

## طراحی و شبیه‌سازی حسگرهای گرافنی جهت تشخیص گازهای سمی

ژیلوان حبیبی<sup>۱</sup>، محمدرضا سهیلی‌فر<sup>۲</sup>

rsheilifar@ee.kntu.ac.ir

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی برق دانشگاه علامه محدث نوری

۲- استادیار دانشکده مهندسی برق دانشگاه علوم دریایی امام خمینی (ره)

### چکیده

حسگرهای گازی به طور کلی وظیفه جذب و تشخیص مولکول‌های گازی روی یک ماده حساس می‌باشد که در این مقاله حسگرهای گازی بر پایه گرافن با استفاده از روش‌های نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ و نوع آرمچیر بدون اعمال گاز و با اعمال گاز در نرم‌افزار ATK شبیه‌سازی و مورد تحلیل قرار خواهد گرفت. با توجه به داشتن منحنی مشخصه الکترونیکی حسگرهای گازی از جمله منحنی ولتاژ-جریان و نمودار باند عبور می‌توان مولکول‌های سمی موجود بر روی حسگر گرافنی را تشخیص داد. مولکول سمی انتخابی در این مقاله، گوگرد دی‌اکسید است که یکی از گازهای سمی شناخته شده و به صورت یک ترکیب شیمیایی به شکل گاز در دمای اتاق با فرمول شیمیایی  $SO_2$  است. در این روش ابتدا گرافن به روش شیمیایی هم نهاده شده و نوارهای گرافن روی الکترودهای شانه‌ای پوشش داده شده که با استفاده از عوامل شیمیایی که در این مقاله آلومینیم می‌باشد احیا می‌شود. با تزریق ناخالصی‌هایی از جمله کرم و گاز  $SO_2$  بر روی نوارهای گرافن در نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ و نوع آرمچیر و با بررسی نتایج شبیه‌سازی‌های انجام شده می‌توان حساسیت بالای نانونوار گرافنی نوع آرمچیر را نسبت به نوع زیگزاگ جهت تشخیص گاز مذکور مشاهده کرد.

واژگان کلیدی: گرافن، حسگر، نانونوار، زیگزاگ، آرمچیر.

تاریخ دریافت مقاله : ۹۷/۰۱/۰۸

تاریخ پذیرش مقاله : ۹۷/۰۷/۲۱

## ۱- مقدمه

تشخیص گاز در نظارت بر محیط زیست، تجزیه و تحلیل شیمیایی و بیولوژیکی در اکثر صنایع از جمله صنعت تولید کشاورزی و صنایع دریایی امری مهم به شمار می‌آید. گاز گوگرد دی اکسید ( $SO_2$ ) به عنوان یک گاز خطرناک و سمی شناخته شده است که ممکن است هنگامی که سیستم بدنی انسان در معرض این گاز قرار بگیرد به ریه و مجرای تنفسی آسیب وارد کند که بر همین اساس حسگرهای گازی طراحی می‌شوند [۱]. انعطاف‌پذیری حسگرها در نظارت بر سلامت انسان در حال حاضر بسیار مهم است و حسگرهای گازی و مکانیکی در رساندن مواد مورد نیاز به محل آسیب دیده به طور گسترده‌ای مورد توجه محققین قرار گرفته است [۲].

بسترهای گرافن تاثیر به‌سزایی روی خواص گرافن دارند، بنابراین اگر بخواهیم روی خواص ذاتی گرافن کار کنیم بهتر است که گرافن را به حالت معلق درآوریم. گرافن روی بستر نیتريد بور هدایت الکتریکی بیشتری نسبت به دی‌اکسید سیلیکان خواهد داشت، بنابراین برای جلوگیری از تغییر در ساختار الکترونیکی گرافن، باید از ماده‌ای استفاده کرد که دارای شکاف باند بزرگ باشد [۳].

امروزه با بهره‌گیری از فناوری نانو در عرصه ساخت حسگرهای شیمیایی بر پایه گرافن نتایج بهتری در آشکارسازی گونه‌های شیمیایی مختلف به دست آمده است. عموماً واکنش‌های حسگر گاز در دماهای بالا (۶۰۰-۱۵۰ درجه سانتی‌گراد) رخ می‌دهند، به همین دلیل به حسگرهایی نیاز است که برای راندمان بیشتر بتوانند از داخل گرم شوند تا دمای مورد نیاز برای واکنش با گاز را تامین نمایند [۴].

ساختار مقاله به این صورت است که در بخش دوم مقاله، عملکرد و ویژگی‌های حسگرهای گرافن شرح داده می‌شود. در بخش سوم حسگرهای گازی مبتنی بر گرافن مورد بحث قرار می‌گیرد. در بخش چهارم به نانوآرهای گرافنی و کاربردهای آن پرداخته می‌شود، بخش پنجم و ششم به ترتیب بررسی و شبیه‌سازی نانوآرهای نوع زیگزاگ و آرمچیر اختصاص داده شده است، بخش هفتم مقایسه نانوآر گرافنی نوع زیگزاگ با آرمچیر شرح داده می‌شود، در بخش هشت نمودارهای باند عبور در نوع زیگزاگ و آرمچیر مورد

بررسی قرار خواهند گرفت در بخش آخر نتیجه‌گیری و پیشنهادهایی در این زمینه ارائه خواهد شد.

