مجلة جامعة طرطوس للبحوث والدراسات العلمية_ سلسلة العلوم الأساسية المجلد (١٠) العدد (٣) ٢٠٢٦

Tartous University Journal for Research and Scientific Studies –Basic Sciences Series Vol. (10) No. (3) 2026

معايرة فجوات الطاقة وتصنيف موجّه نحو النبائط لأنصاف نواقل ثنائية الأبعاد من أجل ترانزستورات التأثير الحقلي

أ.د. محمد فاهود *

أ.د. حسن سليمان **

خليل عسّاف ***

(تاريخ الإيداع ٢/٤/ ٢٠٢٦ – تاريخ النشر٦/٥/ ٢٠٢٦)

□ ملخّص □

تُقدم هذه الورقة نهجاً لاستقصاء أنصاف نواقل ثنائية البعد ملائمة لترانزستورات التأثير الحقلي عبر الجمع بين فلترة قاعدة البيانات، حسابات المبادئ الأولية، المُعايرة الإحصائية، الترتيب متعدد معايير، وتحليل اللايقينية. بالانطلاق من مجموعة ١٢٧٤ مادة مُرشّحة من قاعد البيانات C2DB، جرت إعادة حسابات باستخدام Quantum ESPRESSO لمجموعة جزئية ممثِّلة عن تلك الأساسية، واستُخدِمَت لتدريب نموذج انحدار ridge يقوم بالربط بين قيم فجوات الطاقة الموجودة في قاعدة البيانات مع تلك المعاد حسابها بالاعتماد على فجوة الطاقة، الكتلة المختزلة، والسماكة كواصفات. ثم تم تطبيق نموذج المعايرة على كامل مجموعة المرشحات، وصُنِّفَت المواد عبر مجموع مُركَّب من جميع الواصفات المذكورة بدلاً من الاعتماد على فجوة الطاقة لوحدها. تم تقدير اللايقينية باستخدام إعادة تشكيل العينات bootstrap لتقييم مدى استقرار القائمة النهائية، وبينت النتائج أن إطار العمل البسيط والشفّاف هذا بإمكانه تضييق فضاء كبير من المواد ثنائية البُعد إلى مجموعة صغيرة ومقبولة يمكن التركيز عليها، مع الاحتفاظ بقابلية التفسير الفيزيائي والتقدير الصريح للايقينية.

الكلمات مفتاحية: أنصاف نواقل ثنائية البُعد، معايرة فجوات الطاقة، استقصاء المواد، تقدير اللايقينية، ترانزستورات التأثير الحقلي.

* أستاذ في قسم الفيزياء، كلية العلوم في جامعة اللاذقية، مدينة اللاذقية، سوريا، mohammad.fahoud@tishreen.edu.sy.

**أستاذ في قسم الفيزياء، كلية العلوم في جامعة طرطوس، مدينة طرطوس، سوريا، Hasansuliman @tartous-univ.edu.sy.

***طالب دكتوراة في قسم الفيزياء، كلية العلوم في جامعة اللاذقية، مدينة اللاذقية، سوريا، khalil.assaf@tishreen.edu.sy.

مجلة جامعة طرطوس للبحوث والدراسات العلمية_ سلسلة العلوم الأساسية المجلد (١٠) العدد (٣) ٢٠٢٦

Tartous University Journal for Research and Scientific Studies –Basic Sciences Series Vol. (10) No. (3) 2026

Band-Gap Calibration and Device-Oriented Ranking of 2D Semiconductors for FETs

Prof. Dr. Mohammad Fahoud *

Prof. Dr. Hasan Suliman **

Khalil Assaf ***

(Received 2/4/2026.Accepted 6/5/2026)

□ABSTRACT □

This paper presents an approach to screen FET-like 2D semiconductors by combining database filtering, ab-initio calculations, statistical calibration, multi-criterion ranking, and uncertainty analysis. Starting from a group of 1274 candidate materials from the C2DB database, a small reference set was recalculated using Quantum ESPRESSO as a representative of the original group. Then, a ridge regression model was used to connect the recalculated band gap values with the ones in the database using band gaps, reduced mass, and thickness as descriptors. After that, the model was applied to the full space of candidates, and the final ranking stage was based on a composite score of all the descriptors instead of relying solely on the band gap. Finally, the uncertainty was estimated by bootstrap resampling to assess the stability of the final shortlist, and the results show that this simple and transparent workflow is able to narrow a vast space of potential 2D materials to a small acceptable set to concentrate on, without sacrificing physical interpretability and explicit estimation of uncertainty.

Key Words: 2D semiconductors; band-gap calibration; materials screening; uncertainty estimation; field-effect transistors

*Full Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Latakia University, Latakia, Syria, *mohammad.fahoud@tishreen.edu.sy.*

**Full Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Tartous University, Tartous, Syria, *HasanSuliman@tartous-univ.edu.sy.*

***PhD Student, Department of Physics, Faculty of Science, Latakia University, Latakia, Syria, *Khalil.assaf@tishreen.edu.sy.*

١. مقدمة

تتزايد صعوبة تصغير أبعاد الترانزستورات المعتمِدة على السيليكون مع تنامي التحديات المتعلقة بالطاقة والتصنيع والتعقيد التقني والحدود الفيزيائية للمواد التقليدية المستخدمة في تركيب القناة (Liu and Peng, 2024; Zeng et al., 2024). لذلك، يتصاعد الاهتمام بأنصاف النواقل ثنائية البُعد 2D كمرشَّحات ممتازة من أجل التقنيات البديلة المرتبطة بالترانزستورات المستقبلية، إذ تُقدِّم بنيتها ذات السماكة الذرية إمكانية واعدة جدّاً لأجهزة التأثير الحقلي field-effect devices فائقة الصغر (Zeng et al., 2024; Li et al., 2024; Kim et al., 2024).

إن العدد الممكن للمواد ثنائية البُعد كبير جداً، لذلك تُعتبر قواعد البيانات الحاسوبية مفيدة لعمليتي التنظيم والاستقصاء الممنهج للمواد المرشَّحة (Haastrup et al., 2018; Gjerding et al., 2021). تم تطوير قاعدة بيانات المواد ثنائية البُعد الحاسوبية The Computational 2D Materials Database (C2DB) كقاعدة بيانات عالية الكفاءة الإنتاجية للمواد ذات السماكة الذرية، إذ تقدم بيانات تفصيلية عن الخصائص البنيوية، والحرارية، والميكانيكية، والإلكترونية، والمغناطيسية، والضوئية المحسوبة وفق إطار عمل متسق (Haastrup et al., 2018). وقد تم الإعلان لاحقاً عن توسع هذه القاعدة لتشمل أكثر من ١٥٠٠٠ مادة ثنائية البُعد، الأمر الذي عزز قيمتها كنقطة انطلاق للدراسات الاستقصائية واسعة النطاق (Gjerding et al., 2021).

تُعتبر فجوة الطاقة من أهم الخصائص التي يتم استقصاؤها في أنصاف النواقل لارتباطها المباشر بالسلوك الإلكتروني للمادة (Li et al., 2024; Yang et al., 2023). في ذات الوقت، وبالرغم من جودة النظرية التابعية للكثافة Density Functional Theory (DFT) والارتفاع الكبير لكلفتها الحاسوبية؛ فإنها تعطي بتقريباتها الموضعية وشبه الموضعية لكمون التبادل–الترابط correlation–exchange قيماً أقل من القيم الفعلية لفجوات الطاقة (Yang et al., 2023). يعني هذا أن قيم فجوات الطاقة الموجودة في قواعد البيانات مفيدة كقيم فلترة أولية ولكنها بحاجة أن تُؤول بعناية كافية عندما يكون الهدف هو انتقاء مادة مكرَّسة للأجهزة (Yang et al., 2023).

