三个部分, 即左电极、右电极以及中心散射区域, 中心散射区域由双类直三角石墨烯纳米带组成。为了构建分子器件, 首先我们对中心散射区的类直三角纳米带分子异质结进行结构优化。通过基于密度泛函理论的 SIESTA 软件包来实现, 其中采用 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 模式

下的广义梯度近似的交换关联势能。体系的截断能选取 2040 eV。采用 Double Zeta Polarized (DZP) 的原子轨道基组。所有体系的结合结构优化均达到的收敛条件为原子受力小于 0.05 eV/Å, 体系总能小于 10<sup>-5</sup> eV。电子输运性能的计算基于非平衡格林函数的方法, 通过 ATK 软件包实现。为了确保体系在计算中的效率和精度, 我们选用 Single Zeta Polarized (SZP) 基组。在电子传输方向设定 K 点为 100, 石墨烯纳米带的准一维特性决定了垂直传输方向的 K 点设为 1。交换关联势采用局域密度近似, 构建分子器件后通过中心散射区电流大小由朗道公式 (Laudauer) 求出:

$$I(V_b) = \frac{2e}{h} \int_{\mu_L(V_b)}^{\mu_R(V_b)} T(E, V_b) dE, \quad (1)$$

其中,  $\mu_L(V_b)$  与  $\mu_R(V_b)$  分别为外加偏压  $V_b$  下左右电极的化学势,  $T(E, V_b)$  为体系的透射系数函数关系, 可由下式求得:

$$T(E, V_b) = \text{Tr}[I_L G^R I_R G^A], \quad (2)$$

其中  $G^R$  和  $G^A$  分别为散射区的延迟格林函数和超前格林函数,  $I_{l(r)}$  是左 (右) 电极的展宽。

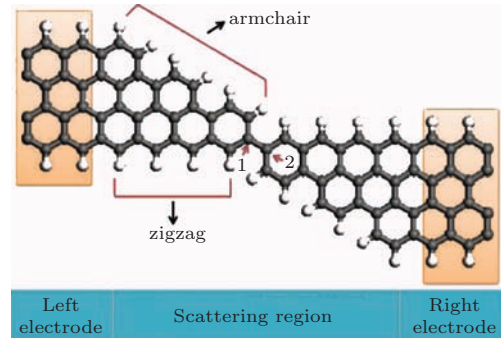


图 1 (网刊彩色) 类直三角石墨烯纳米带器件的结构示意图

Fig. 1. (color online) Structure of similar right triangle graphene devices.

## 3 计算结果及分析

如图 2 所示, 我们首先对 M1, M2, M3 和 M4 器件的电流-电压 ( $I-V$ ) 特性进行了研究, 其中电压的范围选择  $[-1.5 \text{ V}, 1.5 \text{ V}]$ , 每隔 0.1V 取点。从图中可以看出, 未掺杂的理想结构 M1 器件的电流非常小, 随着电压的增大电流值基本不变。对于格点 1 位置分别进行 B 和 N 原子掺杂所形成的 M2 和 M3 器件结构, 以及格点 1, 2 分别进行 N 和 B 原子共掺杂所形成的 M4 器件结构与 M1 器件结构相比较,

掺杂后的三种器件结构体系的  $I-V$  曲线有明显的变化, 它们的电导能力都明显的增强. 这说明了 B(N) 原子对类直三角石墨烯纳米带的掺杂可以增强器件的传导能力. 而且这三种体系的  $I-V$  曲线显示出左右不对称行为, 这就表现出了明显的整流行为. M2 器件在正偏压下的电流非常小, 电导能力处于截止状态, 随着电压的增大电流基本保存不变, 而在负偏压下, 电流随着偏压的增大而线性增大, 表现出正向截止逆向导通的特性. M3 器件在正负偏压下电流都随偏压的增大而增大, 正偏压下的电流比负偏压的电流大. 相对而言, M4 器件在负偏压下的电流非常小, 而且在低偏压范围内出现明显的负微分电阻效应, 处于逆向截止的情况, 而正负偏压下, 电流随着偏压的增大而线性增大, 表现出逆向截止正向导通的特性. 比较模型掺杂前后的电子输运情况, 发现 B(N) 掺杂后对体系的输运性能加强了, 主要是掺杂了 B(N) 原子后改变了分子器件的电子结构, 增加了分子器件中的载流子. 这意味着不同原子的掺杂对类直三角石墨烯纳米带器件的电子输运特性有明显的影