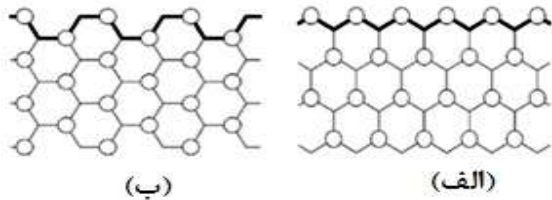
## ۲ - حسگرهای گازی بر پایه گرافن

حسگر گازی ابزاری است که اگر در معرض یک ترکیب شیمیایی، گازی یا مخلوطی از ترکیب‌های شیمیایی قرار گیرد، یک یا چند خاصیت فیزیکی (برای مثال جرم، هدایت الکتریکی یا ظرفیت خازنی) را به نحوی تغییر می‌دهد که به صورت مستقیم یا غیر مستقیم به صورت کمی قابل اندازه‌گیری باشد [۵].

حسگرهای گاز معمولی، نظیر حسگرهای اکسید فلزی نیازمند درجه حرارت محیطی بالا و عملکردی با توان بالا می‌باشند اما گرافن‌ها بر خلاف حسگرهای اکسید فلزی به عنوان یک جایگزین می‌تواند در توان کم، کارایی لازم را برای سنجش گازها داشته باشد. این ماده دو بعدی به علت جابجایی بالای الکترون‌ها و سطح ناحیه‌ای بالا می‌تواند واکنش‌های بهتری نسبت به حسگرهای اکسید معمولی داشته باشد. گرافن با داشتن ویژگی مکانیکی و شیمیایی در دمای اتاق گزینه‌ای مطلوب برای سنجش عملکرد گازها است [۶]. اثر دما و ابعاد صفحه گرافن تا دمای ۸۰۰ کلون مدول یانگ تغییرات کمی را با افزایش دما تجربه می‌کند به عبارت دیگر با افزایش دما مدول یانگ<sup>۱</sup> تغییر چندانی نمی‌کند و تنها کمی کاهش می‌یابد که در واقع می‌توان گفت گرافن نسبت به تغییرات دما، واکنشی ثابت را از خود نشان می‌دهد. در حال حاضر دانشمندان در حال توسعه حسگرهای گرافن ساخته شده به‌روش حسگرهای گرافن الگوگذاری شده با استفاده از گرافن حاصل از رسوب دهی شیمیایی<sup>۲</sup> هستند. با استفاده از این‌گونه روش‌ها، حسگرهایی تولید می‌شوند که عملکرد بهتری دارند که می‌تواند مولکول‌های واحد را شناسایی کند. در این روش بخار ماده اولیه که یک ماده حاوی کربن است وارد محفظه که معمولاً دمای بالا و فشار پائینی دارد، شده و روی سطح زیرلایه می‌نشیند یا به عبارتی بر سطح زیرلایه رسوب می‌کند و یک لایه همگن از محصول مورد نظر بر اثر واکنش‌های شیمیایی بر سطح زیرلایه تشکیل می‌شود. محصولات تولیدی جانبی نیز از طریق یک خروجی

<sup>2</sup> CVD

<sup>۱</sup> مدول الاستیسیته (E) یا همان مادیولس یانگ برابر است با نسبت تنش بر کرنش ایجاد شده به واسطه تنش وارده بر جسم در حالتی که جسم در ناحیه الاستیک قرار گرفته باشد.



شکل (۱) نانو نوار گرافنی. (الف) نانو نوار گرافنی زیگزاگ، (ب) نانو نوار گرافنی آرمچیر [۴].

به این منظور از دو نوع نانو نوار گرافنی آرمچیری و زیگزاگی استفاده شده است [۷]. در ادامه به ارائه نتایج حاصل از شبیه سازی حسگر از دو روش حسگرهای مبتنی بر نانونوارهای گرافنی زیگزاگی و آرمچیر پرداخته می شود.

#### ۴- نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ

در شکل (۲) ساختار اتمی حسگر نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ نمایش داده شده است. 5-ZGNR با عرض ۵ اتم کربن و با طول لبه هایی که توسط هیدروژن تک اتمی انباشته می شوند تشکیل شده است. در دیگر گونه ها جذب و اثر ناخالصی در نظر گرفته شده اند [۸]. در این سیستم مولکول  $SO_2$  جذب شده و با در نظر داشتن یک اتم کرم<sup>۵</sup> که جایگزین یک اتم کربن می شود. پنج ناحیه مختلف برای ناخالص سازی کرم مورد بررسی قرار گرفته است (برچسب های ۱ تا ۵ از لبه تا مرکز). هر یک از دستگاه مبتنی بر ZGNR شامل سه بخش است: ناحیه پراکندگی و دو عدد الکتروود (الکتروود ۱ و الکتروود ۲) با جنس نیمه هادی [۹]. جنس الکتروودها می تواند فلزی، گرافنی و یا نانوله های کربنی بود و می تواند اندازه های متفاوتی نسبت به هم دیگر داشته باشد و لزوماً جنس شان نیز یکسان نیست چرا که به طور مثال الکتروودهای موجود در نانونوار می توانند از جنس فلز، طلا، پلاتین و یا گرافن باشند که در این مقاله از جنس گرافنی استفاده شده است. هر دو ناحیه پراکندگی و الکتروودها یکسان هستند. در ابتدا، انرژی های وابسته به اسپین E برای پنج ناحیه مختلف ناخالصی (۱-۵) Cr در ZGNR محاسبه شده اند.

شکل (۴) منحنی مشخصه جریان-ولتاژ را نشان می دهد هنگامی که انرژی بیشتر از باند عبور ممنوعه می شود، برآمدگی پیوسته قسمت های عبور را شاهد خواهیم بود.

