

Investigation of Graphene and Silicene-DNA nanostructures: DNA Sensing

Saeedeh Mohammadi¹, Mohammad Esmailpour^{*1}, Farhad Khoeini²

¹Department of Physics, Faculty of Science, Azarbaijan Shahid Madani University, 53714-161, Tabriz, Iran

²Department of Physics, University of Zanjan, 45195-313, Zanjan, Iran

Received: 27.08.2019 Final revised: 26.02.2020 Accepted: 12.02.2020

[Doi link: 10.22055/JRMBS.2020.15567](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2020.15567)

Abstract

In this paper, the electrical transport of graphene and silicene nanostructures connected to two semi-infinite graphene and silicene electrodes have been investigated. In these structures, we created nanopores and passed the DNA molecule through the nanopore. Using the Green's Function method and Tight binding approximation, two types of systems with zigzag edges in graphene and silicene have been investigated. By connecting the nanoribbons to the metal electrodes, the created current passes from the nanopore and DNA, from the left to the right. This electric current flow increases the system's sensitivity to the organic DNA bases. We have introduced a new scheme for DNA sequencing.

Keywords: Nanoribbon graphene and silicene, DNA molecule, Electrical properties, Green's function method

* Corresponding Author: esmailpour@azaruni.v.ac.ir



بررسی نانوساختارهای گرافن و سیلیسین-DNA به عنوان حسگر DNA

سعیده محمدی¹، محمد اسماعیل پور^{1*}، فرهاد خوئینی²

¹گروه فیزیک، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز، ایران

²گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران

دریافت: 1398/06/05 ویرایش نهائی: 1398/12/07 پذیرش: 1398/11/23

Doi link: [10.22055/JRMBS.2020.15567](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2020.15567)

چکیده

در این مقاله ترابرد الکتریکی نانوساختارهای گرافن و سیلیسین متصل شده به دو الکتروود نیمه بینهایت نانونوار گرافن و سیلیسین بررسی شده است. در این ساختارها نانوحفره ایجاد کرده و مولکول DNA را از نانو حفره عبور دادیم. با استفاده از روش تابع گرین و تقریب تنگ‌بست، دو نوع سامانه با لبه‌های زیگزاگ در گرافن و سیلیسین مورد بررسی قرار گرفته است. با اتصال نانونوارها به الکتروودهای فلزی جریان ایجاد شده از سمت چپ به راست از نانوحفره و DNA عبور می‌کند. این عبور جریان الکتریکی باعث افزایش حساسیت سیستم به بازهای آلی DNA می‌شود. ما یک طرح جدید برای تعیین توالی DNA ارائه نمودیم.

کلیدواژگان: نانونوار گرافنی و سیلیسینی، مولکول DNA، ویژگی‌های الکتریکی، روش تابع گرین

مقدمه

صنایع الکترونیک نیاز به ماده نیم‌رسانا با گاف انرژی قابل کنترل است. یکی از روش‌های ایجاد گاف انرژی در سامانه و هدایت الکترون در یک جهت، تبدیل گرافن به نانونوارهای گرافنی است [14]. سیلیسین هم مشابه گرافن یک ساختار شش ضلعی دارد اما به دلیل بلند بودن طول پیوند اتم‌های سیلیکون، این ماده دارای ساختار دو بعدی خمیده می‌باشد [15]. علاوه بر تفاوت ذکر شده، سیلیسین دارای برهم‌کنش اسپین-مدار نسبتاً بزرگ می‌باشد که این ویژگی باعث شده است برای مطالعه اثرهای کوانتومی مانند عایق‌های توپولوژیکی¹ مورد استفاده قرار گیرد [16] و همچنین این امر موجب ایجاد گاف انرژی در ساختار سیلیسین و کاربرد

در دهه‌های گذشته مطالعه بر روی نانوحفره‌ها مورد توجه قرار گرفته است و همچنین تعامل غشاهای نانوذرات با مولکول‌های زیستی دارای کاربردهای فراوانی از جمله توسعه بیوسنسورها [1]، روش سریعی برای تعیین توالی ژنوم [2] و انتقال دارو [3] می‌باشند. یکی از این ساختارها ترکیبی از نانوحفره‌های مواد دو بعدی مانند گرافن [4] و سیلیسین [5] با DNA می‌باشد. اخیراً تحقیقات فراوانی به صورت تجربی [6-10] و مطالعه‌های تئوری [11-13] در مورد ویژگی‌های حسگر DNA صورت گرفته است. گرافن دارای یک پیکربندی شش ضلعی با گاف انرژی صفر است. در

