Archive of SID

نانومقیاس
سال سوم| شماره چهارم| زمستان ۱۳۹۵

شناسایی مولکول ها با استفاده از گرافین بر پایه ترانزیستور اثر میدان

هاله کردحقی[۱]| سعید شجاعی[۱*]| محمد رضا رضاپور[۲،۳]

۱گروه فوتونیک الکترونیک، پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی ، دانشگاه تبریز، تبریز، آذربایجان شرقی
۲ دانشکده شیمی، موسسه ملی علوم و تکنولوژی، اولسان، کره جنوبی
۳ دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و تکنولوژی پوهانگ، پوهانگ، کره جنوبی

چکیده

در این مقاله نشان خواهیم داد که چگونه مولکول های مختلف را میتوان با استفاده از نانو نوار گرافینی شناسایی کرد. رسانندگی وابستگی شدید به تراز انژری پیشرو و جهت گیری فضایی مولکول ها دارد. با استفاده از این ویژگی، ترابرد الکترونی مولکول هایی که به صورت فیزیکی جذب نانو نوار می شوند را می توان توصیف و محاسبه کرد. نشان خواهیم داد که ترابرد الکترونی برای هر مولکول منحصر به فرد است. زیرا هنگام قرار گیری مولکول روی نانو نوار دره های تیزی در نمودار T-Eمشاهده می شود که این دره ها برای مولکول های مختلف متفاوت هستند. در این مقاله جذب فیزیکی سه مولکول اتانول (C_2H_6O)، گوکرد دی اکسید(SO_2) و بنزن (C_6H_6) روی نانو نوار گرافینی بررسی شده است.

واژگان کلیدی:ترابرد الکترونی، ترانزیستور اثر میدان، نانو نوار گرافینی.

۱ مقدمه

شـــناســـایی مولکول ها در علم و فناوری نانو کاربرد فراوانی دارد[۱و۲]، که اهمیت خود را در زمینه های مختلف از جمله پزشـکی، کشـاورزی، ماموریت های فضـایی و ... نشـان می دهند[۳ و ۴]. به عنوان مثال توالی سـازی که امروزه در علم پزشـکی اهمیت ویژه ای دارد[۵ و ۶]. گرافین از یک شـبکه لانه زنبوری سـاخته شـده اسـت که دارای توانایی زیادی در انتقال الکترون ها است، که همین ویژگی سبب شده تا از آن در ساخت بسیاری از ابزار ها در ابعاد نانو استفاده شود[۷ و ۸]. رسـانندگی گرافین برای حاملین بار به صـورت بالسـتیک است[۹ و ۱۰]، در یک نانو نوار گرافینی نازک مسیرهای کمی برای انتقال الکترون ها وجود دارد، بنابراین میتوان آن نانو نوار را یک شبکه یک بعدی در نظر گرفت[۱۱ و ۱۲].

وقتی مولکولی روی نـانو نوار گرافینی جـذب (فیزیکی) می شود، جهت گیری فضایی وتراز انژری پیشرو[۱]ترابرد را متاثر میکند[۱۳] و در نمودار آن دره های تیزی پدید می آید. این دره های تیز نشـان دهنده تشـدید فانو هسـتند. در این مقاله ترابرد الکترونی، ابتدا برای نانو نوار گرافینی، بدون جذب مولکول بررسی شده، سپس مولکول ها به صورت فیزیکی جذب نانو نوار می شـود و محاسـبات در این حالت نیز مورد مطالعه قرار می گیرد. همچنین نشان خواهیم داد که مولکول جذب شده روی نانو نوار مانند سیستم فانو– آندرسون رفتار می کند[۱۴]، در این حالت ترابرد برای هر مولکول منحصـر به فرد است. در واقع با قرار گرفتن مولکول روی نانو نوار یک مسـیر جدید برای الکترون های بالسـتیک به وجود می آید و تشدید رخ می دهد.طبق این سیستم بین دو مسیر احتمالی الکترون تداخل مخرب رخ می دهد و این تداخل خود را در نمودار عبور دهی برحسـب انرژی، T-(E-Ef) نشـان خواهد داد.