از محفظه خارج می شوند. در این روش اغلب از تجزیه اتیلن و رسوب نشانی آن بر سطح نیکل جهت تولید گرافن بهره می برند.

#### ۳- هندسه نانونوار گرافنی

نانونوار گرافنی از مواد کربنی  $SO_2$  با ابعاد کوچکی هستند. این مواد، بنابر خواص فیزیکی و شیمیایی ویژه ای که از خود نشان می دهند، برای گستره وسیعی از علوم، از جمله نانوپزشکی، جذاب هستند. از سال ۲۰۰۴، نانولوله های کربنی به طور گسترده به عنوان حامل های دارویی برای انتقال درون سلولی داروهای شیمی درمانی، پروتئین ها، و ژن ها مورد بررسی سرطان با استفاده از نانونوار گرافنی قرار گرفتند. درمان درون تنی<sup>۱</sup> آزمایش هایی بر روی حیوانات توسط گروه های پژوهشی مختلف اثبات شده است. گرافن که یکی از آلوتروپ های کربن است نوید بخش کاربردی بودن آن در جنبه های مختلف زیست پزشکی شده است.

نانونوار گرافنی عامل دار شده می تواند به عنوان حامل های مولکولی در دارورسانی درون تنی و برون تنی استفاده شوند. این ساختارها در کاربردهای دارورسانی درون تنی و برون تنی درمان سرطان مورد استفاده قرار گرفته اند. نتایج مطلوب به دست آمده از محیط های برون تنی به پژوهش های بیشتر بر روی دارورسانی مبتنی بر نانونوار گرافنی برای درمان درون تنی سرطان منجر شده است.

هندسه یک نانونوار گرافنی، ماهیت فلزی یا نیمه رسانایی آن را تعیین می کند. چنانچه نانونوار گرافنی مطابق شکل (۱-الف) در راستای زیگزاگ<sup>۲</sup> بریده شود، این نانونوار خاصیت فلزی از خود نشان می دهد و اگر گرافنی مطابق شکل (۱-ب) در راستای آرمچیر<sup>۳</sup> بریده شود، بسته به تعداد اتم ها در عرض نوار، از خود خواص شبه فلزی یا نیمه هادی نشان می دهد. گرافن و نانولوله های کربنی به عنوان یک ماده پر کاربرد در شیمی، فیزیک، الکترونیک و حوزه اسپینترونیک<sup>۴</sup> است. گرافن به عنوان ماده دو بعدی و نانولوله های کربنی به عنوان ماده تک بعدی دارای شکل های مختلف زیگزاگی، آرمچیر و کایرال هستند. بنابراین حسگر طراحی شده، یک حسگر گاز مبتنی بر نانونوار گرافنی جهت تشخیص گاز  $SO_2$  است.

<sup>4</sup> Spintronics

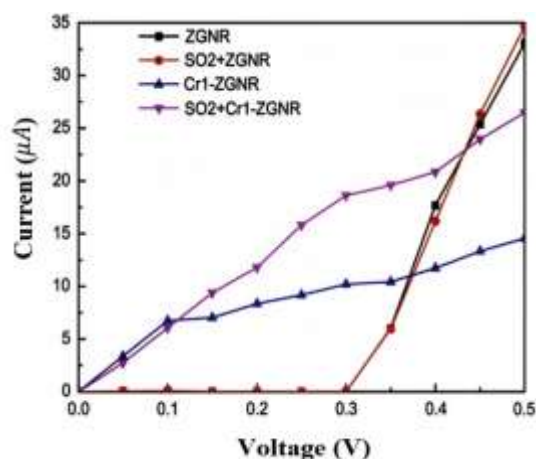
<sup>5</sup> Chrome

<sup>1</sup> In-Vivo

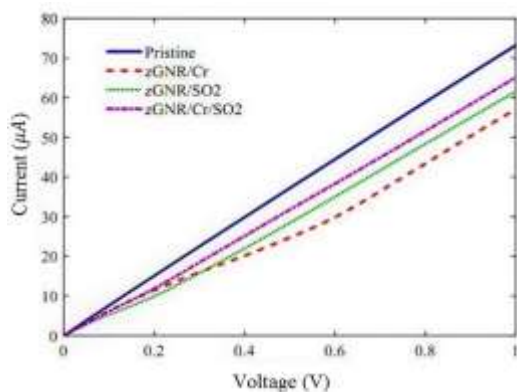
<sup>2</sup> Zigzag

<sup>3</sup> Armchair

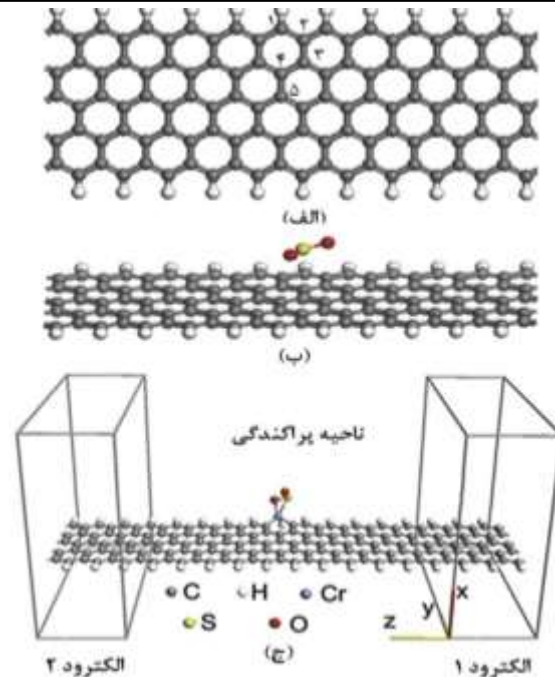
در باند ظرفیت می‌توانند در میان باند ممنوعه تونل‌زنی عبور کرده و ناحیه مرکز برای باند هدایت انتقال داده شوند [۷]. در شکل (۵)، نمودار مشخصه جریان-ولتاژ، برای حالت‌های ذکر شده نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، نمودار در حالت تزریق ناخالصی<sup>۱</sup> یک خط صاف بوده که دارای بیشترین مقدار ولتاژ، یک ولت است. با جذب مولکول  $SO_2$  دیده می‌شود که میزان جریان تغییرات محسوسی دارد. از این تغییرات می‌توان به وجود مولکول  $SO_2$  پی‌برد. در حالت تزریق ناخالصی کرم میزان کاهش جریان در ولتاژ یک ولت، بیشتر بوده و این در حالی است که در جذب مولکول  $SO_2$  به همراه ناخالصی Cr، منحنی خطی‌تر است.



