

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

هاله کردحقی^۱ | سعید شجاعی^{۱*} | محمد رضا رضاپور^{۲،۳}

^۱ گروه 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

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 نانو نوار گرافینی جذب (فیزیکی) می شود، جهت گیری فضایی و تراز انرژی پی شرو^۱ ترابرد را متاثر میکند [۱۳] و در نمودار آن دره های تیزی پدید می آید. این دره های تیز نشان دهنده تشدید فانو هستند. 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 شود و محاسبات در این حالت نیز مورد مطالعه قرار می گیرد. همچنین نشان خواهیم داد که مولکول جذب شده روی نانو نوار مانند سیستم فانو- آندر سون رفتار می کند [۱۴]، در این حالت ترابرد برای هر مولکول منحصر به فرد است. در واقع با قرار گرفتن مولکول روی نانو نوار یک مسیر جدید برای الکترون های بالستیک 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 برحسب انرژی، $T(E-E_f)$ نشان خواهد داد.

۲ مدل سازی

برای محاسبه ترابرد الکترونی از نظریه تابع چگالی به همراه تابع گرین غیر تعادلی^۲ استفاده شده است [۱۵ و ۱۶]. ترابرد طبق فرمول زیر قابل محاسبه است:

$$T = T_r [G_L G_R G^\dagger] \quad (1)$$

که Tr نشان دهنده رد، $\hat{a}_{L/R}^\dagger$ ، $\hat{a}_{L/R}$ که $G_{L/R} = i[\hat{a}_{L/R}^\dagger - \hat{a}_{L/R}]$ نشان دهنده خود-انرژی^۱ الکتروود های چپ یا راست و G

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 انرژی 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-E مشاهده می شود که این دره ها برای مولکول های مختلف متفاوت هستند. در این مقاله جذب فیزیکی سه مولکول اتانول (C_2H_6O)، گوگرد 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

شناسایی مولکول ها در علم و فناوری نانو کاربرد فراوانی دارد [۲۱]، که اهمیت خود را در زمینه های مختلف از جمله پزشکی، کشاورزی، ماموریت های فضایی و ... نشان می دهند [۳ و ۴]. به عنوان مثال توالی سازی که امروزه در علم پزشکی اهمیت ویژه ای دارد [۵ و ۶]. گرافین از یک شبکه لانه زنبوری ساخته شده است 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]. رسانندگی گرافین برای حاملین بار به صورت بالستیک

Frontier energy level

خود مستصل شده اند. E_F انرژی تشدید است. اندرکنش بین مولکول و گرافین، با ثابت اتصال V_f نشان داده می شود. همان طور که از فرمول نیز پیداست V_f برای مقادیر $f = 0$ صفر است. احتمال ترابرد طبق فرمول زیر قابل محاسبه است

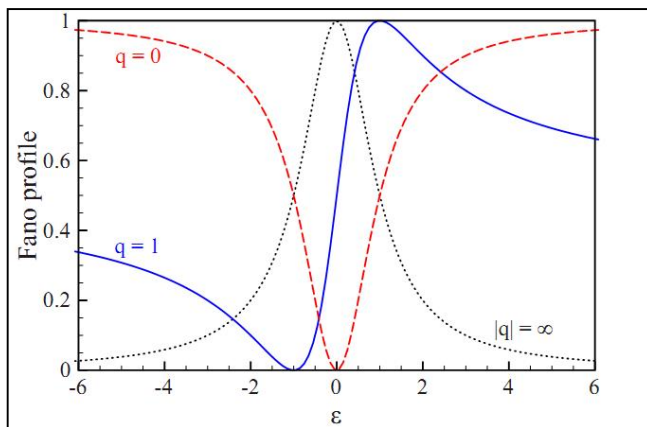
$$T = \frac{a_k^2}{a_k^2 + 1} \quad (۳)$$

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

که C_k و k به ترتیب نشان دهنده سرعت 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 تشدید است. معادله (۳) دقیقاً منطبق بر حالتی از تشدید فانو است که در آن فاکتور فانو برابر صفر است (شکل ۲).



شکل ۲: نمودار تشدید فانو [۱۷].

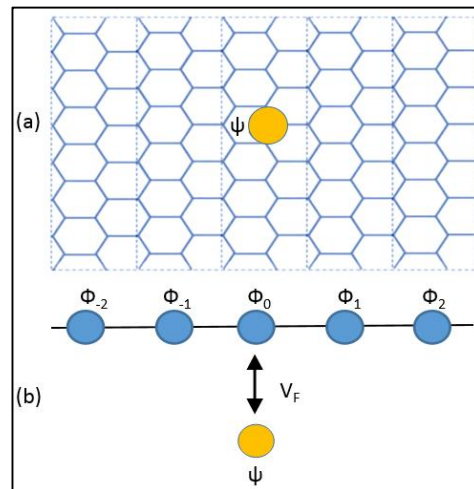
دلیل دره هایی که در ترابرد ظاهر می شوند این است که وقتی مولکول جذب AGNR می شود باعث ایجاد تداخل در سیستم شده و تشدید فانو را موجب می شود. اوربیتال های مولکول جذب شده و گرافین با هم همپوشانی دارند. همین همپوشانی مسیر جدیدی را برای الکترون به وجود می آورد. طبق تشدید فانو تداخل مخرب بین دو مسیر احتمالی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

نشان دهنده تابع گرین است. رسانایی، یک مقدار کوانتیده برابر $G_0 = Ze^2/h$ است. برای محاسبات ترابرد از نرم افزار SIESTA استفاده شده است. در این محاسبات انرژی قطع 500 ریبرگ و نقاط K, Γ, K در نظر گرفته شده است. باندهای آویزان^۲ توسط اتم های هیدروژن خنثی شده اند و پهنای نانو گرافینی ۱۳ آنگستروم است. همچنین فاصله مولکول ها به هنگام جذب روی نانو نوار ۳ آنگستروم خواهد بود.