۲ مدلسازی

برای محاسـبه ترابرد الکترونی از نظریه تابع چگالی به همراه تابع گرین غیر تعادلی۲ استفاده شده است[۱۵ و ۱۶]. ترابرد طبق فرمول زیر قابل محاسبه است:

$$T = T_r[G_I G G_R G^\dagger] \qquad (۱)$$

که Trنشان دهنده رد، $G_{L/R} = i[\Sigma_{L/R} - \Sigma_{L/R}^\dagger]$ که $\Sigma_{L/R}$ نشـان دهنده خود–انرژی[۱] الکترود های چپ یا راسـت و G

[1] Frontier energy level

تاریخ دریافت :۹۵/۶/۲۷ تاریخ پذیرش :۹۵/۹/۳۰

ایمیل مسئول مکاتبات : s_shojaei@tabrizu.ac.ir

www.SID.ir

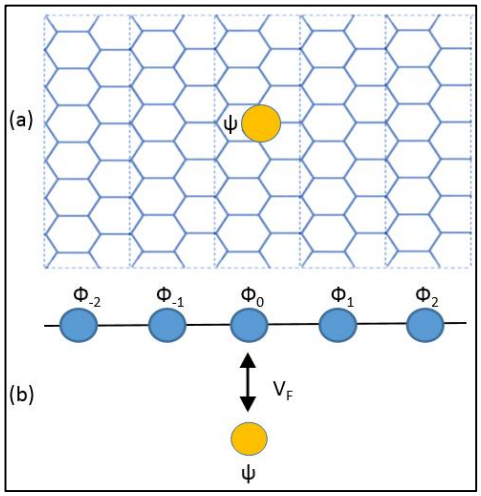
Archive of SID

نشـان دهنده تابع گرین اسـت.رسـانایی، یک مقدار کوانتیده برابر $G_0 = Ze^2/h$ ا ست. برای محا سبات ترابرد از نرم افزار SIESTA ا ستفاده شده ا ست. در این محا سبات انرژی قطع ۵۰۰ ریدبرگ و نقاط K، ۱×۱×۱ در نظر گرفته شـده اسـت. باندهای آویزان[۲] توسـط اتم های هیدروژن خنثی شـده اند و پهنای نانو نوار گرافینی ۱۳ آنگستروم ا ست. همچنین فا صله مولکول ها به هنگام جذب روی نانو نوار ۳ آنگسـتروم خواهد بود.

۳ نتایج و بحث

تشدید فانو

وقتی مولکول جذب نانو نوار گرافینی دسته صندلی[۳](از این به بعد برای سـادگی به شـکل AGNR خواهیم نوشـت) می شودمانند یک سیستم فانو–آندرسون رفتار می کند[۱۷]مانند شکل ۱.



شکل ۱: **(a)**ساختار شبکه **AGNR** را نشان می دهد که یک مولکول(**ψ**) روی آن قرار گرفته است. هر قسمت که با خط چین جدا شده یک سلول واحد را نشان می دهد که در مدل فانو با دایره مشخص شده اند. مولکول جذب شده نیز که عامل ایجاد تخلخل در سیستم است که با دایره زرد رنگ مشخص شده است.**(b)**مدل فانو–آندرسون را نشان می دهد.

بنابراین می توان هامیلتونی را شکل زیر نوشت:

$$H = C\sum_n (j_n j^*_{n-1} + c.c.) + E_F |y|^2 + V_f (y^* j_0 + c.c.) \quad (۲)$$

در این فرمول j_nنشـان دهنده تابع بلوخ در مکان nاسـت،به طوری که این j_nها توسط نیروی C به نزدیک ترین همسایه خود مستصل شده اند. E_Fانرژی تشدید ا ست. اندرکنش بین مولکول و گرافین، با ثابت اتصال V_fنشان داده می شود.همان طور که از فرمول نیز پیداسـت V_fبرای مقادیر $f = 0$ صـفر است. احتمال ترابرد طبق فرمول زیر قابل محاسبه است