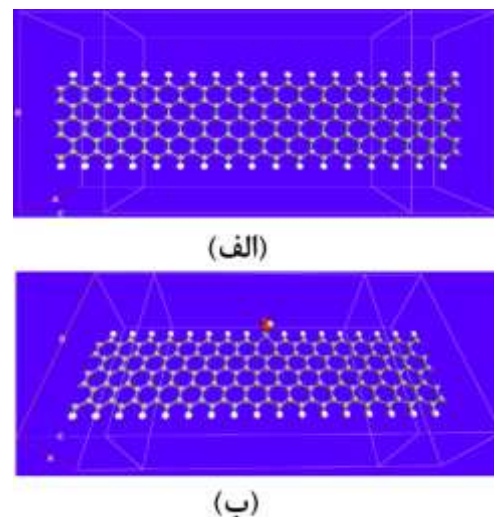
شکل (۴) منحنی مشخصه جریان-ولتاژ برای حالت‌های مختلف در نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ [۷].



شکل (۵) نمودار مشخصه جریان-ولتاژ، برای حالت‌های بدون تزریق ناخالصی، با تزریق ناخالصی کرم و در حالت جذب مولکول  $SO_2$  در نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ.



شکل (۲) ساختار اتمی 5-ZGNR (الف) شامل دو مولکول ترکیب شده در ZGNR ایده‌آل، اعداد (۱ تا ۵) محل‌های کاوش ناخالصی کرم را نشان می‌دهد (ب) پیکربندی جذب پایدار  $SO_2$  روی خالص 5-ZGNR (ج) شمای دو الکتروود با یک اتم کرم جایگزین در محل ۱ و مولکول  $SO_2$  جذب شده [۷].



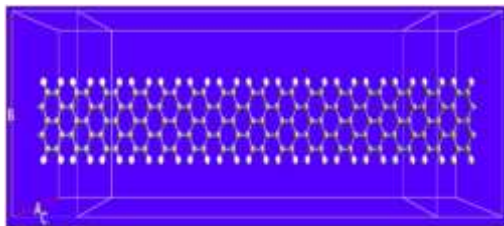
شکل (۳) شمای حسگر طراحی شده. (الف) حسگر طراحی شده با نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ (5-zGNR) (ب) حسگر طراحی شده به همراه تزریق کرم و جذب مولکول  $SO_2$ .

بالتر از گرایش آستانه جریان متناسب با میزان گرایش افزایش خواهد یافت زیرا الکترون‌های موجود در یک الکتروود

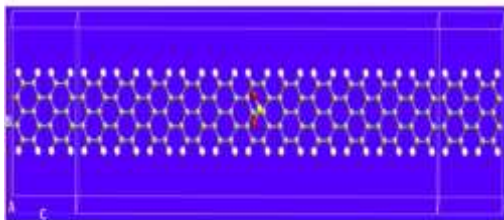
<sup>۱</sup> در حالت اولیه یا طبیعی و دست نخورده (Pristine)

### ۵-۱ طراحی و شبیه‌سازی حسگر مبتنی بر نانونوار گرافنی نوع آرمچیر

در شکل (۷) نمودار مشخصه جریان-ولتاژ نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، مقدار جریان در حالت بدون تزریق ناخالصی (حالت Pristine) بیشتر از بقیه حالت‌ها بوده که با تزریق ناخالصی کرم، این مقدار به شدت کاهش می‌یابد. این در حالی است که با جذب مولکول گاز، تغییر محسوس در نمودار مشخصه وجود ندارد ولی در حالت تزریق ناخالصی و جذب مولکول گاز، تغییرات به شدت محسوس می‌شود که با گرایش حسگر تحت یک ولتاژ ثابتی می‌توان از طریق اختلاف موجود بین حالت، گاز را تشخیص داد.

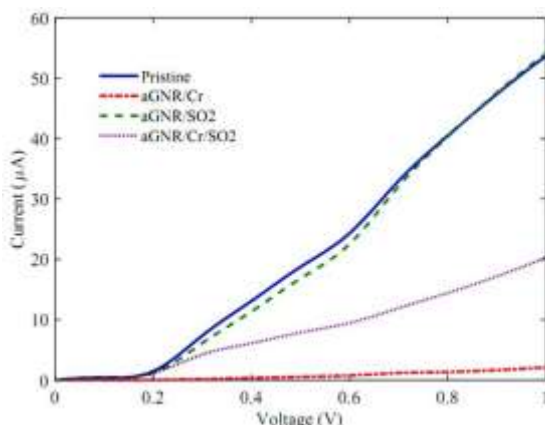


(الف)



(ب)

شکل (۶) شمای حسگر. (الف) حسگر طراحی شده با نانونوار گرافنی نوع آرمچیر (5-aGNR). (ب) حسگر طراحی شده همراه با جذب مولکول  $SO_2$  در نانونوار گرافنی نوع آرمچیر.