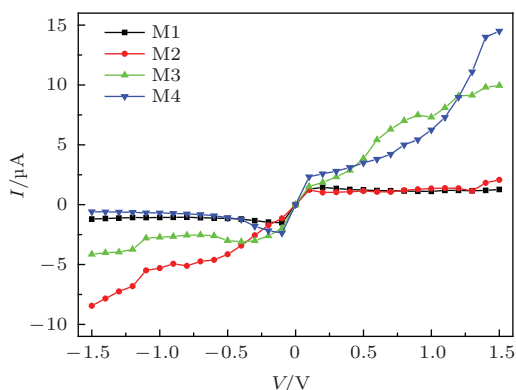


图2 (网刊彩色) 四个模型的  $I-V$  特性曲线  
Fig. 2. (color online)  $I-V$  characteristic curves for the four models.

为了描述 B/N 掺杂类直三角石墨烯纳米带器件的电子输运特性的非对称性, 我们计算了掺杂后的三个模型分别在  $[0.1 \text{ V} - 1.5 \text{ V}]$  偏压范围下的整流比, 如图 3 所示. 我们知道器件的整流效应是由于器件在正负偏压下电流的不对称性造成的, 通常我们定义器件的整流比为正偏压下的电流值与负偏压下的电流绝对值的比率, 即整流比的定义为

$$R(V) = I(V)/|I(-V)|. \quad (3)$$

根据整流比的定义, 我们可以了解到当  $R(V) > 1$  时, 则说明分子器件发生正向整流行为, 当  $R(V) < 1$  时, 则对应发生反向整流. 有趣的是, 从图中可以看出: M2 器件表现出强烈的反向整流行为; M3 器件则表现出了正向整流行为, 只是 M3 器件的整流效应不是特别强烈. 相对而言, 共掺杂的 M4 器件则表现出了强烈的正向整流行为, 在  $V = 1.5 \text{ V}$  时, 整流比约为 25. M2, M3 和 M4 器件都表现出整流效应. 然而, 不同原子的掺杂所引起的整流效果有很大的区别, 这些结果表明器件的整流行为有方向的区别, 而且整流方向与掺杂的原子有关. 所以我们可以的出一个结论: 类直三角石墨烯纳米带器件可以通过掺杂杂质原子来调控器件的整流比和整流方向.

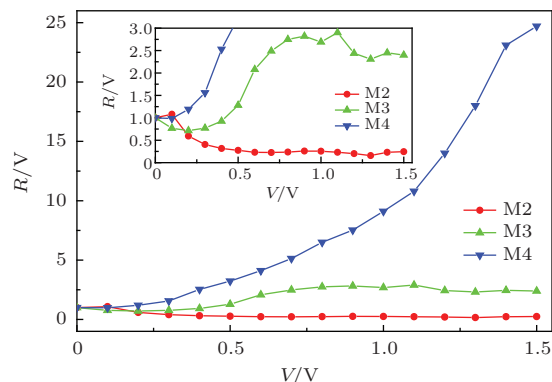


图3 (网刊彩色) 三个模型在不同偏压下的整流比  $R(V)$  变化  
Fig. 3. (color online) Rectifying ratio  $R(V)$  changes with the applied biases for the three models.

为了更好的理解三种分子器件的电子输运性质, 我们给出了掺杂后的三个模型结构对应偏压下的输运系数谱线图  $T(E)$ , 如图 4 所示, 费米能级设定为零. 众所周知, 一些具有特定能量的电子从一边的电极通过中间散色区的分子器件进入另一电极而形成电流. 在分子前线轨道理论中, 低于费米能级的第一个隧穿峰为最高占据分子轨道 (HOMO-related) 相关的共振隧穿峰, 高于费米能级的第一个隧穿峰为最低未占据分子轨道 (LUMO-related) 相关的共振峰. 根据 Landauer 公式, 电流的大小由透射曲线与能量区间 (偏压窗) 围成的面积大小来决定. 从图 4 可以看出, M2 器件在负偏压下, 与 HOMO 和 LUMO 相关的共振隧穿峰进入了偏压窗, 而在正偏压下, 分子能级的移动使得与 HOMO 和 LUMO 相关的共振隧穿峰未进入了偏压窗, 所以负偏压窗口内的透射系数明显大于