* نویسنده مسئول: esmailpour@azaruniv.ac.ir

¹ . topological insulators



یک‌بعدی نامنظم، استخوان ماهی و شبکه نردبانی می‌تواند داشته باشد [26]. در مورد نانوساختارهای گرافن-DNA مطالعاتی صورت گرفته است اما با وجود اهمیت فراوان این موضوع ارائه ساختارهای جدید برای توالی‌سنجی DNA هنوز هم نیازمند مطالعات بیشتری می‌باشد. در این مقاله، هدف اصلی ما ارائه ساختار جدید برای تعیین توالی DNA بر پایه نانوساختارهای گرافن و سیلیسین می‌باشد که این مطالعه در مورد نانوساختارهای سیلیسین-DNA فقط در مرجع‌های 5 و 27 مطالعه شده است که با ساختار ارائه شده در این مقاله متفاوت می‌باشد. صادقی و همکاران [5]، به مطالعه جریان عبوری از نانوحفره سیلیسینی پرداخته‌اند که هر باز آلی جداگانه در داخل نانوحفره قرار داده می‌شود. همچنین آنها نشان داده‌اند که جریان عبوری برای هر باز آلی متفاوت است. اما اثر اسپین-مدار ذاتی، راشبا و میدان الکتریکی در نظر گرفته نشده است. مرجع [27] به مطالعه یک نانونوار سیلیسینی، که بازهای آلی با برهم‌کنشی به این نانونوار متصل می‌باشند، مطالعه شده است. آنها نشان دادند که برهم‌کنش گوانین با سیلیسین قوی‌تر از بازهای آلی دیگر است ولی از تکنولوژی نانوحفره استفاده نشده است. در این مقاله با مدل تنگ‌بست و رهیافت تابع گرین، به مطالعه ویژگی‌های الکتریکی مانند: چگالی حالت‌ها و عبوردهی الکترون در نانونوارهای گرافنی و سیلیسینی زیگزاگ متصل به دو الکتروود فلزی با ایجاد یک نانوحفره و عبور DNA دو رشته‌ای مدل نردبانی با توالی rac خواهیم پرداخت. وقتی این سامانه به دو الکتروود نیمه‌متناهی متصل می‌شود جریانی از سمت چپ به راست ایجاد می‌شود که این جریان باید از

سیلیسین در اسپیترونیک و الکترونیک در مقیاس نانو شده است. تحقیقات انجام شده در مورد سیلیسین نشان می‌دهند که می‌توان پهنای گاف انرژی را با استفاده از اعمال میدان الکتریکی عمود بر ورقه سیلیسینی کنترل کرد. ساختار الکترونی گرافن [17] و سیلیسین را می‌توان در تقریب تنگ‌بست به دست آورد. محاسبات تنگ‌بست نشان می‌دهد پهنای گاف انرژی به هندسه لبه‌ها و عرض نانونوارها بسیار حساس است [18-19]. همچنین سیلیسین به دلیل داشتن پیوند sp^3 می‌تواند پیوند قوی‌تری با بازهای آلی DNA انجام دهد. به همین دلیل برای انتخاب بازهای آلی DNA می‌توان از این ماده استفاده نمود [20].

مولکول DNA دو رشته‌ای، از دو رشته مارپیچی از بازهای آلی شامل گوانین (G)، سیتوزین (C)، آدنین (A) و تیمین (T) با پیوندهای هیدروژنی که دو به دو (آدنین با تیمین و گوانین با سیتوزین) به یکدیگر متصل هستند، تشکیل شده است [21-22]. مطالعات اخیر، تأثیر DNA بر روی نانونوارهای گرافنی را نشان داده است [23]. در تحقیق‌های انجام شده با روش‌های تجربی، روش‌های مختلفی برای تعیین توالی DNA ارائه شده است که شامل عبور DNA از نانوحفره‌های گرافن، نانوشکاف‌ها و نانونوارها و جذب فیزیکی نانوساختارهای گرافن-DNA می‌باشند [24]. روش‌هایی که برای توسعه تعیین توالی اسید دئوکسی‌ریبونوکلئیک (DNA)، تشخیص ایمنی مواد غذایی، تحلیل محیط زیست، تشخیص بالینی و ژن درمانی به کار می‌روند، بسیار اهمیت دارد [25]. مطالعات بر پایه مدل تنگ‌بست نشان می‌دهند که رسانش الکتریکی مولکول DNA الگوهای متفاوتی مانند شبکه‌های

که در معادله 1، $H_{DL(DR)}$ هامیلتونی اتصال الکترون در چپ (راست) با قطعه مرکزی می‌باشد که به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$H_{DL(DR)} = t_{DL(DR)} (|0(N)\rangle\langle 1(N+1)| + |1(N+1)\rangle\langle 0(N)|), \quad 4$$

در معادله 1، H_D هامیلتونی قطعه مرکزی است که برای نانونوارهای گرافنی به شکل زیر می‌باشد:

$$H_G = \sum_{j=1}^N \varepsilon_j |j\rangle\langle j| + \sum_{j=1}^{N-1} t_{j,j+1} |j\rangle\langle j+1| + t_{j+1,j} |j+1\rangle\langle j|, \quad 5$$

که در معادله بالا $t = -3(eV)$ انرژی جهش بین اتم‌ها و ε_{jD} انرژی جایگاهی اتم‌ها هستند.

هامیلتونی قطعه مرکزی برای نانونوار سیلیسینی به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$H_{Si} = -t \sum_{\langle ij \rangle \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} v_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} + \sum_{i,\alpha} V_i \eta_i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} + M \sum_{i,\alpha} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{i\beta} - i \frac{2}{3} \lambda_R \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \mu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger (\sigma \times d_{ij}^0)^z c_{j\beta} \quad 6$$

در معادله 4 متغیرها به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$c_{i\alpha}$ ($c_{i\alpha}^\dagger$) اپراتورهای فنا (خلق) الکترون‌ها در سایت i با اسپین α ، نمادهای $\langle ij \rangle$ و $\langle\langle ij \rangle\rangle$ برای همسایه اول و دوم، $\lambda_{SO} = 3/9(eV)$ [28] قدرت برهم‌کنش اسپین-مدار ذاتی، $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ ماتریس پائولی، $v_{ij} = \pm 1$ برای حرکت ساعتگرد و پادساعتگرد انرژی جهش، $V_i = 2leE_z$ پتانسیل الکتریکی که $2l = 0,46^\circ A$ [28] و میدان الکتریکی

نانوحفره داخل نانونوارهای مورد مطالعه عبور کند. با وجود بازهای آلی DNA در داخل نانوحفره، عبوردهی الکترون در هر باز آلی متفاوت خواهد بود. این امر موجب تعیین توالی DNA خواهد بود.