ومن الأساليب العملية لتحسين الاستقصاء تلك التي تكمن في الجمع بين قواعد البيانات الضخمة وإعادة إجراء حسابات مبادئ أولية معايَرة لمجموعة جزئية صغيرة من المواد (Haastrup et al., 2018; Giannozzi et al., 2020). في هذا العمل، تمت عملية إعادة الحسابات باستخدام برنامج Quantum ESPRESSO (QE) مفتوح المصدر للحسابات الكمومية المبنية على النظرية التابعية لكثافة، والكمونات الزائفة pseudopotentials، والأمواج المستوية (Giannozzi et al., 2020). يُحافظ إطار العمل هذا على خاصية المجال الواسع للاستقصاء الذي توفره قاعدة البيانات إضافة إلى توفيره مجموعة مرجعية صغيرة مُتحكَّم بها من أجل المُقارنة والتقييم المنهجيين (Haastrup et al., 2018; Giannozzi et al., 2020).

من المسائل المهمة الأخرى المتعلّقة باستقصاء المواد المُقاد بالبيانات هي مسألة اللايقينية Uncertainty (Varivoda et al., 2023). يحظى تقييم اللايقينية باهتمام متزايد كجزء أساسي من التكهن بخاصية المادة باستخدام نماذج تعلّم الآلة Machine Learning (ML) لكونها تساعد في تحديد مدى موثوقية النموذج الذي يقوم بالتكهن (Varivoda et al., 2023). ويصبح هذا الأمر أكثر حراجة عندما يكون حجم البيانات التي يتم

تدريب النماذج التكهنية عليها صغيراً، كما هو الحال غالباً في دراسات المواد الحاسوبية (Varivoda et al., 2023).

٢. مواد البحث وطرائقه

ارتكزت هذه الدراسة على نسق عمل مُتدرج جمع بين مسح قاعدة البيانات، وحسابات المبادئ الأولية، والمُراجعة الإحصائية، وتقييم اللايقينية. انطُلِق من قاعدة بيانات المواد ثنائية البعد الحاسوبية (C2DB) التي تضم معلومات منظَّمة عن العديد من الخصائص المهمة للمواد ذات السماكات المنخفضة في إطار حاسوبي ممنهج (Haastrup et al., 2018; Gjerding et al., 2021). وكانت (C2DB) هنا هي المصدر الأساسي الذي استُخرِجت منه المجموعة الجزئية المفَلتَرة للمواد المُرشَّحة (١٢٧٤ مادة) للاستعمال في أجهزة FET (Li et al., 2024; Haastrup et al., 2018; Gjerding et al., 2021)، أما الحسابات المرجعية فقد أُجريَت باستخدام برنامج Quantum ESPRESSO المرتكز على DFT. صيغت DFT وفقاً للمبدأ القائل أن خواص الحالة الأرضية لنظام إلكتروني متفاعل هي "تابعيّات functionals" للكثافة الإلكترونية (Hohenberg and Kohn, 1964)، ويتم حلّها عملياً باستخدام الصيغة المعروفة باسم Kohn-Sham عبر المعادلات المتّسقة ذاتياً self-consistent للإلكترون الواحد والتي تضم مفاعيل التبادل والترابط (Kohn and Sham, 1965). تم هنا إعادة الحسابات للمجموعة الجزئية التي تضم ٢٧ مادة باستخدام إعدادات موحَّدة لـ QE بحيث تكون فجوات الطاقة الناتجة قادرة على لعب دور قيم مرجعيّة مُتَّسقة من أجل المُقارنة والتقييم. وقد كانت الإعدادات الموحَّدة بالشكل التالي:

الجدول (١): الإعدادات الموحَّدة لبرنامج Quantum ESPRESSO.

plane-wave cutoff	60 Ry
Charge-density cutoff	480 Ry
k-point mesh	$8 \times 8 \times 1$
smearing width	0.01 Ry

ولأن الغاية النهائية لهذا العمل تتعلّق باستقصاء مواد موجّه نحو الترانزستورات؛ فقد اعتُبِرَت فجوة الطاقة هي الهدف الأساسي للمقارنة (Li et al., 2024)، إذ إنه في أنصاف النواقل، تكون عتبة الامتصاص مرتبطة بالانتقالات الإلكترونية الحاصلة بين قمة عصابة التكافؤ وقعر عصابة الناقلية (Peter and Cardona, 2010). يدل الرمز g_{C2DB} على قيمة الفجوة المذكورة في القاعدة (C2DB) بينما يدل الرمز g_{QE} على قيمة فجوة الطاقة المُستخلصة من بنية العصابات المحسوبة بواسطة Quantum ESPRESSO. من المعلوم أن التقريبات شبه الموضعية DFT تقلل من قيمة فجوات الطاقة (Yang et al., 2023)، لذلك صيغت الخطوة المتعلّقة بقيم المقارنة كمسألة انحدار خاضع للإشراف supervised regression problem من الشكل:

$$g_{QE} = f(\mathbf{x}) \qquad (1)$$

إذ إن $\mathbf{x}$ هي شعاع مميزات الدخل المستخدمة من قبل النموذج (James, 2013). وهنا يكون شعاع المميزات بالشكل:

$$\mathbf{x} = (g_{C2DB}, m_{red}, t) \qquad (2)$$

إذ إن m_{red} هي الكتلة المختزلة وt سماكة المادة. وضمن إطار تقريب الكتلة الفعّالة يتم اعتبار الإلكترون والثقب كجسيمات بكتل فعّالة مرتبطة بعصابتي الناقلية والتكافؤ على الترتيب، وتنقسم مسألة الجسيمين المنفصلين

إلى مركز الكتل والإحداثيات النسبية (Peter and Cardona, 2010). ومن أجل الحركة النسبية، تحقق الكتلة الفعّالة العلاقة التالية:

$$\frac{1}{m_{red}} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \tag{3}$$

والمكافئة للشكل:

$$m_{red} = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \tag{4}$$

وقد استُخدِمَت هذه الكمية كمميزة وصفية لسلوك حاملة الشحنة ذات الكتلة، أما السماكة فقد تم تضمينها كمميزة وصفية ثالثة. وقد تم اعتبار القيم الصفرية للكتل في قاعدة البيانات كبيانات مفقودة، أما القيم المفقودة للسماكة فقد استُعيضَ عنها بقيمة الوسيط من قيم بيانات التدريب، وهي من الطرق البسيطة والشائعة في معالجة النقص الحاصل في بيانات الدراسة كما هو مذكور في المراجع الخاصة بهذه العمليات والمدعوة بعمليات التنسيب imputation (Joel et al., 2025).

تم استخدام نموذج تعلم آلة لمسألة الانحدار من نوع ridge regression. في الانحدار الخاضع للإشراف، يكون الهدف مُمَثّلاً كتابع لواحد أو أكثر من المُدخلات (James, 2013). وفي الصيغة الخطّية يمكن كتابة التكهن بالشكل:

$$\hat{y} = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_j \tag{5}$$

إذ إن $\hat{y}$ هي الخاصة المتكهن بها، β_0 هي قيمة $\hat{y}$ عندما تكون قيم جميع المُدخلات مساوية للصفر. β_j هي معاملات تثقيل تشير إلى مدى تأثير المدخلات على $\hat{y}$ أي كلما كانت القيم أكبر يزداد التأثير على التكهن. وبشكل مشابه للانحدار الخطي linear regression يقوم ridge regression بإضافة قيمة جزائية penalty صغيرة لمنع معاملات التثقيل β_j من أن تصبح كبيرة جداً، ويتم استخلاص المُعامِلات عن طريق إيجاد القيمة الدنيا لـ:

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 + \alpha \sum_{j=1}^{p} {\beta_j}^2 \tag{6}$$

إذ إن y_i هي القيمة الفعليّة، n عدد بيانات التدريب، α هي معامل التنظيم الذي يتحكم بمقدار تقليص معاملات التثقيل. يُعبِّر الحد الأول بمجمله عن الفارق بين القيم الفعلية وقيم التكهن (أي قيمة الخطأ)، أما الحد الثاني فهو قيمة جزائية وظيفتها إبقاء معاملات التثقيل صغيرة من أجل المحافظة على استقرار النموذج؛ الأمر المهم جداً في حال كانت المُدخلات مترابطة أو بيانات التدريب محدودة (Hoerl and Kennard, 1970).