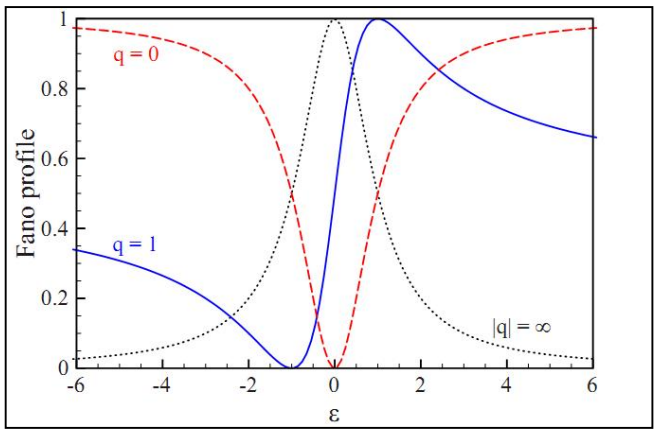
$$T = \frac{a_k^2}{a_k^2 + 1} \quad (۳)$$

$$a_k = C_k(E_F - w_k)/V_F^2 \quad ، \quad C_k = 2C\sin k \quad (۴)$$

که C_k و kبه ترتیب نشـان دهنده سـرعت گره و عدد موج است. برای پهنای تشدید خواهیم داشت

$$G = \frac{V_F^2}{C\sin k_f} \quad (۵)$$

که k_f همان عدد موج در حالت تشـدید اسـت.معادله (۳)دقیقا منطبق بر حالتی از تشـدید فانو اسـت که در آن فاکتور فانو برابر صفر است (شکل ۲).



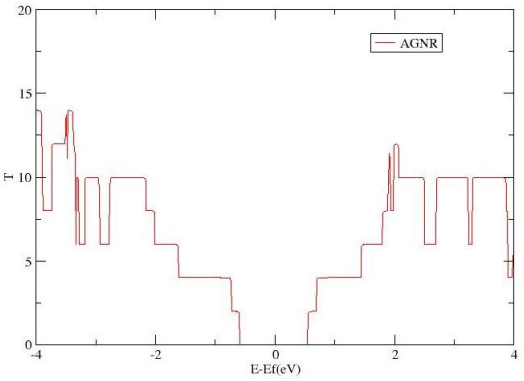
شکل۲: نمودار تشدید فانو [۱۷].

دلیل دره هایی که در ترابرد ظاهر می شوند این است که وقتی مولکول جذب AGNR می شود باعث ایجاد تخلخل در سیستم شده وتشدید فانو را موجب می شود. اوربیتال های مولکول جذب شده و گرافن با هم همپوشانی دارند. همین همپوشانی مسیر جدیدی را برای الکترون به وجود می آورد. طبق تشدید فانو تداخل مخرب بین دو مسیر احتمالی رخ می دهد و این تداخل خود را در نمودار ترابرد نشان می دهد.

[۲] Non equilibrium Green's function

www.SID.ir

Archive of SID

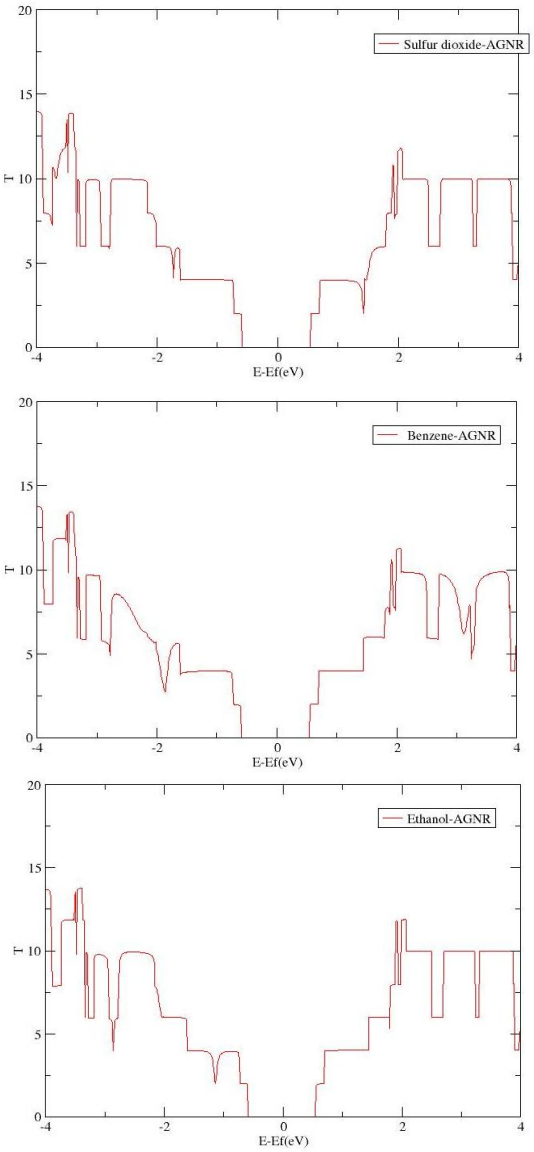


شکل ۳: طیف عبوری الکترونی **AGNR**.