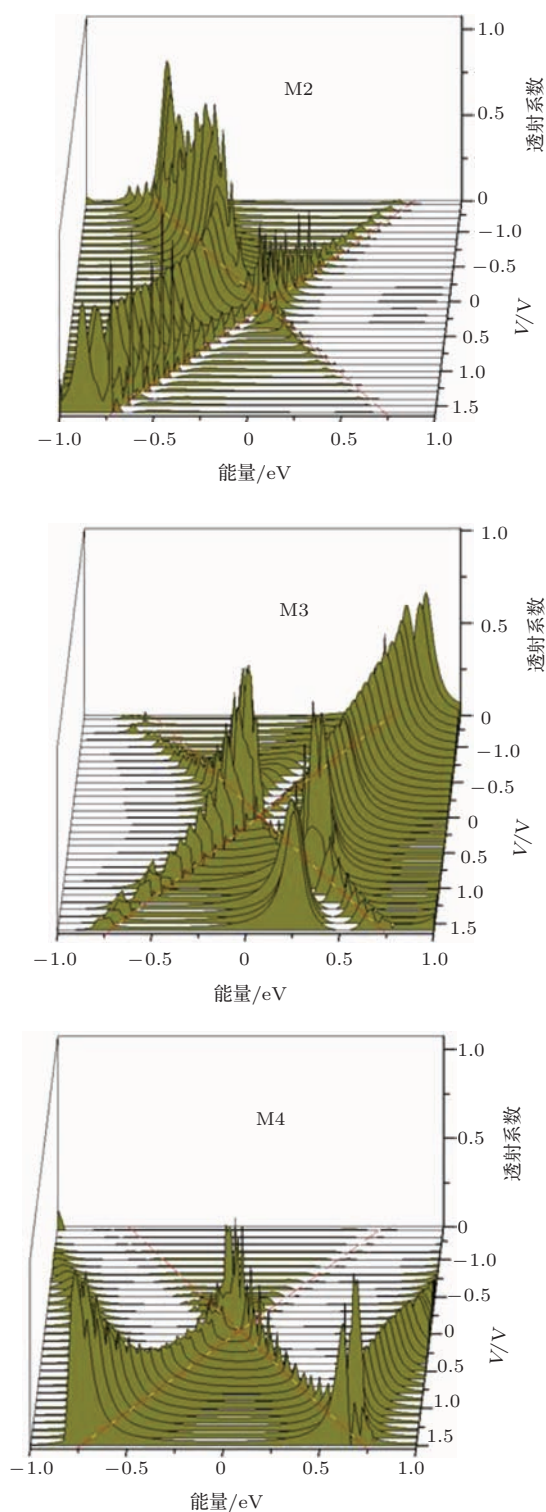


图4 (网刊彩色) 三个模型不同偏压下的透射谱  
 Fig. 4. (color online) The transmission spectra of three models at various biases.

正偏压窗口内的透射系数, 那么相应的负偏压下的积分面积大于正偏压下的积分面积, 这就说明M2器件在负偏压下的电流值大于正偏压下的电流值, 导致了整流系数  $R(V)$  小于1, 所以出现了反向整流行为. 在不同的正偏压下, 偏压窗内的透射系数

处于截止状态, 因此M2器件在正偏压下的电流非常小, 不随偏压的增大而线性增大. M3器件在负偏压下, 与HOMO相关的共振隧穿峰进入了偏压窗, 输运通道以HOMO轨道为主; 而在正偏压下, 与LUMO相关的共振隧穿峰进入偏压窗, 输运通道以LUMO轨道为主. 然而在正偏压窗内的透射系数大于负偏压窗内的透射系数, 所以正偏压下的电流值大于负偏压下的电流值, 导致了整流系数  $R(V) > 1$ , 出现正向整流行为. 而对于M4器件在负偏压下, 低偏压时, 与HOMO和LUMO相关的共振隧穿峰进入了偏压窗, 所以出现了一定的电流, 然而随着负偏压的增大, 与HOMO和LUMO相关的共振隧穿峰未进入偏压窗, 偏压窗内的透射系数处于截止状态, 所以电流值逐渐减小, 导致了负微分电阻效应的出现. 而在正偏压下, 与HOMO和LUMO相关的共振隧穿峰都进入了偏压窗, 出现强的透射谱, 所以正偏压下的电流值大于负偏压下的电流值, 导致了整流系数  $R(V) > 1$ , 出现强烈的正向整流行为. 分析表明: 正负偏压下分子能级的移动方向不对称导致了输运透射系数的不同而出现整流行为.