شکل (۷) نمودار مشخصه جریان-ولتاژ برای حالت‌های بدون تزریق ناخالصی، با تزریق ناخالصی کرم و جذب مولکول گاز  $SO_2$  در نانونوار گرافنی نوع آرمچیر.

در جدول (۱) اختلاف حالت‌های مختلف از جمله حالت pristine با حالت اضافه کردن کرم و گاز  $SO_2$  مشاهده نمایش داده شده است. قابل توجه است که به ازای اضافه شدن هر مولکول، تغییراتی در جریان خروجی مشاهده شده است. این تغییرات بیان‌گر این است که بر روی نانونوار گرافنی مولکول گازی اضافه شده است با در نظر گرفتن اختلاف جریان در حالت pristine با اضافه شدن مولکول‌های گازی از جمله  $SO_2$  می‌توان میزان موجودیت گازهای ناخواسته را مشاهده کرد.

در جدول (۲) مقایسه‌ای از جریان‌های خروجی شکل (۴) و شکل (۵) مشاهده می‌شود که هرچقدر اختلاف جریان خروجی به ازای ولتاژ ورودی بیشتر باشد نشان دهنده حساسیت بیشتر حسگر می‌باشد.

### ۵-۲ نانونوار گرافنی نوع آرمچیر

در شکل (۶) ساختار اتمی حسگر طراحی شده با استفاده از آرمچیر نمایش داده شده است که به منظور بهبود ویژگی الکترونیکی حسگر، ناخالصی کرم به ساختار تزریق شده است.

جدول (۱) مشخصه جریان-ولتاژ در حالت‌های pristine، ناخالصی کرم و گاز  $SO_2$  برای نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ.

ولتاژ ورودی	نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ			
	جریان خروجی (uA) در حالت‌های مختلف			
حالت Pristine	ناخالصی Cr	گاز $SO_2$	$SO_2 + Cr$	
۰٫۲ ولت	۱۵	۱۱	۹٫۹	۱۱
۰٫۴ ولت	۳۰	۲۰	۲۲	۲۵
۰٫۶ ولت	۴۳	۲۹٫۷	۳۴٫۶	۳۷
۰٫۸ ولت	۵۸	۵۱٫۴	۵۸٫۷	۵۲
۱ ولت	۷۴	۵۷٫۷	۶۲	۶۵

جدول (۲) مقایسه مشخصه جریان-ولتاژ نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ در حالت‌های pristine، ناخالصی کرم و گاز  $SO_2$  برای منحنی مشخصه‌های شکل (۴) و شکل (۵)

ولتاژ ورودی	نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ	
	جریان خروجی (uA) در حالت $SO_2 + Cr$	
شکل (۴)	شکل (۵)	
۰٫۱ ولت	۵٫۱	۷٫۴
۰٫۳ ولت	۱۵٫۶	۱۸٫۳
۰٫۵ ولت	۲۵٫۳	۳۱٫۵

جدول (۴) مقایسه منحنی مشخصه جریان-ولتاژ در حالت‌های prinstine و اضافه کردن گاز SO<sub>2</sub> برای نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ و آرمچیر.

ولتاژ ورودی	نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ		نانونوار گرافنی نوع آرمچیر	
	جریان خروجی (uA)		جریان خروجی (uA)	
	Pristine	SO <sub>2</sub> + Cr	pristine	SO <sub>2</sub> + Cr
ولت ۰,۲	۱۵	۱۱	۱	۰,۷
ولت ۰,۴	۳۰	۲۵	۱۳	۷
ولت ۰,۶	۴۳	۳۷	۲۴	۹
ولت ۰,۸	۵۸	۵۲	۴۰	۱۴
ولت ۱	۷۴	۶۵	۵۴	۲۰

از دیگر تفاوت‌های این دو نوع می‌توان به مهار کردن حسگر در نوع آرمچیر اشاره کرد به طوری که با توجه به شکل (۸ ب) در ولتاژ صفر الی ۰,۲ ولت حسگر تقریباً جریانی برابر با صفر را نشان می‌دهد، اما در حالت زیگزاگ (شکل ۸ الف) جریان در همان ابتدا شروع به افزایش حالت نمایی خود را دارد که می‌تواند ناشی از نویزهای جریان اطراف یا سایر نویزهای دیگر باشد. با این توضیح‌ها می‌توان پی برد که نانونوار گرافنی نوع آرمچیر قابل کنترل می‌باشد و از نویزپذیری کمتری نسبت به نوع زیگزاگ برخوردار است.