روش و مدل سازی

در این قسمت به مطالعه مدل تنگ‌بست و روش تابع گرین غیرتعدالی خواهیم پرداخت. محاسبات ما با نرم افزار متلب کدنویسی شده است.

1 مدل تنگ‌بست

در روش تنگ‌بست هدف به دست آوردن ساختار نواری ماده مورد نظر می‌باشد. به این معنی که باید حالت‌های الکترونی را به عنوان تابعی از بردار موج k بررسی کرد. بنابراین ابتدا به تابع موج برای الکترون‌ها نیاز است. در نتیجه از طرح تک الکترونی استفاده کرده و تابع موج بلوری را بر اساس تناوب بلور تعریف می‌کنیم. ویژه توابع در یک جامد به صورت ترکیب خطی از توابع بلاخ تعریف می‌شوند:

$$\Psi_j(k, r) = \sum_{j'} C_{jj'}(k) \phi_j(k, r) \quad 1$$

مقادیر ویژه سیستم با استفاده از حل معادله شرودینگر و هامیلتونی سیستم H تعریف می‌شوند:

$$E_j(k) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle} = \frac{\int \Psi_j^*(k, r) H \Psi_j(k, r) dr}{\int \Psi_j^*(k, r) \Psi_j(k, r) dr} \quad 2$$

با استفاده از مدل تنگ‌بست و تقریب همسایه اول، هامیلتونی قطعه (نانونوارهای گرافنی و سیلیسینی) متصل به دو الکترون فلزی به صورت زیر می‌باشد:

$$H = H_L + H_{DL} + H_D + H_{DR} + H_R, \quad 3$$

گرافن را با پیوند واندروالسی $(eV) = 0,35$ در نظر می‌گیریم [29].

روش تابع گرین غیرتعدالی

برای مطالعه ترابرد و چگالی حالت‌های الکترون سامانه مورد مطالعه از روش تابع گرین استفاده می‌شود. تابع گرین در زیر فضای قطعه به صورت زیر است:

$$G_S(E) = [(E + i\eta)I - H_D - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \quad 10$$

در رابطه بالا η یک مقدار خیلی کوچک و $\Sigma_{L(R)}$ خود انرژی‌های الکترون چپ و راست، به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\Sigma_L = H_{01}^\dagger g_{0,0}^L H_{01} \quad 11$$

$$\Sigma_R = H_{1,2}^\dagger g_{M+1,M+1}^R H_{12}^\dagger \quad 12$$

که $g_{M+1,M+1}^R$ و $g_{0,0}^L$ عبارتند از:

$$g_{0,0}^L = [(E + i\eta)I - H_{0,0} - H_{-1,0}^\dagger \tilde{T}]^{-1}, \quad 13$$

$$g_{M+1,M+1}^R = [(E + i\eta)I - H_{0,0} - H_{-1,0}^\dagger T]^{-1}, \quad 14$$

M تعداد سلول‌های واحد در سامانه است. $H_{0,0}$ و $H_{-1,0}^\dagger$ به ترتیب هامیلتونی سلول واحد و هامیلتونی بین دو سلول واحد در الکترودها هستند، در معادلات بالا T و \tilde{T} از روابط زیر به دست می‌آید [30-33]:

$$T = t_0 + \tilde{t}_0 t_1 + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 t_2 + \dots + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 \tilde{t}_2 \dots t_n, \quad 15$$

$$\tilde{T} = \tilde{t}_0 + t_0 \tilde{t}_1 + t_0 t_1 \tilde{t}_2 + \dots + t_0 t_1 t_2 \dots \tilde{t}_n, \quad 16$$

$$t_i = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}^2, \quad 17$$

$E_z = 40$ (mV/l) عمود بر ورقه نانونوار سیلیسینی، $n_i = \pm 1$ برای زیر شبکه A و B ، شدت میدان تبدالی $M = 2 \lambda_{so}$ شدت اسپین-مدار راشبا با $\lambda_R = 0,7$ (meV) می‌باشد.

هامیلتونی DNA دو رشته‌ای در مدل تنگ‌بست به صورت زیر می‌باشد:

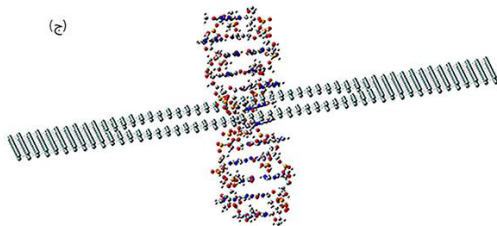
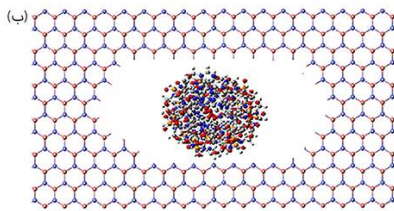
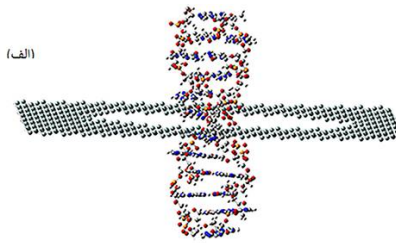
$$H_{s1} = \varepsilon_G b_1^\dagger b_1 + \sum_{i=n-2}^n \varepsilon_G b_i^\dagger b_i + \sum_{i=2}^{j+1} \varepsilon_i b_i^\dagger b_i + t_{\parallel} \sum_{i=1}^{n-1} [b_i^\dagger b_{i+1} + h.c.], \quad 7$$