وعلى الرغم من أن عملية الحسابات قد أُجريَت على ٢٧ مادة إلا أن النموذج قد تم تدريبه على جزء منها يضم ٢٣ مادة فقط، بسبب إضافة قيد آخر على البيانات هو:

$$0.5 \text{ eV} \leq g_{QE} \leq 2 \text{ eV} \tag{7}$$

وسبب اختيار هذا القيد تحديداً هو توجيه نموذج المعايرة إلى المجال المذكور لفجوات الطاقة لكونه الأكثر صلة بمحور الدراسة المتركّز على المواد المناسبة لترانزستورات FET. أما عملية مصادقة النموذج Model validation واختيار البارامترات الفائقة hyperparameters فقد نُفِّذوا باستخدام تقنية leave-one-out

cross-validation (LOOCV). في تقنية LOOCV يتم استخدام عملية رصد واحدة كمجموعة للمصادقة؛ أما باقي عمليات الرصد الـ$(n-1)$ فاستُخدِموا للتدريب، كُرِّرَت بعدها العملية من أجل n نقطة وقُدِّرَ بعدها خطأ الاختبار على أنه متوسط n خطأ تربيعي (James, 2013).

إذا رمزنا بـ $(\widehat{y}_i^{(-i)})$ لقيمة التكهن عند النقطة i حينما تكون هذه النقطة خارج مجموعة التدريب؛ يكون تقدير LOOCV للخطأ التربيعي الوسطي بالشكل:

$$\mathrm{CV}(n) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \widehat{y}_i^{(-i)}\right)^2 \tag{8}$$

وفي هذا العمل تم البحث عن α ضمن هذه القيم $\{0.1, 0.3, 1, 3, 10, 30, 100\}$ واختيرت $(\alpha = 10)$ لكونها أعطت أقل قيمة للخطأ. بعد التدريب طُبِّقَ النموذج المُعايَر على مجموعة الـ (١٢٧٤ مادة) لاستخراج فجوات الطاقة للمواد التي تملك المُدخلات المطلوبة وكأنها محسوبة بواسطة QE؛ أي أن هذه التكهنات تُعتبر تقريبية وليس نِتاجاً لحسابات مبادئ أولية لكل من المواد الـ ١٢٧٤. وقد جمع الترتيب النهائي الفجوات المُتكهنة والكتلة المختزلة والسماكة عبر الصيغة التركيبية التالية:

$$S_{final} = S_{gap} + S_{mred} + S_{thickness} \tag{9}$$

وقد ضُمِّنت هذه الصيغة في الدراسة لجعل القائمة النهائية للمواد تعتمد على أكثر من مؤشر واحد لتوثيق ارتباطها بعدة خصائص ذات صلة بعمل الترانزستورات بدلاً من الاعتماد على فجوة الطاقة لوحدها (Li et al., 2024).

تم تقدير اللايقينية باستخدام تقنية إعادة تشكيل العينات المعروفة باسم "bootstrap resampling" والتي يتم فيها تخليق مجموعات بيانات جديدة عبر أخذ عينات عشوائية من البيانات الأصلية مع الاستبدال، ويتم تطبيق النموذج نفسه على كل مجموعة مُعاد تشكيلها.

إذا رمزنا بـ $(\hat{g}^{(b)})$ لمرشَّحة محددة من المجموعة b المُعاد تشكيلها؛ تكون قيمة متوسط bootstrap والانحراف المعياري بالشكل:

$$\begin{cases} \mu_{boot} = \dfrac{1}{B}\displaystyle\sum_{b=1}^{B}\hat{g}^{(b)} \\ \updownarrow \\ \sigma_{boot} = \dfrac{1}{B}\displaystyle\sum_{b=1}^{B}\left(\hat{g}^{(b)} - \mu_{boot}\right)^2 \end{cases} \tag{10}$$

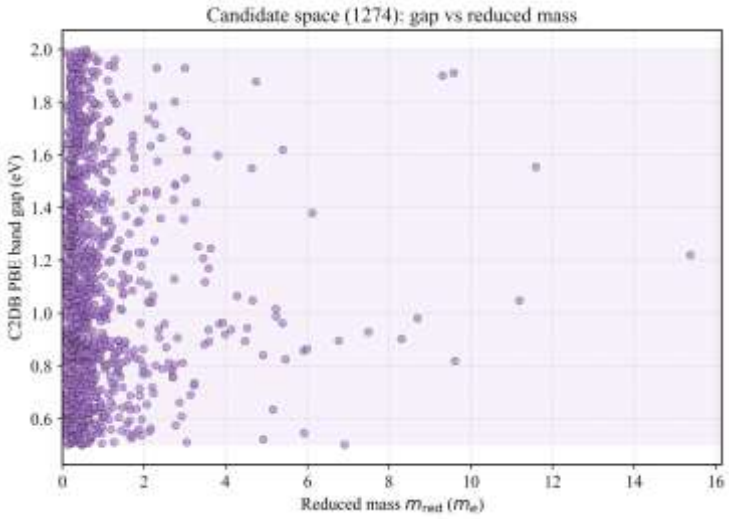
إذ إن: B عدد عينات bootstrap المُعاد تشكيلها، μ_{boot} قيمة المتوسط الحسابي لجميع تكهنات bootstrap، σ_{boot} الانحراف المعياري وهو يشير إلى سعة انتشار التكهنات ويلعب دور أداة قياس اللايقينية. اسُتخدمَت القيمة $B = 1000$ في هذا العمل، وتم حساب النسب المئوية لوصف مجال اللايقينية، وتم استخدام النموذج نفسه (ridge regression) في كل خطوة من عملية إعادة التشكيل لضمان كون تقديرات اللايقينية

متسقة مع النموذج التكهني النهائي. كما تم تنظيم النتائج على ثلاث مستويات: نتائج QE المباشرة (الخاصة بإعادة الحسابات)، نتائج التكهن لكل مجموعة المُرشَّحات، وجداول الترتيب النهائية الخاصة بالمواد المُختارة.

٣. نتائج البحث ومناقشتها

فضاء المُرشَّحات وبيانات المعايرة

قبل مناقشة المعايرة من المفيد النظر إلى شكل فضاء المُرشَّحات التي تم استقصاؤها والتي يُحاول النموذج المستخدم تنظيمها. بعد مرحلة الفلترة للمواد التي تبدو ملائمة لترانزستورات FET والتي وُصِفَت في القسم السابق؛ ضمّت مجموعة البيانات حينها ١٢٧٤ مادة ثنائية البُعد، ويوضِّح الشكل (١) البنية العامة (العريضة) لفضاء المواد هذا.



الشكل (١): فجوة الطاقة بدلالة الكتلة المختزلة في فضاء المرشحات.

