Journal of Iranian Association of Electrical and Electronics Engineers
Vol. 22 No. 1, 2025
DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.100

Theoretical Design and Characterization of Borophene-based Nanosensors for Detecting Toxic Gases

Shadi Cheshmehkhavar[1] , Seyyedeh Fatemeh Molaeezadeh[2]

[1] MSc Student, Department of Electrical and Computer Engineering, Jundi-Shapur University of Technology, Dezful, Iran
shadicheshmeh@gmail.com
[2] Assistant Professor, Department of Electrical and Computer Engineering, Jundi-Shapur University of Technology, Dezful, Iran
fmolaee@jsu.ac.ir

Abstract:

The detection and removal of toxic gases, especially at low concentrations with high sensitivity, is crucial in various applications. This study investigates the adsorption of NO_2 gas molecules on two-dimensional nanosheets and one-dimensional nanoribbons, focusing on their impact on the electronic structure and transport properties of two stable phases, namely χ_3 and β_{12}. Computational simulations using Density Functional Theory (DFT) and Non-Equilibrium Green's Function theory (NEGF) were conducted with the VNL-ATK software package. The study reveals that the sensing performance of borophene nanoribbons depends on their geometrical structure, gas adsorption sites, and charge transfer direction. Notably, armchair χ_3 nanoribbons show a 62% relative current change, and zigzag β_{12} nanoribbons show a 38% change after gas adsorption within the 0.1 to 1.5 V range. Both types exhibit similar current changes of about 32% at 0.1 V. These results highlight the exceptional sensitivity and selectivity of armchair χ_3 borophene nanoribbons for detecting small gas molecules like NO_2, underscoring their potential in advanced gas sensing technology development.

Keywords: χ_3 & β_{12} Borophene, Zigzag &Armchair Nanoribbons, Transport Properties, Adsorption Behaviours, Density Functional Theory, Non-Equilibrium Green's Function, NO2 gas molecule.

Article Type: Research

Received: 03. 07. 2023

Revised: 07. 06. 2024

Accepted: 29. 09. 2024

Corresponding author: S.F.Molaeezadeh

Corresponding author's address: Elec. Comp. Eng. Dep., Jundi-Shapur Uni. Of Tech., Dezful, Iran

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

Copyright © 2025 The Authors. Published by Iranian Association of Electrical and Electronics Engineers.
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/). Non-commercial uses of the work are permitted, provided the original work is properly cited.

1. Motivation of the work

Air pollution has become a serious issue with the rapid development of industrial technology and traffic, posing significant threats to human health and the environment. Toxic gases like NO_2 contribute to cardiovascular and respiratory diseases, stunted plant growth, metal corrosion, greenhouse effects, and ozone layer depletion. This highlights the need for efficient gas sensors to monitor and remove harmful gases.

Two-dimensional nanomaterials, particularly borophene, have shown promise in detecting hazardous gases at low concentrations due to their high surface-to-volume ratio. Since the successful synthesis of borophene in 2015 [1] and the synthesis of Borophene nanoribbons of χ_3 and β_{12} phases in 2017 [2], their unique and tunable physical and chemical properties have made them promising candidates for advanced gas sensors.

To our knowledge, studies on nanosheets and nanoribbons of the χ_3 and β_{12} phases of borophene are very limited. Additionally, research on the adsorption behavior and electronic transport of small gas molecules on these phases of borophene is still in its early stages. These are the main motivations for this paper.

2. Contributions

In this study, we aim to investigate and compare the adsorption behavior of NO_2 gas on these two stable structural phases of borophene, i.e χ_3 and β_{12} phases. To achieve this, we simulate the nanostructures using the VNL-ATK environment and Density Functional Theory (DFT) framework. This allows us to provide essential information on possible adsorption configurations, favorable adsorption sites, adsorption energy, electron transfer, and changes in electronic properties, which are crucial for developing gas sensors. Additionally, we will examine the transport and sensing performance of armchair and zigzag nanoribbons of these two structural phases based on Non-Equilibrium Green's Function (NEGF) theory.

3. Procedures

Our methodology is as follows: 1) Construct χ_3 and β_{12} Borophene sheets: Optimize unit cells and use supercells with desired dimensions. Apply a 15Å vacuum along the A-axis to prevent wavefunction overlap; 2) Create armchair and zigzag nanoribbons: Cut the borophene sheet in different directions. Rotate the unit cell and use supercells with desired dimensions. Apply a 15Å vacuum in the A-axis and an 8Å vacuum in the B-axis to convert the material from 2D to 1D; 3) Investigate the impact of NO_2 molecule adsorption on Borophene nanostructures: Optimize the NO_2 molecule and place it in various symmetrical positions on each nanostructure. Approach the molecule perpendicularly from both O and N sides. After adsorption, relax the system. Calculate adsorption energy, charge density difference, and density of states (DOS) using DFT with the PBE functional and GGA method. Identify the most stable adsorption position by calculating adsorption energies. Analyze charge density difference and DOS to study electronic properties; and 4) Evaluate the impact of NO_2 molecule adsorption on transport properties*:* Assess nanoribbons as nanosensors by calculating current-voltage characteristics, relative current changes, and transmission spectra at the most stable position. Study electronic transport and current as a function of bias voltage using the NEGF method in VNL-ATK software. Convert armchair and zigzag nanoribbons of both χ_3 and β_{12} phases into devices to obtain current-voltage characteristics and transmission.