$$H_{s2} = \varepsilon_c c_{n+1}^\dagger c_{n+1} + \sum_{i=N-2}^N \varepsilon_c c_i^\dagger c_i + \sum_{i=n+2}^{n+j+1} \varepsilon_c c_i^\dagger c_i + t_{\parallel} \sum_{i=n+1}^{N-1} [c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.], \quad 8$$

$$H_{s1+s2} = t_{\perp} \sum_{i=1}^n [b_i^\dagger c_i + h.c.], \quad 9$$

در معادلات بالا متغیرها به این صورت می‌باشند که $b_{1,i}^\dagger$ و $b_{1,i}$ اپراتورهای خلق و فنا الکترون‌ها در اولین رشته DNA در سایت i و c_i^\dagger (c_i) همین نقش را در رشته دوم DNA دارد، $t_{\parallel} = 0,35$ (eV) انرژی جهش بین دو باز آلی مجاور هم، مانند $A-T$ و $C-G$ و $t_{\perp} = 0,005$ (eV) عمود برهم مانند $A-T$ و $C-G$ است [29]. $(\varepsilon_A, \varepsilon_T, \varepsilon_C, \varepsilon_G) = (8,24, 9,14, 8,85, 7,75)$ انرژی‌های جایگاهی بازهای آلی در DNA و جفت پیوندهای آن هستند [29]. DNA دو رشته‌ای را از نانوحفره ایجاد شده در نانونوار گرافنی و سیلیسینی از قسمت $C-G$ عبور می‌دهیم و اتصال بین DNA و

اتم‌های $C-C$ برابر $t = -3 (eV)$ [34] و اتم‌های $Si-Si$ برابر با $t = 1.6 (eV)$ است. یک تهی جایی با قراردادن مقدار بسیار بزرگی برای \mathcal{E}_{FD} در معادله 3 امکان‌پذیر است. بنابراین الکترون‌ها پراکنده شده و با احتمال کمی از این ناحیه عبور می‌کنند. در مرکز هر دو نانونوار گرافنی و سیلیسینی یک نانوحفره به قطر nm 2/44 به شکل شش ضلعی ایجاد می‌کنیم و DNA دو رشته‌ای را از این نانونوارها عبور می‌دهیم (شکل 1).



شکل 1. نمایی از قطعه گرافنی و سیلیسینی در حضور نانوحفره و DNA. (الف) قطعه گرافنی از دید روبرو، (ب) قطعه سیلیسینی از دید بالا که اتم‌های آبی و صورتی زیر شبکه‌های سیلیسین هستند، (ج) قطعه سیلیسینی از دید روبرو را نشان می‌دهد.

شکل 1 قطعه گرافنی و سیلیسینی در حضور نانوحفره و DNA متصل به الکترودهای فلزی از دید روبرو برای

$$\tilde{t}_i = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} \tilde{t}_{i-1}, \quad 18$$

$$t_0 = [(E + i\eta)I - H_{0,0}]^{-1} H_{-10}^\dagger, \quad 19$$

$$\tilde{t}_0 = [(E + i\mu)I - H_{0,0}]^{-1} H_{-10}, \quad 20$$

با استفاده از معادلات بالا عبوردهی الکترون سامانه به شکل زیر می‌باشد.

$$T(E) = Tr[\Gamma_L G_S^\dagger \Gamma_R G_S], \quad 21$$

$$\Gamma_{L(R)}(E) = i [\Sigma_{L(R)}^\dagger(E) - \Sigma_{L(R)}(E)]. \quad 22$$

همچنین رابطه چگالی حالت‌های الکترون به شکل زیر بیان می‌شود:

$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(Tr(G_S(E))), \quad 23$$

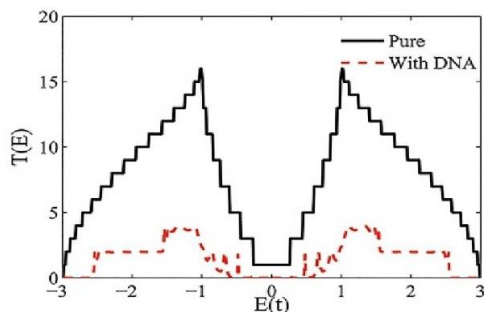
در نانونوار سیلیسینی برهم‌کنش اسپین-مدار لحاظ می‌شود که دارای قطبش اسپینی به صورت زیر می‌باشد:

$$P = \frac{G^\uparrow - G^\downarrow}{\sum_{\alpha \in \uparrow, \downarrow} G^\alpha} \quad 24$$

بحث و بررسی نتایج

در این قسمت به بررسی ویژگی‌های الکتریکی نانوساختارهای گرافن و سیلیسین با حضور DNA می‌پردازیم. برای نانونوارهای گرافن با لبه زیگزاگ تعداد $N_A = 38$ و $N_z = 32$ اتم و نانونوار سیلیسینی با لبه زیگزاگ با $N_z = 32$ در نظر گرفتیم. این سامانه تشکیل شده از نانونوارهای گرافنی دارای رفتار فلزی می‌باشند. انرژی جایگاهی برای اتم کربن و سیلیکون صفر و انرژی جهش بین نزدیکترین همسایگی در