۳ نتایج و بحث

تشدید فانو

وقتی مولکول جذب نانو نوار گرافینی دسته صندلی^۳ (از این به بعد برای سادگی به شکل AGNR خواهیم نوشت) می شود مانند یک سیستم فانو-آندرسون رفتار می کند [۱۷] مانند شکل ۱.



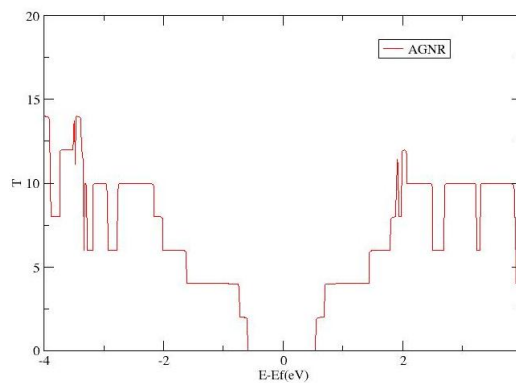
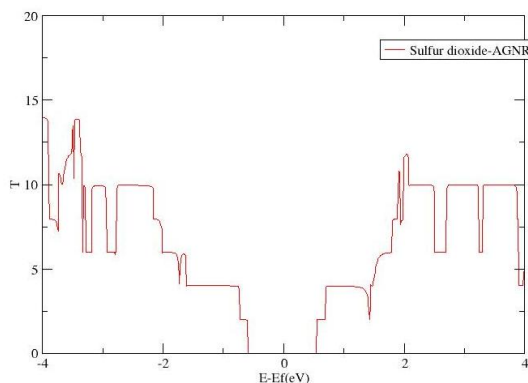
شکل ۱: (a) ساختار شبکه AGNR را نشان می دهد که یک مولکول (ψ) روی آن قرار گرفته است. هر قسمت که با خط چین جدا شده یک سلول واحد را نشان می دهد که در مدل فانو با دایره مشخص شده اند. مولکول جذب شده نیز که عامل ایجاد تداخل در سیستم است که با دایره زرد رنگ مشخص شده است. (b) مدل فانو-آندرسون را نشان می دهد.

بنابراین می توان هامیلتونی را شکل زیر نوشت:

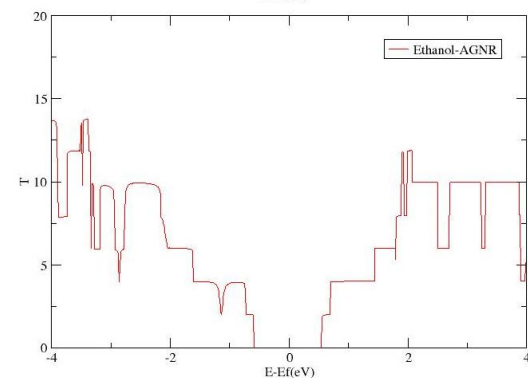
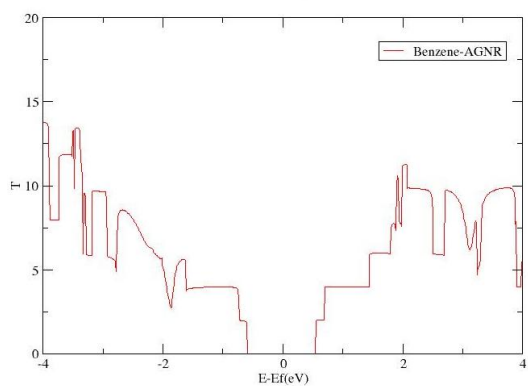
$$H = C \sum_n \hat{a}_n^\dagger (j_n j_{n-1}^* + cc.) + E_F |y|^2 + V_f (y^* j_0 + cc.) \quad (۲)$$

در این فرمول n نشان دهنده تابع بلوخ در مکان n است، به طوری که این n زها توسط نیروی C به نزدیک ترین همسایه

^۱Non equilibrium Green's function



شکل ۳: طیف عبوری الکترونی AGNR.



شکل ۴: طیف عبوری سه مولکول اتانول، بنزن و گوگرد دی اکسید.

۱-۳ 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.

۴ نتیجه گیری

به طور خلاصه نشان دادیم که مولکول جذب شده رو نانونوار گرافینی مانند سیستم فانو-آندر سون رفتار می کند، به طوری که این مولکول یک تداخل 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.

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
Shaogang Hao, Jian Wu, Bing-Lin Gu and Wenhui Duan, "Adsorption of Gas Molecules on Graphene Nanoribbons and Its Implication for Nanoscale Molecule Sensor," J. Phys. Chem. 112, pp 13442–13446, 2008.
- [4] Manal M.Y.A. Alsaifa, Sivacarendran Balendhrana, Matthew R. Fieldb, Kay Lathamb, Wojtek Wlodarskia, Jian Zhen Oua, Kourosh Kalantar-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," Nano Lett. 11, pp 1941–1945, 2011.
- [6] Simil Thomas, Arunkumar Chitteth Rajan, 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. Nemeč, 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. Lett., 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, Arunkumar Chitteth Rajan, and Kwang S. Kim, "Molecular sensing using armchair graphene nanoribbon," 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.

Molecular Sensing by the Means of Graphene Based Field Effect Transistor

H. Kordhaghi¹, 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