يرسم الشكل قيمة فجوات الطاقة للمواد الموجودة في قاعدة البيانات مقابل الكتلة المختزلة الموافقة لها، وتدل المنطقة المظللة الأفقية على مجال الطاقة eV (2 → 0.5) المُستهدف في هذه الدراسة. يُقرأ الشكل على أنه الخلفية الهندسية لمسألة الاستقصاء والهدف منه إظهار مدى التغاير الذي بقي بعد الفلترة وقبل تنفيذ أي حسابات تأكيدية بواسطة QE أو تصنيفات نهائية. يحتوي الشكل ١٢١٠ مادة من ١٢٧٤ لأن هذه المواد هي التي تملك بيانات كاملة حول فجوة طاقتها والكتلة المختزلة؛ ولأن الهدف من الشكل هو عرض الاستقصاء الفعّال فقط وليس كل كامل قيم الجدول المفلتَر. ونلاحظ من هذه النقاط أن قيم فجوات الطاقة تتراوح على كافة قيم مجال الطاقة المقيّد تقريباً eV (1.997 → 0.501)، بينما تتواجد قيم الكتلة المختزلة في المجال (0.0016 → 15.37) m_e. ومن أوضح معالم الشكل التركيز العالي للمُرشَّحات بجوار القيم الصغيرة للكتل. نسبياً، بلغت قيمة الوسيط للكتلة المُختزلة $0.462\,m_e$، حيث 80.1% من المرشَّحات بكتلة مختزلة أقل من $1\,m_e$؛ و 91.9% أقل من $2\,m_e$، فيكون الجانب الأيمن المبعثر من الشكل مُمثلِّاً لحالات شاذة مقارنة بأغلبية المواد. يمكن القول إن أهمية الشكل تكمن في كونه يشرح لماذا لا يمكن اختزال التصنيف النهائي بخاصة واحدة إذ إن العديد من المرشَّحات تملك قيماً متقاربة لفجوات الطاقة ولكن تختلف بشدة في الكتلة المختزلة؛ والعكس صحيح. بالتالي يلزم من الشكل (١) أن تكون القائمة النهائية منبثقة من سلوك مختلط لعدة مؤشرات أي أن مسألة الاستقصاء متعلقة بعدة عوامل وتحتاج إلى صيغة تركيبية كما في العلاقة (٩).

تحتوي المجموعة الجزئية التي تم إجراء حسابات QE المعايَرة لها على ٢٧ مادة، وقد تم تلخيص النتائج في الجدول (٢) الذي يجب النظر إليه مع الأخذ بالحسبان المجموعة المفلترة الواسعة. لقد تم اختيار هذه الـ ٢٧ مادة كمجموعة معايرة ممثلة لـ ١٢٧٤ مادة بدلاً من إعادة حسابات مبادئ أولية موحَّدة لها جميعاً.

الجدول (٢): قيم فجوات الطاقة المحسوبة QE ومقارنتها بالقيم الموجودة في C2DB.

$\mathrm{ID}_{\mathrm{C2DB}}$	E_g^{ref} (eV)	E_g^{QE} (eV)	$\Delta E_g = E_g^{QE} - E_g^{ref}$ (eV)	m_{red}	t (Å)	E_{VBM} (eV)	E_{CBM} (eV)
2nbi2te2-1	0.64884	0.7809	0.13206	0.149059	4.771904	-2.5008	-1.7199
1sas2te2-1	0.7094	0.9174	0.208	0.084822	6.430573	-0.0949	0.8225
2snte-1	0.602765	0.7179	0.115135	0.034185	3.155054	0.0836	0.8015
2auite2-1	0.710996	1.0569	0.345904	0.38493	3.570958	-2.1439	-1.087
2cri3-1	0.890693	2.3526	1.461907	0.62501	3.133776	-2.3817	-0.0291
2fotl-1	0.583432	0.548	-0.03543	0.349185	4.928529	-4.0324	-3.4844
2niseo3-2	0.554503	0.6604	0.105897	1.445516	3.853528	-2.9671	-2.3067
4nii2-1	0.632931	0.6723	0.039369	1.658304	5.764254	-3.4582	-2.7859
2inps3-1	0.839307	0.8495	0.010193	0.685352	3.516896	-1.6239	-0.7744
2aste-1	0.93385	1.1485	0.21465	0.16609	2.448441	-2.2467	-1.0982
2agcdclse-1	1.042915	1.0882	0.045285	0.176102	3.985027	-3.6577	-2.5695
2iinse-1	1.046586	1.173	0.126414	0.274489	6.669631	-3.6356	-2.4626
2nbocl2-1	1.041008	1.2447	0.203692	0.31107	3.886491	-3.7999	-2.5552
2gai3-1	1.152503	1.4042	0.251697	0.327149	3.266541	-2.7324	-1.3282
2nite2-1	0.920798	0.9839	0.063102	0.364569	1.559851	-1.8561	-0.8722
2cobr3-1	0.961776	1.0382	0.076424	5.382276	2.718071	-2.4113	-1.3731
2pdi2o6-1	1.034032	1.1018	0.067768	0.786246	5.961551	-3.7037	-2.6019
2aubrte2-1	1.013351	1.1885	0.175149	0.707677	3.248835	-2.4256	-1.2371
1sni2-1	1.836618	2.0454	0.208782	0.236269	3.691724	-2.4792	-0.4338
2brnsn-1	1.365926	1.4114	0.045474	0.226232	5.983687	-1.4455	-0.0341
2ins-2	1.604271	1.6141	0.009829	0.241485	5.167425	-1.5926	0.0215
2pbi2-2	1.700921	2.5416	0.840679	0.412996	4.23654	-4.6595	-2.1179
4baclsbse2-1	1.583953	1.7224	0.138447	0.622205	11.16065	-1.9398	-0.2174
2mocd2o4-1	1.649357	2.2799	0.630543	0.364883	4.883132	-4.0193	-1.7394
1mnsb2f12-1	1.742233	1.3839	-0.35833	0.762696	7.683698	-8.0103	-6.6264
2agfs2-1	1.354153	1.4051	0.050947	1.025393	2.616062	-3.524	-2.1189
1nin2c4o4h8-1	1.325593	0.6939	-0.63169	1.211691	2.711683	-2.4483	-1.7544

يظهر من الجدول أن قيم فجوات الطاقة المحسوبة بواسطة QE تتراوح في المجال ($0.548 \rightarrow$ 2.542) eV، بقيمة متوسط حسابي (1.26 eV)، ووسيط (1.149 eV). يُعتبر هذا المجال واسعاً كفاية لدعم

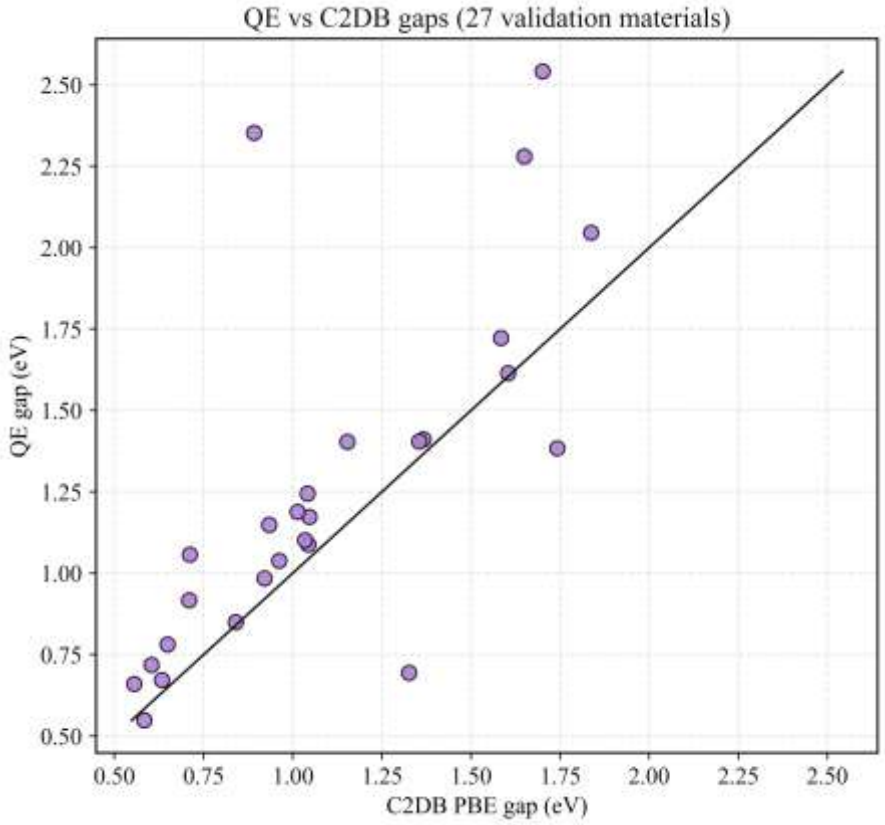
المعايرة مع بقائه متمركزاً في مجال الطاقة الملائم لاستقصاء موجّه نحو أنصاف نواقل مناسبة للترانزستورات، كما أنه يساعد في ضمان أن نموذج التصحيح ليس مقيّداً بعائلة كيميائية ضيقة أو نظام طاقة محدود. وعلى الرغم من احتواء مجموعة QE لـ ٢٧ مادة مُعادة حساباتها، إلا النموذج طُبِقَ فقط على ٢٣ مادة فقط للالتزام بالعلاقة (٧)، إذ إن الهدف من هذا القيد هو جعل النموذج الإحصائي يعمل بأفضل شكل ضمن مجال الطاقة المُستهدَف في عملية الاستقصاء بدلاً من جعله يوائم جميع النقاط المُعاد حسابها بغض النظر عن صلتها بالتطبيق المعني.