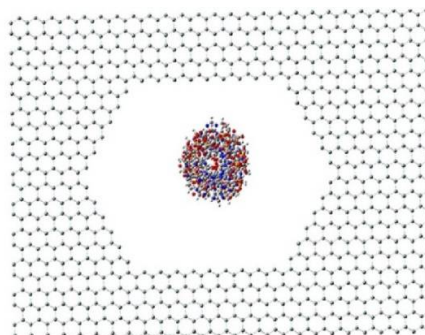
نانوحفره، احتمال عبور الکترون و احتمال انعکاس الکترون از نانوحفره تغییر می‌کند. بنابراین الکترون‌ها با احتمال کمی از این ناحیه عبور می‌کنند. با ایجاد یک نانوحفره بزرگ در نانونوارهای گرافنی و عبور DNA از این سامانه، یک گاف انرژی در اطراف انرژی فرمی ایجاد می‌شود و سامانه را از حالت فلز به نیم‌رسانا تبدیل می‌کند و عبوردهی الکترون به دلیل پراکندگی الکترون در سامانه، کاهش می‌یابد. در نمودار شکل 3، تعداد کانال‌های عبور در نانونوار گرافنی با DNA برابر با 4 و گاف انرژی در حدود $E_g = 0,92 (t)$ ایجاد می‌شود. در این نمودار گستره انرژی $-3t$ تا $3t$ در نظر گرفته شده است.



شکل 3. نمودار تغییرات عبوردهی الکترون برحسب انرژی برای نانونوار گرافنی زیگزاگ. رنگ مشکی، نوار گرافنی خالص و نمودار رنگ قرمز خط چین، نوار گرافنی با نانوحفره و DNA را نشان می‌دهد.

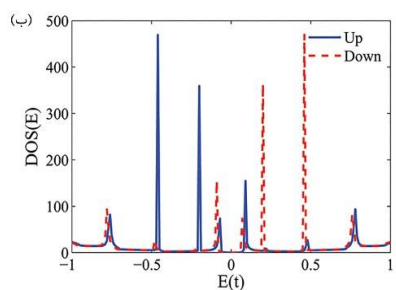
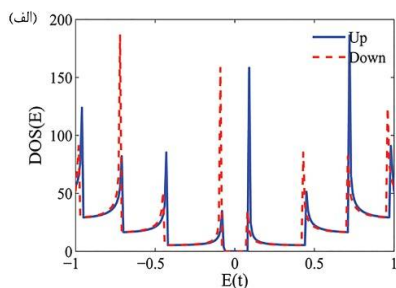
شکل 4 تغییرات چگالی حالت‌های نانونوار گرافنی زیگزاگ را نشان می‌دهد. در این نمودار پهنای نانونوار $N_z = 32$ است. نمودار رنگ مشکی، نوار گرافنی خالص و نمودار رنگ قرمز خط چین، نوار گرافنی با نانوحفره و DNA متصل به الکترودهای نوار گرافنی را نمایش می‌دهد. در این نمودار گستره انرژی $-3t$ تا $3t$ در نظر گرفته شده است. چگالی حالت‌های الکترون در انرژی فرمی برای نانونوار گرافنی، مخالف صفر است

قطعه گرافنی (شکل 1 الف) و از دید بالا برای قطعه سیلیسینی (شکل 1 ب) را نشان می‌دهد. همچنین شکل 2، قطعه نانونوار گرافنی با لبه زیگزاگ با نانوحفره ایجاد شده و عبور DNA را نشان می‌دهد. ما DNA دو رشته‌ای با عرض 2 nm و طول $3,4 \text{ nm}$ شامل 10 جفت نوکلئید با مجموع 20 اتم در نظر می‌گیریم. در یک زنجیر DNA بازهای آلی دو به دو باهم اتصال دارند.



شکل 2. نمایی از قطعه گرافنی در حضور نانوحفره و DNA با لبه زیگزاگ.

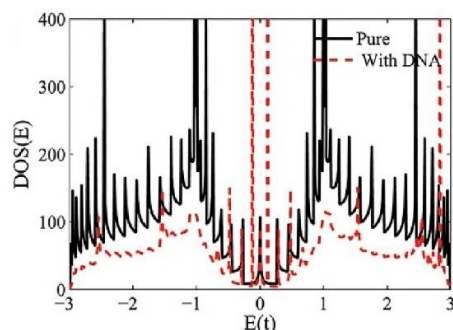
حال ویژگی‌های الکتریکی از جمله چگالی حالت‌ها و عبوردهی الکترون را برای سامانه ذکر شده در شکل 2، متصل به دو الکتروده گرافنی را بررسی می‌کنیم. شکل 3 نمودار تغییرات عبوردهی الکترون برای نانونوار گرافنی زیگزاگ برحسب انرژی را نشان می‌دهد که در آن $N_z = 32$ و نمودار رنگ قرمز خط چین، نانونوار گرافنی با نانوحفره و DNA متصل به الکترودهای گرافنی نشان می‌دهد. در این شکل، مشاهده می‌شود عبوردهی الکترون در نانونوارهای گرافنی خالص متصل به الکترودها، در انرژی فرمی صفر نیست. بنابراین این سامانه فلز است. همچنین نانونوار گرافنی زیگزاگ خالص، 16 کانال عبوری الکترون دارد. با توجه به اندازه



شکل 5. نمودار تغییرات عبوردهی الکترون برحسب انرژی در سیلیسین. نمودار الف، برای نانونوار سیلیسینی خالص و نمودار ب، برای نانونوار سیلیسینی همراه با DNA می‌باشد. خط‌های آبی رنگ اسپین بالا و خط‌چین‌های قرمز رنگ اسپین پایین را نشان می‌دهند.