透射系数与分子能级轨道有关, 分子整流则与前线轨道的空间分布密切相关, 而对于分子体系的轨道分布, 可以从分子投影自洽哈密顿量 (MPSH) 的分布来进行分析. MPSH 是体系的自洽哈密顿在分子上的投影, 与自由分子的哈密顿相比, 它包含了左右电极对分子轨道的影响. 为了重点分析体系中分子器件的 HOMO 和 LUMO 轨道的空间分布, 本文计算得到了 MPSH 对应的轨道. 图5为平衡态下模型 M1—M4 的 HOMO 和 LUMO 轨道的空间分布 MPSH. 从图5中可以看出, 没掺杂的理想模型 M1 器件的 HOMO 和 LUMO 轨道都呈现均匀分布, 所以理想体系没有出现整流行为. 而掺杂之后的三个模型无论是 HOMO 还是 LUMO 轨道, 都表现出一定的局域性分布. 对于 M2 和 M4 器件, HOMO 态局域在右类直三角石墨烯纳米带上, 并且 LUMO 态完全局域在左类直三角石墨烯纳米带上, 这就意味着电子能够在 HOMO 能级与右电极, LUMO 能级与左电极之间较容易发生相互转移, 这是由于 HOMO(LUMO) 态和右(左)电极之间的能带简并和杂化而导致的. 而 M3 器件的 HOMO(LUMO) 轨道在左右类直三角石墨烯纳米带上均有分布; 这种分子轨道局域性的分布会使偏

压下的电流出现非对称性, 而出现整流效应. 由于模型 M3 器件的轨道局域化程度相对 M2, M4 器件要小一些, 所以 M3 器件结构的整流效果相对 M2 和 M4 器件差.

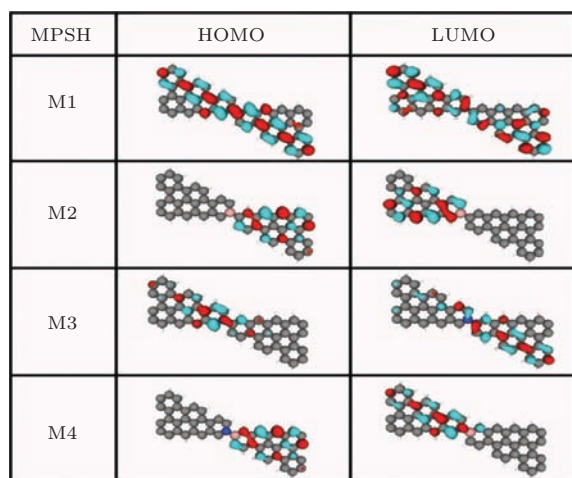


图5 (网刊彩色) 四个模型在 HOMO 和 LUMO 本征态上的 MPSH 分析

Fig. 5. (color online) MPSH analysis of HOMO and LUMO eigenstates for the four models.

## 4 结 论

本文基于密度泛函理论结合非平衡格林函数的方法, 研究了硼(氮)掺杂类直三角石墨烯纳米带器件的电子输运性能. 计算结果表明: 单个硼或氮原子取代类直三角石墨烯纳米带顶点的碳原子后, 增强了体系的电导能力, 并且出现了新颖的整流效应. 分析表明: 这是由于硼氮掺杂类直三角石墨烯纳米带器件在正负偏压下分子能级的移动方向和前线分子轨道空间分布的不对称而产生的. 最重要的是, 当左右类直三角石墨烯纳米带的顶端原子同时被硼和氮掺杂后, 体系的整流效应显著增强, 而且出现负微分电阻效应. 我们的研究对于认识掺杂类直三角石墨烯纳米带器件在整流性能上有积极意义.

## 参考文献

[1] Tsuji Y, Staykov A, Yoshizawa K 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 2575  
 [2] Wen S Z, Yang G C, Yan L K, Li H B, Su Z M 2013 *Chem. Phys. Chem.* **14** 610  
 [3] Zhao P, Liu D S, Zhang Y, Su Y, Liu H Y, Li S J, Chen G 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 7968