۳-۱ بررسی تاثیر جذب فیزیکی مولکول ها روی AGNR

در این قسمت جذب فیزیکی سه مولکول اتانول (C_2H_6O)، گوگرد دی اکسید (SO_2) و بنزن (C_6H_6) را بررسی خواهیم کرد که چه تاثیری بر ترابرد دارند. همچنین با حالتی مقایسه خواهیم کرد که هیچ مولکولی جذب AGNR نشده باشد.ابتدا حالتی را مطالعه می کنیم که هیچ جذبی صورت نگرفته است. در این حالت به AGNR ولتاژ اعمال میشود به این صورت که بر روی یک ترانزیستور اثر میدان (شامل دررو، دریچه و چشمه) یک نانو نوار گرافینی قرار میدهیم و ترابرد را در این حالت محاسبه می کنیم (شکل ۳).همان طور که از شکل پیداست نمودار ترابرد AGNR به صورت پله ای است که این هم ناشی از وجود گودال هایی است که در سطح گرافین وجود دارد. هر یک از این گودال ها دارای سطح انرژی کوانتیده ای هستند. برای اینکه الکترون بتواند از یک گودال به گودال دیگری انتقال یابد باید یک مقدار انرژی مشخصی دریافت کند که این انرژی توسط ولتاژی که به آن اعمال می شود تامین می گردد.

در حالت بعدی مولکول ها به صورت فیزیکی جذب AGNR می شود. در شکل (۴) نمودار ترابرد این سه مولکول رسم شده است که برای هر مولکول متفاوت می باشد. همین سبب می شود تا به راحتی بتوان مولکول ها را شناسایی کرد. تفاوت در نمودارها ناشی از ناحیه تشدید یعنی مولکول جذب شده است. با توجه به اینکه ساختار هر مولکول متفاوت است الکترون مسیر احتمالی متفاوتی را طی خواهد کرد و نمودار آن هر بار با تغییر مولکول، تغییر خواهد کرد.



شکل ٤: طیف عبوری سه مولکول اتانول، بنزن و گوگرد دی اکسید.

٤ نتیجه گیری

به طور خلاصه نشان دادیم که مولکول جذب شده رو نانونوارگرافینی مانند سیستم فانو–آندرسون رفتار می کند، به طوری که این مولکول یک تخلخل به سیستم وارد می کند. همچنین مسیر جدیدی برای انتقال الکترون به وجود می آید. این مسیر احتمالی جدید با مسیر قبلی تداخل مخرب ایجاد می کند و این تداخل خود را در نمودار ترابرد نشان می دهد. با جذب مولکول های مختلف این نمودار تغییر می کند، یعنی ترابرد برای هر مولکول منحصر به فرد است و از این طریق می توان مولکول را شناسایی کرد.

www.SID.ir

Archive of SID

www.SID.ir

Archive of SID

مراجع

[1] W. Y. Kim, Y. C. Choi, S. K. Min, Y. Cho, K. S. Kim, Chem,"Application of quantum chemistry to nanotechnology: electron and spin transport in molecular devices," Soc. Rev. 38, 2319, 2009.

[2] L. Shen, M. Zeng, S.-W. Yang, C. Zhang, X. Wang, Y. Feng, J. Am, "Electron transport properties of atomic carbon nanowires between graphene electrodes,"Chem.Soc. 132 (33), pp 11481–11486,2010.

[3] B. Bing Huang, Zuanyi Li, Zhirong Liu, Gang Zhou
ShaogangHao, Jian Wu, Bing-Lin Gu and WenhuiDuan, "Adsorption of Gas Molecules on GrapheneNanoribbons and Its Implication for Nanoscale Molecule Sensor," J. Phys. Chem. 112, pp 13442–13446,2008.