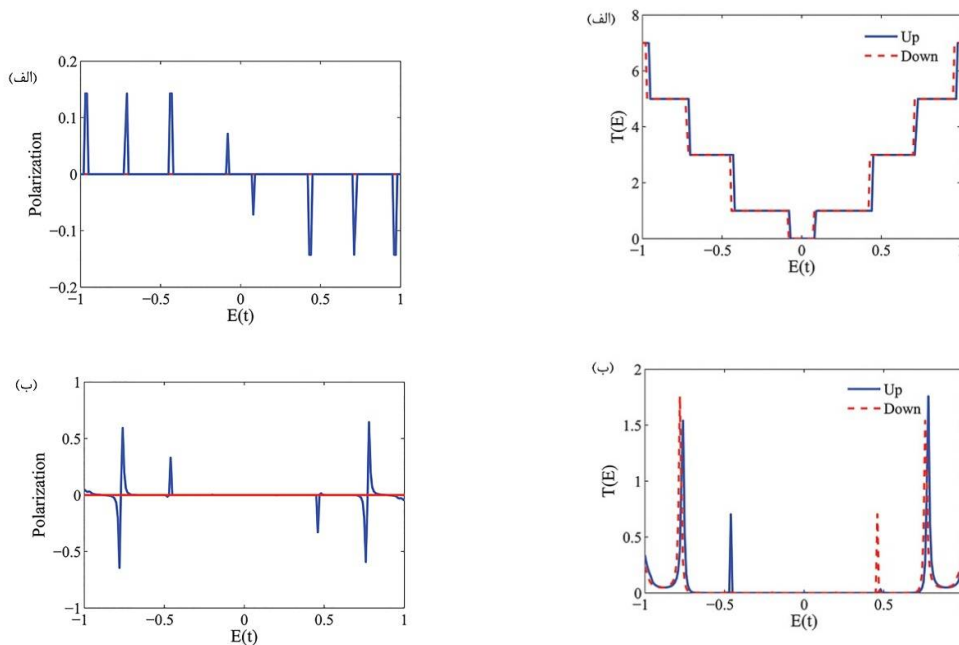
این گاف انرژی برای نانونوار سیلیسینی خالص $E_g = 0,7 (t)$ و در حضور DNA برابر با $E_g = 0,08 (t)$ می‌باشد. در شکل 5 الف مربوط به نانونوار سیلیسینی خالص، تعداد کانال‌های عبور در محدوده مورد مطالعه، 7 می‌باشد ولی با ایجاد یک نانوحفره و عبور DNA از این نانونوار، الکترون‌ها پراکنده می‌شوند و احتمال عبور الکترون کاهش می‌یابد در این حالت تعداد کانال‌های عبور الکترون به 2 کاهش می‌باشد. همان‌طور که از نمودار 5 ب مشخص است، با حضور DNA به دلیل پراکندگی الکترون‌ها و کاهش احتمال عبور الکترون گاف انرژی بزرگتر شده است.

در نتیجه سامانه رفتار فلزی دارد. قله‌های ایجاد شده در نمودار چگالی حالت‌های الکترون، بیانگر تکینگی‌های ون‌هوف و نشان دهنده منطبق بودن عبوردهی الکترون بر ویژه‌مقادیر انرژی قطعه می‌باشد. در حضور نانوحفره و DNA چگالی حالت‌های الکترون و همچنین کانال‌های الکترونی کاهش می‌یابند.



شکل 4. نمودار تغییرات چگالی حالت‌های نانونوار گرافنی زیگزاگ. نمودار رنگ مشکی، نوار گرافنی خالص و نمودار رنگ قرمز خط‌چین، نوار گرافنی با نانوحفره و DNA متصل به الکترودهای نوارهای گرافنی را نشان می‌دهد.

در ادامه به بررسی ویژگی‌های الکتریکی مانند عبوردهی الکترون، چگالی حالت‌های الکترون و قطبش اسپین در نانونوار سیلیسینی زیگزاگ با اعمال میدان الکتریکی عمود بر نوار و میدان تبادل (با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار ذاتی و راشبا) و همراه با حضور نانوحفره و DNA می‌پردازیم. شکل 5 نمودار عبوردهی الکترون برحسب انرژی فرودی را نشان می‌دهد. نمودار الف، برای نانونوار سیلیسینی خالص و نمودار ب، برای نانونوار سیلیسینی با DNA می‌باشد. در این شکل خطوط آبی رنگ برای اسپین بالا و خط‌چین قرمز رنگ برای اسپین پایین نوارها می‌باشند. در این شکل مشاهده می‌شود که سیستم در نزدیکی اطراف انرژی فرمی دارای گاف انرژی می‌باشد.



شکل 7. تغییرات قطبش اسپین برحسب انرژی فرودی برای نانونوار سیلیسینی زیگزاگ. نمودار الف، نمودار الف، برای نانونوار سیلیسینی خالص و نمودار ب، برای نانونوار سیلیسینی با DNA را نشان می‌دهد.

شکل 6. تغییرات چگالی حالت‌های نانونوار سیلیسینی زیگزاگ. نمودار الف، برای نانونوار سیلیسینی زیگزاگ خالص و نمودار ب، برای نانونوار سیلیسینی همراه با نانوحفره و DNA و نمودارهای رنگ آبی، نانونوار سیلیسینی با اسپین بالا و نمودارهای رنگ قرمز خطچین، نانونوارهای سیلیسینی با اسپین پایین متصل به الکترودهای سیلیسینی را نشان می‌دهد.