مقارنة بين فجوات الطاقة الخاصة بـ QE وC2DB

إن المسألة الرئيسة لهذه الورقة هي فيما إذا كانت فجوات الطاقة المُعاد حسابها بواسطة QE قريبة بما فيه الكفاية من تلك الموجودة في القاعدة C2DB لتُستخدم مباشرة؛ أم أن إيجاد تصحيح (معايرة) من خلال النموذج هو أمر مبرر وضروري. ويوضح الشكل (٢) هذه المقارنة مع وجود القيم العددية في الجدول (٢).

نلاحظ في الشكل (٢) قيم فجوات QE على المحور الشاقولي وقيم C2DB على المحور الأفقي، فيكون منصف الربع الأول هو خط تساوي القيم؛ أي أن القيم التي تقع فوقه تمثّل المواد ذات فجوات الطاقة QE الأكبر من C2DB، والعكس صحيح. يتبين مباشرة من الشكل أيضاً وجود ارتباط بين القيم لكنها غير متماثلة، أي أن إجراء معايرة هو أمر ضروري لأن استخدام قيم من القاعدة بشكل مباشر سيخلق خلطاً مع القيم التي تتم إعادة حسابها وتختلف بمقدار لا يمكن إهماله.

بما أنه من المعروف أن تقريبات DFT شبه الموضعية تقلل قيم الفجوات (لا تعطي القيم بدقة) (Yang et al., 2023)، فالنمط الموجود هنا معقول فيزيائياً ولكن من المهم ظهوره بوضوح لدينا بدل الاعتماد على المراجع فقط. وبتفقد الجدول (٢) تتبين هذه النقطة بوضوح أكبر؛ إذ تملك ٢٤ من ٢٧ مادة مُعاد حساب فجوة طاقتها قيمة موجبة لـ ($\Delta E_g = E_g^{QE} - E_g^{ref}$).غير أنه لا يمكن استخدام تصحيح بقيمة موحَّدة لأن مجال التغاير كبير ويتراوح بين (-0.632 eV) و(1.462 eV)، فتكون مسألة المعايرة هي معرفة كيفية تغاير ΔE_g عبر المواد التي يتم استقصاؤها بدلاً من معرفة القيمة الواجب إضافتها إلى كل فجوة طاقة في C2DB.



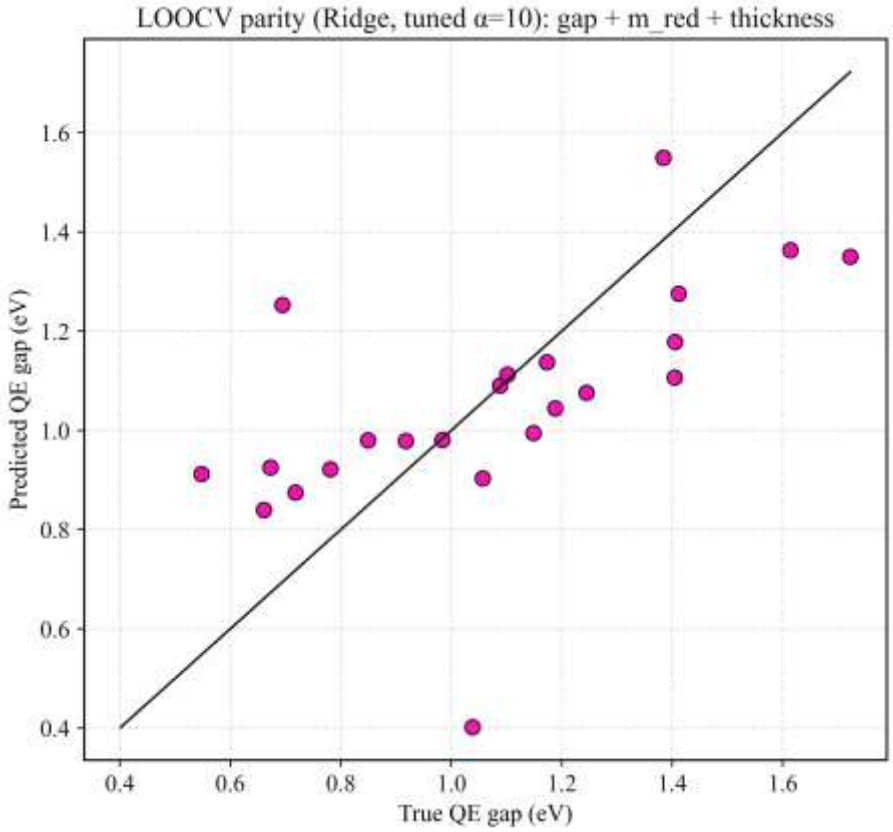
الشكل (٢): مقارنة قيم فجوات الطاقة بين QE وC2DB.

تجدر الإشارة (من الجدول (٢) أيضاً) إلى أن المواد الأربعة (2cri3-1، 1sni2-1، 2pbi2-2، 2mocd2o4-1) هي السبب في احتواء مجموعة التدريب على ٢٣ مادة من أصل الـ ٢٧، فقد وقعت خارج مجال الطاقة المفيد للترانزستورات المشار إليه في (7)، وقيمها هي الأشد تبايناً بين QE وC2DB.

أداء نموذج المعايرة

بعد تبيان عدم التماثل بين القيم المُعاد حسابها والقيم الموجودة في القاعدة، أصبحت المسألة فيما إذا كان بمقدور نموذج إحصائي بسيط تعلم العلاقة بين القيم بشكل جيد لدعم عملية الاستقصاء واسعة النطاق، ويُعطي الشكل (٣) إجابة لذلك.

يعطي الشكل (٣) نتائج النموذج ridge النهائي المعتمد على تقنية LOOCV والمدرَّب على المواد الـ ٢٣ المعاد حسابها. يظهر على المحور الأفقي قيم الفجوات المحسوبة بـ QE وعلى المحور الشاقولي قيم التكهّن، أما الخط القطري (منصف الربع الأول) فهو خط التنبؤ المثالي. يتبين من الشكل أن النموذج قد عثر على نزعة واضحة بالرغم من عدم تطابقها تماماً مع القيم الفعليّة، إذ إن مُعظم النقاط تتوضع بالقرب من الخط القطري ما يعني أن النموذج قد التقط علاقة ذات معنى (مفيدة) بين قيم QE وC2DB ولا ينتج قيم اعتباطية. في ذات الوقت حظيت عدة نقاط بتكهنات مبالغة سلباً وإيجاباً، إلا إن هذا السلوك متوقع تماماً نظراً لقلة عدد نقاط التدريب (٢٣)؛ فيمكن القول إن العلاقة العامة قد التُقطِت ولكن ليس لجميع المواد. بلغت قيمة الخطأ التربيعي الوسطي ($0.0651\ eV^2$) ما يعني أن الخطأ التربيعي الجذري الوسطي هو بحوالي($0.255\ eV$) وهي قيمة معقولة جداً لنموذج استقصاء أولي مُدرَّب على عدد محدود جداً من البيانات.