[4] Manal M.Y.A. Alsaifa, SivacarendranBalendhrana, Matthew R. Fieldb, Kay Lathamb, WojtekWlodarskia, Jian Zhen Oua, KouroshKalantar-zadeh,"Two dimensional α-MoO3 nanoflakes obtained using solvent-assisted grinding and sonication method: Application for H2 gas sensing," Sensors and Actuators B: Chemical. vol.192, 2014.

[5]J. Prasongkit, A. Grigoriev, B.Pathak, R Ahuja, R. H. Scheicher,"Transverse conductance of DNA nucleotides in a graphene nanogap from first principles," NanoLett. 11, pp 1941–1945, 2011.

[6]Simil Thomas, ArunkumarChittethRajan, Mohammad Reza Rezapour, and Kwang S. Kim," In Search of a Two-Dimensional Material for DNA Sequencing," J. Phys. Chem. C2 118, 10855, 2014.

[7]K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V.Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov,"Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films," Science .,vol. 306,pp. 666-669,2004.

[8]A.Cresti, N. Nemec, B. Biel, G. Niebler, F. Triozon, G. Cuniberti, S.Roche," Charge transport in disordered graphene-based low dimensional materials,"Nano Res. ,vol.1, pp 361–394,2008.

[9]J.Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, C. W. J. Beenakker," Sub-Poissonian Shot Noise in Graphene," Phys.Rev. Lett. 96, 246802,2006.

[10]K. I. Bolotin, K. J. Sikes, J. Hone, H. L. Stormer, P. Kim," Temperature-Dependent Transport in Suspended Graphene,"Phys. Rev. Let., 101, 096802,2008.

[11]J.Cai, R. Pascal, R. Jaafar, M. Bieri, T. Barun, S. Blankenburg, M. Muoth, A. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Mullen, R. Fassel," Nature 466, 470–473, 2010.

[12]M. Koch, F. Ample, C. Joachim, L. Grill," Voltage-dependent conductance of a single graphene nanoribbon,"Nature Nanotechnology. 7, 713–717,2012.

[13]Rezapour, Mohammad Reza, ArunkumarChittethRajan, and Kwang S. Kim,"Molecular sensing using armchair graphenenanoribbon," computational chemistry. 35.26,2014.

[14]A. E. Miroshnichenko, S. Flach, Y. S. Kivshar," Fano resonances in nanoscale structures," Rev. Mod. Phys., 82, 2257,2010.

[15]J. Taylor, H. Guo, J. Wang," Ab initio modeling of quantum transport properties of molecular electronic devices," Phys. Rev. B, 63, 245407,2001.

[16]S.Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems.1997.

[17]A. E. Miroshnichenko, S. Flach, Y. S. Kivshar," Fano resonances in nanoscale structures,"Rev. Mod. Phys. 82, 2257,2010.

www.SID.ir

Archive of SID

نانومقیاس
سال سوم | شماره چهارم | زمستان ۱۳۹۵

Molecular Sensing by the Means of Graphene Based Field Effect Transistor

H. Kordhaghi[1], S. Shojaei[1,*], M. R. Rezapour[2,3]

1. Photonics Electronics Group, Research Institute for Applied Physics & Astronomy (RIAPA), University of Tabriz, Tabriz

2. Department of Chemistry, Ulsan National Institute of Science and Technology, Ulsan, South Korea

3. Department of Physics, Pohang University of Science and Technology, Pohang, South Korea

Abstract

In this article we will show how different molecules can be identified by the use of graphene nanoribbon. Conductance depend on frontier energy level and spatial orientation of molecules. With this feature, electron transport through molecules that are physically attracted to nanoribbon can be described and calculated. We show that electron transport is unique to each molecule. Because when a molecule attach on graphene nanoribbon sharp dips in T-E graph appears that these dips are different for each molecule. In this paper, physical adsorption of three molecules like ethanol (C_2H_6O), sulfur dioxide (SO_2) and benzene (C_6H_6) has been studied on graphene nanoribbon.

Keywords

Electron transport, field effect transistors, armchair graphene-nanoribbon.

* Correspondent Author Email: *s shojaei@tabrizu.ac.ir*

www.SID.ir