شکل 7، نمودار قطبش اسپین برحسب انرژی فرودی الکترون را برای نانونوار سیلیسینی نشان می‌دهد. شکل (7 الف و ب) به ترتیب بیانگر قطبش اسپین مربوط به نانونوار سیلیسینی خالص و همراه با حضور DNA می‌باشد. در نمودار 7 الف، مشاهده می‌شود پیک‌ها روند ثابتی دارند اما در نزدیکی انرژی فرمی کاهش می‌یابند. همچنین در این شکل مشخص است که اسپین‌ها در حضور DNA کمتر قطبیده شده‌اند. در جدول 1 مقایسه‌ای از مقدار گاف انرژی ایجاد شده در حالت خالص و همراه با DNA برای نانونوار گرافنی لبه زیگزاگ و نانونوار سیلیسینی زیگزاگ بیان شده است.

شکل 6 نمودار چگالی حالت‌های الکترون بر حسب انرژی فرودی برای نانونوار سیلیسینی زیگزاگ را نشان می‌دهد. شکل 6 الف مربوط به نانونوار سیلیسینی خالص و شکل 6 ب مربوط به نانونوار سیلیسینی همراه با DNA می‌باشند که خط‌های آبی رنگ، حالت اسپین بالا و خط‌چین‌های قرمز رنگ، حالت اسپین پایین را نمایش می‌دهد. در شکل 6 الف و ب مشاهده می‌شود که در اطراف انرژی فرمی چگالی حالت‌ها برابر صفر می‌باشد و همچنین در انرژی صفر، وقتی نانونوار سیلیسینی همراه با DNA می‌باشد، گاف انرژی بیشتری وجود دارد.

contact transistor for DNA detection and characterization, *Nanotechnology* **26** (2015) 134005. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/26/13/134005>

[3] L. Zhang, Zh. Lu, Q. Zhao, J. Huang, H. Shen, Zh. Zhang, Enhanced Chemotherapy Efficacy by Sequential Delivery of siRNA and Anticancer Drugs Using PEI-Grafted Graphene Oxide, *Nano Micro, Small* **7** (2011) 460-464. <https://doi.org/10.1002/sml.201001522>

[4] S. Zeng, L. Chen, Y. Wang, J. Chen, Exploration on the mechanism of DNA adsorption on graphene and graphene oxide via molecular simulations, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **48** (2015) 275402. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/48/27/275402>

[5] H. Sadeghi, S. Bailey, C.J. Lambert, Silicene-based DNA nucleobase sensing, *Applied Physics Letters*, **104** (2014) 103104. <https://doi.org/10.1063/1.4868123>

[6] Ch. Lu, P.J. Huang, B. Liu, Y. Ying, J. Liu, Comparison of Graphene Oxide and Reduced Graphene Oxide for DNA Adsorption and Sensing, *Langmuir* **32** (2016) 10776-10783. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b03032>

[7] A.K.A. Jaini, L.B. Hughes, M.M. Kitimet, K.J. Ulep, M.C. Leopold, C.A. Parish, Halogen Bonding Interactions for Aromatic and Nonaromatic Explosive Detection, *American Chemical Society Sensors* **4** (2019) 286-397. <https://doi.org/10.1021/acssensors.8b01246>

[8] J.P. Fried, J.L. Swett, X. Bian, J.A. Mol, Challenges in fabricating graphene nanodevices for electronic DNA sequencing, *Materials Research Society Communications*, **8** (2018) 703-711. <https://doi.org/10.1557/mrc.2018.187>

[9] S.J. Heerema, L. Vicarelli, S. Pud, R.N. Schouten, H.W. Zandbergen, C. Dekker, Probing DNA Translocations with Inplane Current Signals in a Graphene Nanoribbon with a Nanopore, *American Chemical Society Nano*, **12** (2018) 2623-2633. <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b08635>

مقدار گاف انرژی بر حسب eV	نانونوار گرافنی لبه زیگزاگ	نانونوار سیلیسینی لبه زیگزاگ
سیستم خالص	0	0,08
سیستم با DNA	0,92	0,7

جدول 1. مقایسه گاف‌های انرژی ایجاد شده در دو سیستم مورد مطالعه.

بحث و نتیجه‌گیری

در این تحقیق، چگالی حالت‌ها و عبوردهی الکترون در نانو ساختارهای گرافن و گرافن-DNA، سیلیسین و سیلیسین-DNA بررسی شد. نانونوار گرافنی با پهنای $N_z = 32$ ، متصل به الکترودهای فلزی، یک رفتار فلزی دارد و بدون گاف انرژی است. با ایجاد یک نانوحفره به قطر $2/44 \text{ nm}$ به شکل شش ضلعی در سامانه و عبور DNA از این نانوحفره، یک گذار فاز فلز-نیم‌رسانا رخ داده و چگالی حالت‌ها و عبوردهی الکترون، به دلیل پراکندگی الکترون از لبه‌ها کاهش می‌یابد. در نانونوار سیلیسینی با پهنای $N_z = 32$ ، که دارای گاف انرژی می‌باشد با ایجاد نانوحفره و عبور DNA از این سامانه، گاف انرژی افزایش یافته و عبوردهی الکترون کاهش می‌یابد. از این مسئله می‌توان در تعیین توالی DNA استفاده کرد.