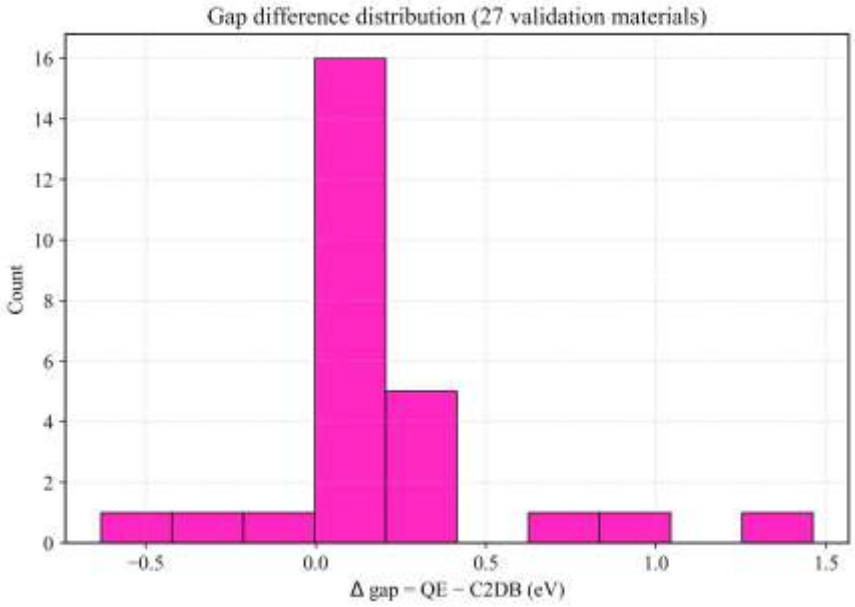
الشكل (٣): أداء نموذج المعايرة بالمقارنة بين التكهنات وقيم QE.

يدل هذا الشكل على أن النموذج مفيد للاستخدام كطبقة تصحيح عملية لكونه بسيط وسلِس، فهو يعتمد فقط على قيم فجوات الطاقة من القاعدة مع الكتلة المختزلة والسماكة كمؤشرات. كما أفاد بأن نموذجاً بمقدارٍ ضئيل من التنظيم بإمكانه حذف كمية مُعتبرة من الاختلاف بين القيم ذات المنشأ المُتغاير، مع بقاء هامش لتقييم صريح للايقينية.

توزع الاختلافات بين قيم فجوات الطاقة QE وC2DB

من المهم استعراض نوع التصحيح الذي تعلّمه النموذج لمعرفة إذا ما احتاجت مجموعة البيانات الجزئية تصحيحاً ضيّقاً (ذو قيمة شبه ثابتة) أم أنها مسألة عدم تناظر أعقد يلزمها تصحيح أشمل. تم استخراج الشكل (٤) الذي يوضح التوزع الإحصائي للعلاقة $\Delta E_g = E_g^{QE} - E_g^{ref}$ للإجابة مباشرة على هذا السؤال بدلاً من رسم كل نقطة محسوبة وفق QE مع نظيرتها من C2DB.

يُظهِر الشكل (٤) أن الجزء الأكبر من توزع التصحيح يقع في الجانب الموجب؛ الأمر الذي يتسق مع وجود ٢٤ مادة فوق الخط القطري في الشكل (٢)، ما يعني أن معظم المواد المُعاد حساباتها تطلب تصحيحاً موجباً. غير أن المخطط ليس ضيّقاً ولا متناظراً؛ فمركزه يتوضع بالقرب من القيم الموجبة الصغيرة، لكن أطرافه تتمدد نحو القيم الموجبة الكبيرة بشكل أكبر بكثير من جهة القيم السالبة الكبيرة مما يدل على عدم إمكانية توصيف ΔE_g بإزاحة وسطية مُفردة.



الشكل (٤): توزّع الفروق بين فجوات الطاقة (QE - C2DB).

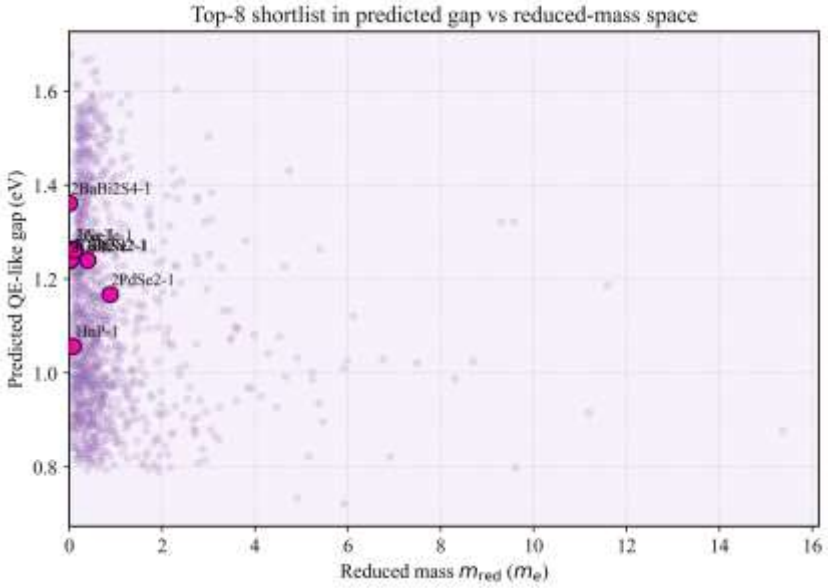
يُساعدنا الجدول (٢) مرة أخرى في معرفة المواد المسؤولة عن هذا الشكل، فالقسم الأيمن منه مُقاد من (2pbi2-2, 2cri3-1, 2mocd2o4-1) بينما يتأثر القسم الأيسر بشكل أساسي بـ (1nin2c4o4h8-1). بهذا الاستدلال يتبين أن استخدام نموذج regression متعلّق بالمواد أكثر ملائمة بكثير من استخدام انزياح معمم. بالرجوع إلى القيد (٧)، نلاحظ أن الشكل (٤) يبين بوضوح أنه ليس عشوائياً؛ فالعديد من القيم الحديّة عالية الإيجابية تقع خارج مجال التدريب المؤلف من ٢٣ مادة، وبخلاف ذلك كانت لتسيطر على بنية التصحيح بشكل لا يتماشى مع هدف إطار العمل هذا الموجّه نحو تطبيق الترانزستور FET.