#### ۷- نمودارهای باند عبور در نوع زیگزاگ و آرمچیر

##### ۷-۱- باند عبور در نانونوار نوع زیگزاگ

در شکل (۹) نمودار عبور بر حسب انرژی برای حالت‌های بدون تزریق ناخالصی با تزریق ناخالصی کرم و جذب مولکول SO<sub>2</sub> در نانونوار نوع زیگزاگ نشان داده شده است. در مورد تزریق کرم، نمودار عبور نشان می‌دهد که کم‌ترین میزان عبور مربوط به کرم است. از آنجا که جریان نیز رابطه مستقیمی با میزان عبور دارد، لذا کمتر بودن عبور باعث کمتر شدن جریان نسبت به بقیه حالت‌ها می‌شود. در شکل (۱۰) نمودار چگالی حالت‌ها بر حسب انرژی برای حالت‌های مختلف نشان داده شده است. دیده می‌شود که تعداد حالت‌ها بر روی بعضی از مقادیر انرژی تغییر یافته است. حساس‌ترین نقطه، سطح فرمی است که در آن شاهد کاهش تعداد حالت‌های قرارگیری الکترون در حالت تزریق ناخالصی و جذب مولکول گازی نسبت به حالت بدون تزریق است. به منظور درک بهتر موضوع نمودار را از نمای نزدیک بررسی می‌کنیم.

جدول (۳) مشخصه جریان-ولتاژ در حالت‌های prinstine، ناخالصی کرم و گاز SO<sub>2</sub> برای نانونوار گرافنی نوع آرمچیر.

ولتاژ ورودی	نانو نوار گرافنی نوع آرمچیر			
	جریان خروجی (uA) در حالت‌های مختلف			
	حالت Pristine	ناخالصی Cr	گاز SO <sub>2</sub>	SO <sub>2</sub> + Cr
ولت ۰,۲	۱	۰	۰,۶۷	۰,۷
ولت ۰,۴	۱۳	۰	۱۲	۷
ولت ۰,۶	۲۴	۰,۴	۲۲	۹
ولت ۰,۸	۴۰	۱	۴۰	۱۴
ولت ۱	۵۴	۱,۳	۵۴	۲۰

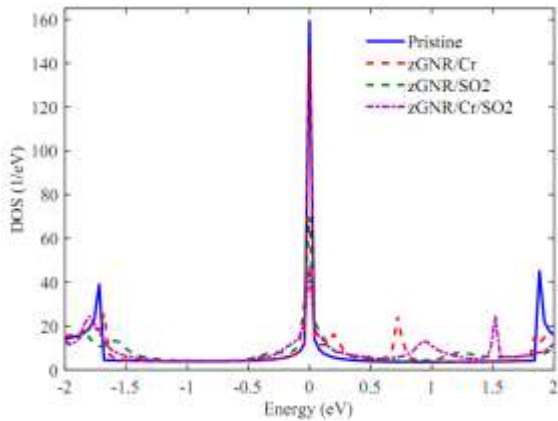
در جدول (۳) اختلاف حالت‌های مختلف از جمله حالت pristine با حالت اضافه کردن کرم و گاز SO<sub>2</sub> مشاهده می‌شود. قابل ذکر است که به ازای اضافه شدن هر مولکول، تغییراتی در جریان خروجی مشاهده شده است. این تغییرات بیانگر این است که بر روی نانونوار گرافنی مولکول گازی اضافه شده است. با در نظر گرفتن اختلاف جریان در حالت pristine با اضافه شدن مولکول‌های گازی از جمله SO<sub>2</sub> می‌توان میزان موجودی گازهای ناخواسته را مشاهده کرد.

#### ۶- مقایسه نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ با آرمچیر

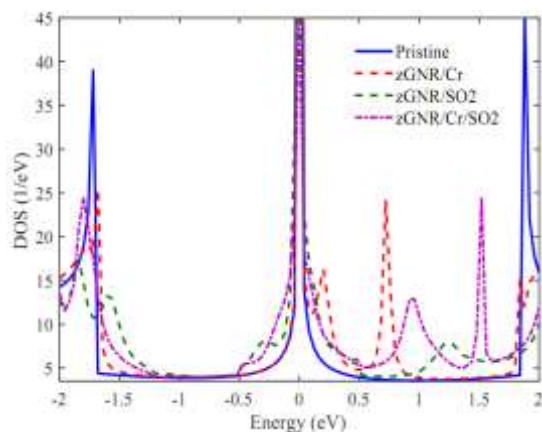
با داشتن مشخصه‌های مختلف از جمله مشخصه جریان ولتاژ می‌توان به بررسی و مقایسه نانونوار نوع زیگزاگ با نوع آرمچیر پرداخت. شکل (۸) مقایسه انجام شده را نشان می‌دهد. در شکل (۸-الف) نانو نوار گرافنی نوع زیگزاگ را نمایش می‌دهد که در حالت‌های اضافه کردن ناخالصی با حالت pristine اختلاف زیادی مشاهده نمی‌شود، اما در شکل (۸-ب) که نانونوار نوع آرمچیر را نشان می‌دهد. مشخص است که اختلاف جریان‌ها به نسبت نوع زیگزاگ مشهودتر است. برای مشاهده و جزئیات دقیق‌تر جدول (۴) ارائه شده است که در حالت اضافه کردن ناخالصی کرم و گاز SO<sub>2</sub> مورد بررسی قرار می‌گیرد.

با توجه به مقایسه میزان اختلاف جریان خروجی حسگر در حالت نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ و آرمچیر می‌توان متوجه این شد که نانونوار گرافنی نوع آرمچیر از اختلاف جریان بیشتری نسبت به نوع زیگزاگ نسبت به حالت pristine برخوردار است و این حساس بودن حسگر نوع آرمچیر را نشان می‌دهد.





شکل (۱۰) نمودار چگالی حالت‌ها بر حسب انرژی برای تمامی حالت‌ها ذکر شده در نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ.