مرجع‌ها

- [1] L.X. Fang, J.T. Cao, K.J. Huang, A Sensitive electrochemical biosensor for specific DNA sequence detection based on flower-like VS_2 , graphene and Au nanoparticles signal amplification, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, **746** (2015) 1-8. <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2015.03.026>
- [2] A. Girdhar, Ch. Sathe, K. Schulten, J.P. Leburton, Tunable graphene quantum point

- [17] P.R. Wallace, The Band Theory of Graphite, *Physical Review Journals Archive*, **71** (1947) 622. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
- [18] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, K. Kusakabe, Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge, *Journal of the Physical Society of Japan*, **65** (1996) 1920-1923. <https://doi.org/10.1143/jpsj.65.1920>
- [19] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence, *Physical Review B* **54** (1996) 17954. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.17954>
- [20] T.H. Osborn, A.A. Farajian, Silicene nanoribbons as carbon monoxide nanosensors with molecular resolution, *Nano Research*, **7** (2014) 945-952. <https://doi.org/10.1007/s12274-014-0454-7>
- [21] J.R. Alvarez, D. Skachkov, S.E. Massey, J. Lu, A. Kalitsov, J.P. Velev, Intrinsic Noise from Neighboring Bases in the DNA Transverse Tunneling Current, *Physical Review Applied*, **1** (2014) 034001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.1.034001>
- [22] H. Lodish, A. Berk, Ch.A. Kaiser, M. Krieger, M.P. Scott, A. Bretscher, H. Ploegh, P. Matsudaira, *Molecular Cell Biology*, Biological Sciences, 6th Edition, (2000).
- [23] A. Girdhar, Ch. Sathe, K. Schulten, J.P. Leburton, Graphene quantum point contact transistor for DNA sensing, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **110** (2013) 16748-16753. <https://doi.org/10.1073/pnas.1308885110>
- [24] S.J. Heerema, C. Dekker, Graphene nanodevices for DNA sequencing, *Nature Nanotechnology*, **11** (2016) 127-136. <https://doi.org/10.1038/NNANO.2015.307>
- [25] Y.H. Wang, H.H. Deng, Y. H. Liu, X.Q. Shi, A.L. Liu, H.P. Peng, G.L. Hong, W. Chen, Partially reduced graphene oxide as highly efficient DNA nanoprobe, *Biosensors and Bioelectronics*, **80** (2016) 140-145. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2016.01.052>
- [10] P.T. Kim Loan, D. Wu, Ch. Ye, X. Li, V.Th. Tra, Q. Wei, L. Fu, A. Yu, L.J. Li, Ch. T. Lin, Hall effect biosensors with ultraclean graphene film for improved sensitivity of label-free DNA detection, *Biosensors and Bioelectronics*, **99** (2018) 85-91. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2017.07.045>
- [11] J. Prasongkit, E.F. Martins, F.A.L. de Souza, W.L. Scopel, R.G. Amorim, V. Amornkitbamrung, A.R. Rocha, R.H. Scheicher, Topological Line Defects Around Graphene Nanopores for DNA Sequencing, *Journal of Physical Chemistry C* **122** (2018) 7094-7099. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b00241>
- [12] R. Abadi, M. Izadifar, M. Sepahi, N. Alajlan, T. Rabczuk, Computational modeling of graphene nanopore for using in DNA sequencing devices, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **103** (2018) 403-416. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2018.05.003>
- [13] S. Mohammadi, F. Khoeini, M. Esmailpour, M. Khalkhali, Investigation of electrical properties in AB-Stacked Bilayer Graphene-DNA nanostructures, *Superlattices and Microstructures*, **130** (2019) 182-193. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.04.029>
- [14] Y. W. Son, M.L. Cohen, S.G. Iouie, Energy Gaps in Graphene Nanoribbons, *Physical Review Letters*, **97** (2007) 089901. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.216803>
- [15] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M.C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, G. Le Lay, Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphene like Two-Dimensional Silicon, *Physical Review Letters*, **108** (2012) 155501-155506. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.155501>
- [16] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, D. Akinwande, Silicene field-effect transistors operating at room temperature, *Nature Nanotechnology*, **10** (2015) 227-231. <https://doi.org/10.1038/nnano.2014.325>

- properties of superlattice-graphene nanoribbons, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **48** (2015) 405501. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/48/40/405501>
- [26] G. Cuniberti, L. Craco, D. Porath, C. Dekker, Backbone-induced semiconducting behavior in short DNA wires, *Physical Review B* **65** (2002) 241314. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.241314>
- [27] S. Alesheikh, N. Shahtahmassebi, M. Rezaee Roknabadi, R. Pilevar Shahri, Silicene nanoribbon as a new DNA sequencing device, *Physics Letters A* **382** (2018) 595-600. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.12.010>
- [28] Kh. Shakouri, H. Simchi, M. Esmaeilzadeh, H. Mazidabadi, F.M. Peeters, Tunable spin and charge transport in silicene nanoribbons, *Physical Review B* **92** (2015) 035413. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.035413>
- [29] C.J. Paez, P.A. Schulz, N.R. Wilson, R.A. Romer, Robust signatures in the current-voltage characteristics of DNA molecules oriented between two graphene nanoribbon electrodes, *New Journal of Physics*, **14** (2012) 093049. <https://www.njp.org/doi:10.1088/1367-2630/14/9/093049>
- [30] M.P. Lopez Scancho, J.M. Lopez Sancho, J. Rubio, Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: application to Mo (100), *Journal of Physics F: Metal Physics*, **14** (1984) 1205. <https://doi.org/10.1088/0305-4608/14/5/016>
- [31] T.C. Li, Sh. P. Lu, Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects, *Physical Review B* **77** (2008) 085408. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.085408>
- [32] 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** (1392) 29-39. https://jrmb.scu.ac.ir/article_10714.html
- [33] F. Khoeini, Z. Jafarkhani, M. Khalkhali, Spin transport in a superlattice silicene nanoribbon, *Journal of Research on Many-body Systems*, **7** (1396) 89-98. <https://doi.org/10.22055/JRMBS.2017.17965.1197>
- [34] F. Khoeini, Combined effect of oriented strain and external magnetic field on electrical