تصنيف المرشَّحات والقائمة النهائية

بعد المعايرة، تم تطبيق النموذج على كامل مجموعة المرشَّحات المفلترة. شملت نتائج التكهنات جميع الـ ١٢٧٤ مادة، لكن قائمة الترتيب الأخيرة عملت على ١٢١٠ مادة التي تتوفر لها قيم الدخل الضرورية بعد المعالجة الأولية. يعني هذا أن القائمة النهائية ليس نتاجاً لعملية انتقاء ضيقة بل اتصفت بالشمولية لأن مصدرها مجموعة جزئية كبيرة ذات شروط محددة. أما عملية التصنيف نفسها فهي معتمدة على أكثر من معيار، فقد جمعت بين فجوة الطاقة QE والكتلة المختزلة والسماكة وفق العلاقة (٩). وتُعتبر هذه الخطوة من أميز نقاط هذه الدراسة؛ إذ قد تكون المادة بفجوة طاقة مرغوبة ولكن السماكة أو سلوك حاملات الشحنة ذات الكتلة غير مرغوبين، بالتالي لا يجب أن تتصدر التصنيف الموجّه نحو أكثر أداء واعد للتطبيق؛ أي أن مرحلة التصنيف هي النقطة التي تتحول فيها التصحيحات الإحصائية إلى قرارات تصميم عملية. ويوضح الجدول (٣) قائمة بأعلى ٢٠ مادة تصنيفاً بشكل تفصيلي، والشكل (٥) يخص بالذكر المواد الثمانية الأعلى (القائمة النهائية القصيرة) مع وضعها

في فضاء المرشَّحات الكامل باعتماد نفس قيم فجوات الطاقة المعايَرة المستخدمة في التصنيف، ونلاحظ أن هذه المواد هي:

(2BaBi2S4-1, 1InP-1, 2GaTe-1, 2As-1, 4OBi2S2-1, 2PdSe2-1, 2PtSe2-1, 1GeTe-1)



الشكل (٥): المواد الـ ٨ الأعلى تصنيفاً في فضاء المُرشَّحات.

من أهم النقاط التي يوضحها الشكل (٥) هي أن المواد الـ (٨) الأعلى تصنيفاً متمركزة في مجال الكتل المختزلة الصغيرة والمتوسطة من فضاء المُرشَّحات مع بقائها في الحيز المرغوب لقيم فجوات الطاقة، أي أنها غير منبثقة من النقاط المعزولة عالية الكتلة بل من المنطقة الأكثر اتزاناً بين مجموعة الخواص المرغوبة؛ وهو الهدف الأسي الذي صُمِّم من أجله إطار العمل هذا.

الجدول (٣): القيم الخاصة بأفضل ٢٠ مادة مرتبة مع درجات التصنيف واللايقينية.

Rank	Material	Bootstrap Mean Gap (eV)	Reduced Mass	Thickness (Å)	Gap Score	Mass Score	Thickness Score	Composite Score	Bootstrap SD (eV)	Bootstrap Interval (P5-P95) (eV)
1	2BaBi2S4-1	1.362	0.002	7.96	0.930	1.000	0.026	0.871	0.077	1.236 - 1.481
2	1InP-1	1.057	0.084	0.49	0.945	0.019	1.000	0.534	0.086	0.927 - 1.217
3	2GaTe-1	1.239	0.010	5.02	0.996	0.155	0.064	0.524	0.061	1.145 - 1.344
4	2As-1	1.264	0.095	1.40	0.989	0.017	0.330	0.485	0.100	1.108 - 1.439
5	4obI2S2-1	1.241	0.033	3.54	0.995	0.048	0.107	0.480	0.070	1.134 - 1.363
6	2PdSe2-1	1.167	0.879	1.49	0.997	0.002	0.307	0.480	0.094	1.002 - 1.308
7	2PtSe2-1	1.240	0.397	1.50	0.996	0.004	0.303	0.480	0.095	1.083 - 1.401
8	1GeTe-1	1.262	0.123	1.56	0.989	0.013	0.291	0.480	0.097	1.109 - 1.431
9	2PtTe2-1	1.179	0.338	1.71	0.999	0.005	0.262	0.478	0.083	1.042 - 1.322
10	1Ptsse-1	1.209	0.088	2.55	1.000	0.018	0.163	0.474	0.076	1.091 - 1.342
11	2CdS2-2	1.277	0.581	1.56	0.984	0.003	0.291	0.473	0.103	1.106 - 1.445
12	1PbSe-1	1.287	0.325	1.55	0.979	0.005	0.294	0.472	0.101	1.124 - 1.462
13	1PbO2-1	1.203	0.448	2.12	1.000	0.003	0.204	0.472	0.081	1.066 - 1.337

الجدول (٣): القيم الخاصة بأفضل ٢٠ مادة مرتبة مع درجات التصنيف واللايقينية.

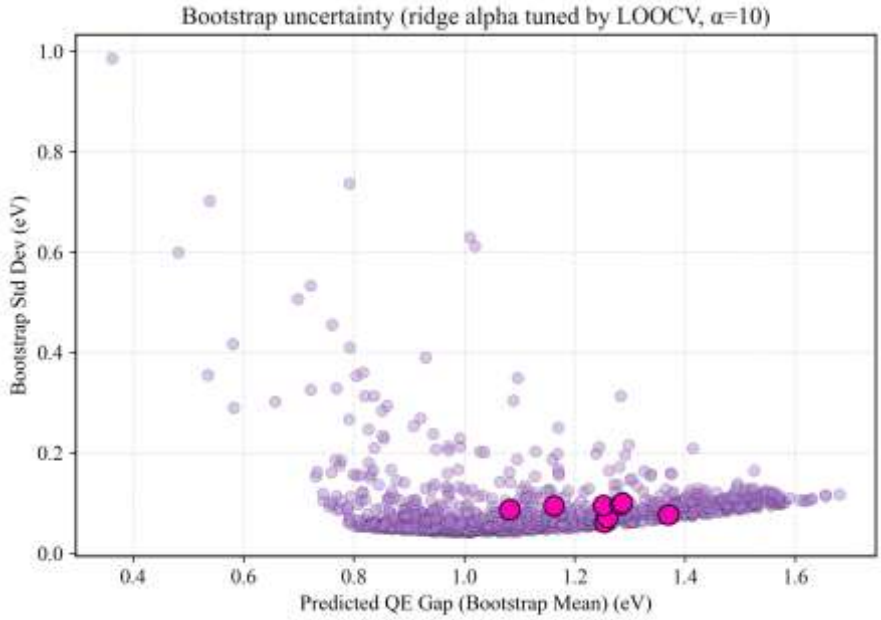
Rank	Material	Bootstrap Mean Gap (eV)	Reduced Mass	Thickness (Å)	Gap Score	Mass Score	Thickness Score	Composite Score	Bootstrap SD (eV)	Bootstrap Interval (P5-P95) (eV)
14	1PbS2-1	1.229	0.248	2.15	0.998	0.006	0.201	0.472	0.083	1.093 - 1.372
15	1NiO2-1	1.159	0.886	1.90	0.995	0.002	0.232	0.472	0.087	1.003 - 1.286
16	1NiF2-1	1.227	4.632	2.00	0.998	0.000	0.219	0.471	0.303	0.449 - 1.415
17	1ssege2-1	1.173	0.147	2.50	0.998	0.011	0.167	0.471	0.072	1.060 - 1.297
18	1ScO2-2	1.227	2.303	2.07	0.998	0.001	0.210	0.470	0.161	0.839 - 1.379
19	2PdTe2-1	1.122	0.766	1.68	0.983	0.002	0.267	0.470	0.082	0.976 - 1.247
20	1wo2-1	1.210	0.239	2.47	1.000	0.007	0.169	0.470	0.076	1.087 - 1.338

تقييم لايقينية التكهنات

لكون النموذج قد دُرِّبَ على ٢٣ مادة فقط من التي أعيدت حساباتها، من المفيد استعراض مدى موثوقية واستقرار قيم هذه التكهنات. باستخدام لايقينية bootstrap أُعيد بناء النموذج ١٠٠٠ مرة باستخدام صيغ متغايرة قليلاً للبيانات المرجعية، فحصلت كل مادة على عدة تكهنات بدلاً من واحد فقط. قمنا بحساب متوسط bootstrap (أي المتوسط الحسابي لقيم التكهنات المختلفة لفجوة الطاقة) وانحراف bootstrap المعياري (الذي يُظهِر مدى تغاير التكهن نفسه كل مرة). تدل القيم الصغيرة لانحراف bootstrap المعياري على أن التكهنات أكثر اتساقاً وبالتالي أكثر استقراراً، أما القيم الكبيرة فتشير إلى وجود لايقينية أكبر.