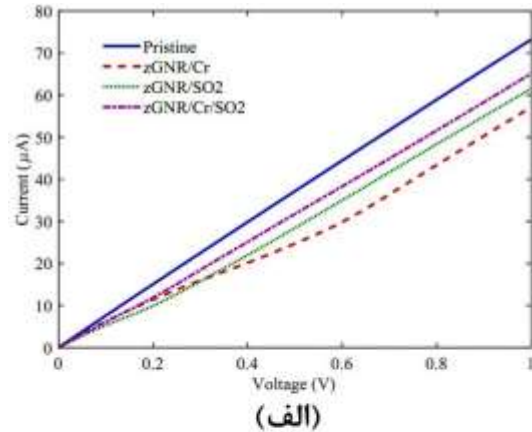


شکل (۱۱). نمودار چگالی حالت‌ها از نمای نزدیک در نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ.

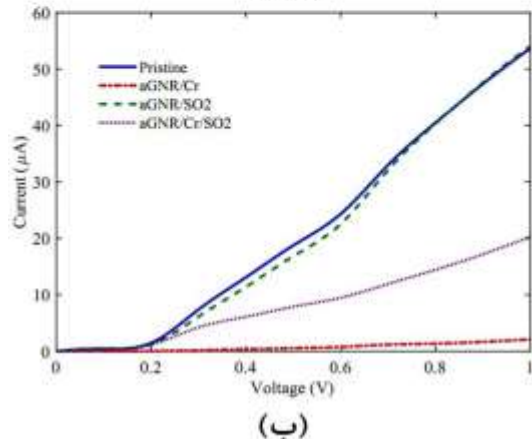
#### ۷-۲- باند عبور در نانونوار نوع آرمچیر

در شکل (۱۲) همان‌طور که دیده می‌شود میزان انتقال در حالت تزریق کرم خیلی کمتر از بقیه حالت‌ها بوده که باعث کمتر شدن مقدار جریان مربوطه می‌شود. نکته قابل توجه در طراحی حسگر با نانونوار گرافنی نوع آرمچیر به میزان گرایش بستگی دارد. در این نوع حسگر عکس نوع زیگزاگ نیازمند مقداری گرایش به منظور هدایت جریان هستیم. این مقدار گرایش تحت عنوان ولتاژ آستانه بوده که در حدود  $0.2$  ولت است. وجود این مقدار گرایش، حسگر بدون نویز را امکان‌پذیر و کالیبراسون آن را راحت‌تر می‌کند.

در شکل (۱۳) نمودار چگالی حالت‌ها بر حسب انرژی نشان داده شده است. در حالت تزریق کرم دیده می‌شود که شاهد افزایش تعداد حالت‌ها بر روی انرژی حدود  $0.5$  الکترون ولت هستیم.

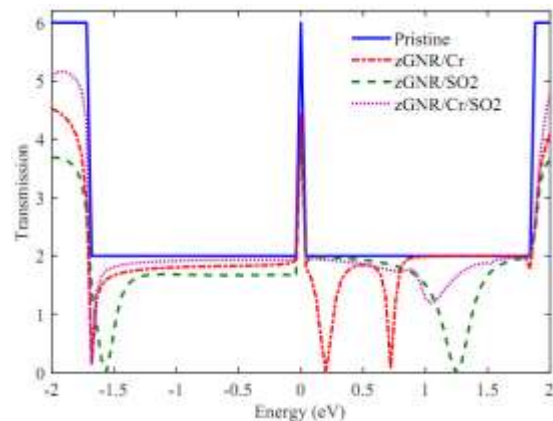


(الف)



(ب)

شکل (۸) مقایسه منحنی مشخصه جریان-ولتاژ. (الف) نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ (ب) نانونوار گرافنی نوع آرمچیر.



شکل (۹) نمودارهای عبور بر حسب انرژی در حالت‌های بدون تزریق ناخالصی و با ناخالصی کرم و جذب مولکول  $SO_2$  در نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ.

در شکل (۱۱) شاهد افزایش تعداد حالت‌ها در باند هدایت (قسمت‌های مثبت انرژی و بالاتر از سطح فرمی) به دلیل تزریق ناخالصی و جذب مولکول  $SO_2$  می‌باشیم. دلیل این افزایش، وجود اوربیتال‌های  $p_s$  و  $d$  در ساختار اوربیتالی ناخالصی کرم و مولکول  $SO_2$  است.

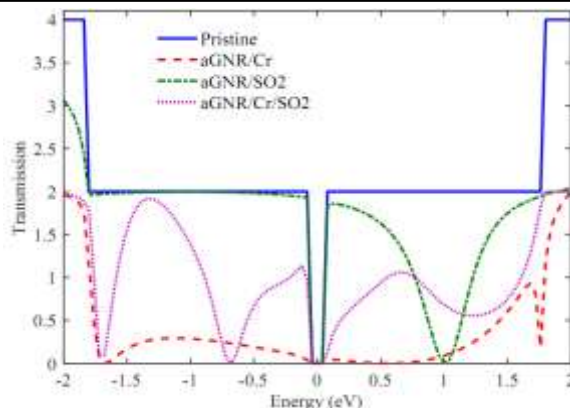
بدون تزریق است. در نانو نوارگرافنی نوع آرمچیر، قابل کنترل و دارای حساسیت بیشتر نسبت به نانونوار گرافنی نوع زیگزاگ بود و این به معنای نیاز به گرایش مناسب جهت عملکرد صحیح و عاری از نویز به است.