[4] Aviram A, A Ratner M 1974 *Chem. Phys. Lett.* **29** 277  
 [5] Stokbro K, Taylor J 2003 *J. Am. Chem. Soc.* **125** 3674  
 [6] Ford M J, Hoft R C, Mcdonagh A M, Cortie M B 2008 *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 374106  
 [7] Stadler R, Geskin V, Cornil J 2008 *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 374105  
 [8] Yee S K, Sun J, Darancet P, Tilley T D, Majumdar A, Neaton J B, Segalman R A 2011 *ACS Nano* **5** 9256  
 [9] Zheng X H, Wang R N, Song L L, Dai Z X, Wang X L, Zeng Z 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 123109  
 [10] Kang J, Wu F M, Li J B 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 083109  
 [11] Li J, Li Z Y, Zhou G, Liu Z R, Wu J, Gu B L, Ihm J, Duan W H 2010 *Phys. Rev. B* **82** 115410  
 [12] Li Z, Yang J, Hou J G 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 4224  
 [13] He J, Chen K Q, Fan Z Q, Tang L M, Hu W P 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 193305  
 [14] Zhang Z Q, Liu B, Hwang K C, Gao H J 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 121909  
 [15] Campos L C, Manfrinato V R, Yamagishi J D S, Kong J, Herrero P J 2009 *Nano Lett.* **9** 2600  
 [16] Beljakov I, Meded V, Symalla F, Fink K, Shallcross S, Wenzel W 2013 *J. Nanotechnol.* **4** 441  
 [17] Zeng H, Zhao J, Wei J W, Xu D H, Leburton J P 2012 *Curr. Appl. Phys.* **12** 1611  
 [18] Liu H M, B Wang H, Zhao J W, Kiguchi M 2013 *J. Comp. Chem.* **34** 360  
 [19] Zeng H, Zhao J, Wei J W, Zeng X L, Xu Y 2012 *Phys. Lett. A* **376** 3277  
 [20] Deng X Q, Zhang Z H, Tang G P, Fan Z Q, Qiu M, Guo C 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 063107  
 [21] Zeng J, Chen K Q, He J, Zhang X J, Sun C Q 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 25072  
 [22] Zhao P, Liu D S, Zhang Y, Su Y, Liu H Y, Li S J, Chen G 2012 *Solid State Commun.* **152** 1061  
 [23] Yan S L, Long M Q, Zhang X J, He J, Xu H, Chen K Q 2014 *Chem. Phys. Lett.* **608** 28  
 [24] Zhao P, Liu D S, Chen G 2013 *Solid State Commun.* **160** 13  
 [25] Zeng M G, Shen L, Yang M, Zhang C, Feng Y P 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 053101  
 [26] Pei T, Xu H, Zhang Z, Wang Z, Liu Y, Li Y, Wang S, Peng L M 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 113102  
 [27] Wang Z F, Li Q, Shi Q W, Wang X, Hou J G, Zheng H, Chen J 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 133119  
 [28] Zeng J, Chen K Q, He J, Fan Z Q, Zhang X J 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 124502  
 [29] Lin Q, Chen Y H, Wu J B, Kong Z M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 097103 (in Chinese) [林琦, 陈余行, 吴建宝, 孔宗敏 2011 物理学报 **60** 097103]  
 [30] Zhang Z H, Deng X Q, Tan X Q, Qiu M, Pan J B 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 183105  
 [31] Deng X Q, Tang G P, Guo C 2012 *Phys. Lett. A* **376** 1839

# Rectifying behaviors induced by B/N-doping in similar right triangle graphene devices\*

Chen Ying Hu Hui-Fang<sup>†</sup> Wang Xiao-Wei Zhang Zhao-Jin Cheng Cai-Ping

(College of Physics and Microelectronics Science, Hunan University, Changsha 410082, China)

(Key Laboratory for Micro-Nano Physics and Technology of Hunan Province, Changsha 410082, China)

( Received 21 March 2015; revised manuscript received 2 June 2015 )

## Abstract

By using nonequilibrium Green's functions in combination with the first principles density functional theory, for the similar right triangle graphene devices as the research object, we take the zigzag graphene as electrodes, to investigate the B(N) doping and B-N co-doping effect, i.e. mainly the influence of doping on the transport properties of similar right triangle graphene devices, as well as the asymmetric doping effect on the rectifying behaviors in similar right triangle graphene devices. Calculated results show that the system conductivity is increased when the vertex carbon atom of a similar right triangle graphene is substituted by a boron or nitrogen atom, and a novel rectifying effect appears. The rectification behavior can be observed because of an asymmetric movement on the molecular-level in B(N) doping in the similar right triangle graphene devices under positive and negative biases and the asymmetry in the spatial distribution of the frontier orbitals. Most importantly, when the vertex carbon atoms of the right and left similar right triangle graphenes are simultaneously doped with boron and nitrogen atoms, the rectifying effect of the system is significantly enhanced and appears also a negative differential resistance effect.

**Keywords:** molecular device, rectifying effect, transport properties, non-equilibrium Green's function method

**PACS:** 61.46.-W, 61.48.De, 64.70.Nd

**DOI:** [10.7498/aps.64.196101](https://doi.org/10.7498/aps.64.196101)

---

\* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2011CB932700).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [guf68@hnu.edu.cn](mailto:guf68@hnu.edu.cn)