يمكن اعتبار الشكل (٦) الذي يُظهر نتائج تقنية bootstrap كخريطة استقرار، إذ يظهر على المحور الأفقي قيم متوسط bootstrap التي تخبرنا بشكل متوسط عن موقع المادة في مجال الاستقصاء، أما المحور الشاقولي فتظهر عليه قيم انحراف bootstrap المعياري التي تخبرنا عن مدى استقرار التكهنات. تملك النقاط ذات التموضع المنخفض على الشكل تكهنات ذات قيم متجمعة بكثافة وهي أكثر استقرارا، أما النقاط الأعلى فهي أكثر عِرضة للتأثر بالتغيرات الحاصلة في بيانات التدريب وهي أقل استقراراً. يعني هذا أنه قد تملك مادتان قيم متقاربة لفجوة الطاقة المُتكهَّن بها على المحور الأفقي ولكن بموثوقية مختلفة تبعاً لموقعها على المحور الشاقولي.

تُمثِّل غمامة النقاط ذات اللون البنفسجي الباهت كامل المُرَشحَّات الـ ١٢١٠ بينما تُمثِّل النقاط البارزة المواد الثمانية الأعلى في التصنيف. نلاحظ أن معظم المُرَشحَّات تقع في عصبة المواد منخفضة اللايقينية لكن وجود ذيل بقيم عالية لها، مع أهمية الانتباه إلى أن المواد الثمانية الأعلى لا تنتمي لهذا الذيل. بالنسبة لكامل المجموعة، بلغت قيمة متوسط انحرافbootstrap المعياري (0.0844 eV) ووسيطه (0.066 eV)، أما المواد الثمانية الأعلى فبلغت قيمة الوسيط (0.085 eV) مع تراوح قيمها في المجال بين (0.0608 eV) إلى (0.0997 eV)، فيمكن القول إن المواد الثمانية تقع في القسم ذي السلوك الأفضل من فضاء التكهنات.



الشكل (٦): خريطة اللايقينية وموضع المواد الـ ٨ الأعلى تصنيفاً.

٤. الاستنتاجات والتوصيات

قدمت هذه الدراسة إطاراً سلساً وشفّافاً لاستقصاء أنصاف نواقل ثنائية الأبعاد مناسبة لترانزستورات التأثير الحقلي FET عبر الجمع بين فلترة قاعدة البيانات C2DB، ومجموعة صغيرة ومتسقة من حسابات QE المرجعية لعدد من المواد، مُعايرة باستخدام نموذج ridge، تصنيف متعدد المعايير، وتحليل bootstrap للايقينية. أوضحت النتائج أن نهجاً بسيطاً وقابلاً للتفسير كالذي تم اتباعه بإمكانه إنتاج مجموعة نهائية مقبولة، عبر الانتقال من الاستقصاء المعني بفجوة الطاقة لوحدها والأخذ بالاعتبار للكتلة المختزلة، السماكة، واستقرار التكهن في آن معاً. يُعتبَر الإسهام الأساسي لهذا البحث استراتيجية واضحة وقابل لإعادة الإنتاج من أجل تضييق فضاء مُرشَّحات كبير إلى مجموعة صغيرة من المواد الواعدة. في ذات الوقت، يجب النظر إلى الدراسة على أنها إطار فعّال للاستقصاء الأولي بدلاً من كونها توثيقاً نهائياً لأداء التطبيق، إذ إن نموذج المعايرة قد تم تدريبه على مجموعة صغيرة نسبياً من حسابات QE المرجعية، فتكون التكهنات النهائية هي تخمينات للقيم المُعايَرة ولا تماثل تماماً حسابات المبادئ الأولية لكل مادة مُرشَّحة. تقودنا محدودية هذه الدراسة بشكل طبيعي إلى المرحلة المُقبلة من العمل التي تضمن توسيع المجموعة المرجعية، تنويع مجموعة المؤشرات، ومصادقة قيم القائمة النهائية بحسابات ذات كلفة أعلى عند توفر مقدرات حاسوبية أقوى، فضمن هذا السياق، ستؤمن هذه الدراسة مُنطلقاً صلباً لدراسات استقصائية مستقبلية أعمق وأثرى حاسوبياً.

ملاحظة ختامية: تم تنفيذ البحث على حاسوب شخصي منزلي، واستغرق البحث حوالي ثلاثة أشهر.

٥. المراجع

GIANNOZZI, P.; BASEGGIO, O.; BONFÀ, P.; BRUNATO, D.; CAR, R.; CARNIMEO, I.; CAVAZZONI, C.; DE GIRONCOLI, S.; DELUGAS, P.; FERRARI RUFFINO, F.; FERRETTI, A. 2020, *Quantum ESPRESSO toward the exascale*. *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 152, N.15.

GJERDING, M.N.; TAGHIZADEH, A.; RASMUSSEN, A.; ALI, S.; BERTOLDO, F.; DEILMANN, T.; KNØSGAARD, N.R.; KRUSE, M.; LARSEN, A.H.; MANTI, S.; PEDERSEN, T.G. 2021, *Recent progress of the computational 2D materials database (C2DB)*. *2D Materials*, Vol. 8, N.4, p.044002.

HAASTRUP, S.; STRANGE, M.; PANDEY, M.; DEILMANN, T.; SCHMIDT, P.S.; HINSCHE, N.F.; GJERDING, M.N.; TORELLI, D.; LARSEN, P.M.; RIIS-JENSEN, A.C.; GATH, J. 2018, *The Computational 2D Materials Database: high-throughput modeling and discovery of atomically thin crystals*. *2D Materials*, Vol. 5, N.4, p.042002.

HOERL, A.E.; KENNARD, R.W. 1970, *Ridge regression: Biased estimation for nonorthogonal problems*. *Technometrics*, Vol. 12, N.1, pp 55-67.

HOHENBERG, P.; KOHN, W. 1964, *Inhomogeneous electron gas*. *Physical Review*, Vol. 136, N.3B, p.B864.

JAMES, G. 2013, *An introduction to statistical learning with applications in R*.

JOEL, L.O.; DOORSAMY, W.; PAUL, B.S. 2025, *A comparative study of imputation techniques for missing values in healthcare diagnostic datasets*. *International Journal of Data Science and Analytics*, Vol. 20, N.7, pp 6357-6373.

KIM, K.S.; KWON, J.; RYU, H.; KIM, C.; KIM, H.; LEE, E.K.; LEE, D.; SEO, S.; HAN, N.M.; SUH, J.M.; KIM, J. 2024, *The future of two-dimensional semiconductors beyond Moore's law*. *Nature Nanotechnology*, Vol. 19, N.7, pp 895-906.

KOHN, W.; SHAM, L.J. 1965, *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*. *Physical Review*, Vol. 140, pp A1133-A1138.

LI, W.; SHEN, H.; QIU, H.; SHI, Y.; WANG, X. 2024, *Two-dimensional semiconductor transistors and integrated circuits for advanced technology nodes*. *National Science Review*, Vol. 11, N.3, p.nwae001.

LIU, M.; PENG, L.M. 2024, *Emerging materials and transistors for integrated circuits*. *National Science Review*, Vol. 11, N.3, p.nwae040.

PETER, Y.U.; CARDONA, M. 2010, *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*.

VARIVODA, D.; DONG, R.; OMEE, S.S.; HU, J. 2023, *Materials property prediction with uncertainty quantification: A benchmark study*. *Applied Physics Reviews*, Vol. 10, N.2.

YANG, J.; FALLETTA, S.; PASQUARELLO, A. 2023, *Range-separated hybrid functionals for accurate prediction of band gaps of extended systems*. *npj Computational Materials*, Vol. 9, N.1, p.108.

ZENG, S.; LIU, C.; ZHOU, P. 2024, *Transistor engineering based on 2D materials in the post-silicon era*. *Nature Reviews Electrical Engineering*, Vol. 1, N.5, pp 335-348.