در ادامه کار توصیه می‌شود که سایر گازها مانند CO، NO، CO<sub>2</sub>، NO<sub>2</sub>، مورد بحث و بررسی قرار گیرد. همچنین می‌توان به منظور بررسی رفتار الکترونیکی حسگر، از ناخالصی‌های بور، نیتروژن و برای بررسی رفتار مغناطیسی حسگر از ناخالصی‌های کبالت، نیکل و آهن با توجه به ویژگی فرومغناطیسی آن‌ها، استفاده شود. با توجه به امکان سنتز نانونوارهای گرافنی در مقیاس آزمایشگاهی و تجاری و قابلیت ساخت حسگر، پیشنهاد ساخت نیز مطرح می‌شود.

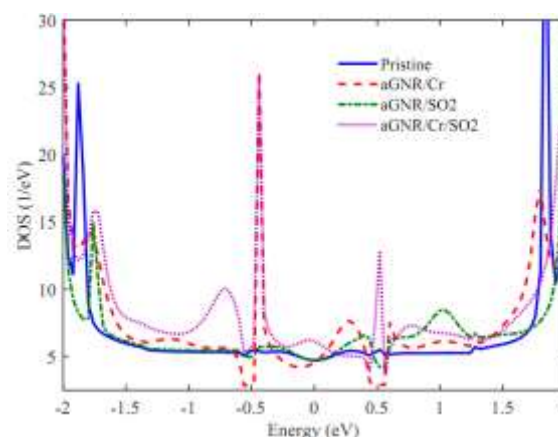
همچنین پیشنهاد می‌شود که از سایر مواد دو بعدی جدید نظیر گرافاین، گرافداین، سیلیسن، ژرمنن، فسفرن با توجه به ویژگی‌های جالب الکترونیکی، نیز جهت طراحی حسگر بهره گرفته شود.

#### ۹- منابع

- [1] Hao, T., and Chiang, K. S., "Graphene-Based Ammonia-Gas Sensor Using In-Fiber Mach-Zehnder Interferometer," IEEE Photonics Technology Letters, Vol.29, No.23, 2017.
- [2] Jiao Y., C. W. Young, S. Yang, S. Oren, H. Ceylan, S. Kim, K. Gopalakrishnan, P. C. Taylor, and L. Dong, "Wearable Graphene Sensors With Microfluidic Liquid Metal Wiring for Structural Health Monitoring and Human Body Motion Sensing," IEEE Sensors Journal, Vol.16, No.22, 2016.
- [3] Moldovan, O., Iñiguez, B., Jamal Deen M., and Luis Marsal, F., "Graphene Electronic Sensors—Review of Recent Developments and Future Challenges," IET Circuits Devices Syst, Vol.96, pp.446–453, 2015.
- [4] Stephanie, A., and Hooker, S., "Nanotechnology Advantages Applied to Gas Sensor Development," The Nanoparticles Conference Proceedings, Vol.63, pp.104-153, 2002.
- [5] Han, J., and Ma, J., "One-Step Synthesis of Graphene Oxide–Thionine–Au Nanocomposites and its Application for Electrochemical Immunosenesing," Biosens. Bioelectron, Vol.47, pp.243–247, 2013.
- [6] Mohammad A. A., Mark M.C., Jimmy C.M. Chen, and Chung-Tse M.W., "Microwave Gas Sensor based on Graphene-loaded Substrate Integrated Waveguide Cavity Resonator," IEEE, Vol.16, 2016.
- [7] Sanchez, V.C., Jachak, A., and Hurt, R.H., "Biological Interactions of Graphene-Family Nanomaterials," An Interdisciplinary Review, Vol.25, pp.15–34, 2012.



شکل (۱۲) نمودارهای عبور بر حسب انرژی در حالت‌ها بدون تزریق ناخالصی و با ناخالصی کرم و جذب مولکول SO<sub>2</sub> در نانونوار گرافنی نوع آرمچیر.



شکل (۱۳) نمودار چگالی حالت‌ها بر حسب انرژی برای تمامی حالت‌های ذکر شده در نانونوار گرافنی نوع آرمچیر.

دلیل این امر وجود اوربیتال d در عنصر کرم است که باعث افزایش تعداد الکترون‌ها در باند ظرفیت شده است.

#### ۸- نتیجه‌گیری

هدف از مقاله بهبود تشخیص گاز سمی SO<sub>2</sub> بر اساس حسگرهای گرافنی بود که به طراحی حسگرگازی مبتنی بر گرافن اختصاص داده شد. حسگر طراحی شده مبتنی بر نانونوارهای گرافنی شامل نوع آرمچیر و زیگزاگی به همراه تزریق ناخالصی کرم بود. در ابتدا ساختار حسگر به همراه الکترودهای موجود در دو طرف (الکتروده ۱ و ۲) جهت اعمال گرایش با تزریق ناخالصی کرم و مولکول SO<sub>2</sub> طراحی و مدل‌سازی شد. در ادامه مشخصات الکترونیکی حسگر گاز مانند مشخصه جریان-ولتاژ بررسی شد. دیده شد که تزریق کرم باعث کاهش میزان جریان در ولتاژ ثابت نسبت به حالت



- 
- [8] Park, J., Yang, H., Park, K.S., Lee, E.K., Chem, J. "Effects of Nonmagnetic Impurities on the Spin Transport Property of a Graphene Nanoribbon Device Phys," Chemical Physics, Vol.130, pp.1-7, 2009.
- [9] Shao, L., Guangde Chen Y., Honggang, Y., HaiboNiu, N., YelongWu, W., Zhu Y., and Ding B., "Sulfur Dioxide Molecule Sensors based on Zigzag Graphene Nanoribbons with and Without Cr Dopant," Physics Letters, Vol.378, pp.667-671, 2014.