4. Findings

The *NO_2* molecule absorbs more energy from the N side. Nanoribbons exhibit higher adsorption energy than nanosheets. In the χ_3 and β_{12} phases of borophene, the highest adsorption energy occurs at edge positions B1 or B2 in both armchair and zigzag nanoribbons. The non-zero DOS in the Fermi region indicates that both phases of borophene are metallic. After *NO_2* adsorption, they maintain their metallic properties, and DOS changes imply that the structure detects the NO2 molecule.

The χ_3 phase armchair borophene nanoribbon shows relative current variations of 62% (N) and 55% (O) at 0.1 to 1.5 volts, while the zigzag nanoribbon shows 20% (N) and 11% (O). This higher sensitivity makes the armchair nanoribbon a superior *NO_2* gas sensor. In the β_{12} phase, the armchair nanoribbon has relative current variations of 6% (N) and 11% (O), compared to 38% (N) and 24% (O) in the zigzag nanoribbon. Adsorption from the N atom induces more current change, and the β_{12} phase zigzag nanoribbon shows greater current changes after *NO_2* adsorption than the armchair nanoribbon, indicating higher sensitivity.

The χ_3 phase armchair nanoribbon has a Fermi level transmission coefficient of 2, while the zigzag nanoribbon's coefficient is 5.43, indicating higher current. Post-*NO_2* adsorption, these coefficients drop to 1.99 (O) and 1.13 (N) for the armchair nanoribbon, and to 4.72 (O) and 4.42 (N) for the zigzag nanoribbon, showing higher *NO_2* sensitivity in the armchair nanoribbon. For the β_{12} phase, the armchair nanoribbon's coefficients are 3.75 and 3.87, respectively. After *NO_2* adsorption, these decrease to 3.56 (O) and 3.51 (N) for the armchair nanoribbon, and to 2.45 (O) and 2.26 (N) for the zigzag nanoribbon. Adsorption from the N atom causes a greater reduction in transmission coefficient and current, with the β_{12} phase zigzag nanoribbon showing more significant changes post-*NO_2* adsorption, indicating higher sensitivity.

5. Conclusion

This study shows that the stability and adsorption energy of *NO_2* molecules vary across different sites and orientations in borophene nanostructures. Armchair and

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

zigzag nanoribbons in both phases exhibit higher adsorption energy and stability compared to nanosheets. Due to unsaturated bonds at the edges, adsorption energy is higher in these regions, making chemical bond formation more likely.

Additionally, the impact of NO_2 gas molecule adsorption on transport properties varies between armchair and zigzag nanoribbons in each phase. In the χ_3 phase, the armchair nanoribbon shows higher sensitivity to NO_2, while in the β_{12} phase, the zigzag nanoribbon exhibits greater sensitivity. Among the studied nanostructures, the armchair nanoribbon in the χ_3 phase shows the highest relative current change upon NO_2 adsorption, making it a suitable candidate for NO_2 gas detection.

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

نشریه مهندسی برق و الکترونیک ایران

نشریه مهندسی برق و الکترونیک ایران، سال بیست و دوم، شماره اول، بهار ۱۴۰۴، صفحات ۱۰۰-۱۱۱

DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.100

طراحی نظری و مشخصه‌یابی نانوحسگرهای مبتنی بر بروفن برای شناسایی گازهای سمی

شادی چشمه خاور[۱] ، سیده فاطمه مولایی زاده[۲]

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد- دانشکده‌ی مهندسی برق و کامپیوتر- دانشگاه صنعتی جندی‌شاپور دزفول- دزفول- ایران

shadicheshmeh@gmail.com

۲- استادیار- دانشکده‌ی مهندسی برق و کامپیوتر- دانشگاه صنعتی جندی‌شاپور دزفول- دزفول- ایران

fmolaee@jsu.ac.ir

چکیده: تشخیص و حذف گازهای سمی خصوصاً در غلظت‌های کم با حساسیت بسیار بالا امری مهم به شمار می‌آید. در این پژوهش، جذب مولکول گاز NO_2 بر روی نانوصفحات دوبُعدی و نانوریبون‌های یک‌بُعدی دو فاز پایدار χ_3 و β_{12} بروفن بررسی و تاثیر جذب بر ساختار الکترونی و ترابرد نانوریبون‌های بروفن مطالعه می‌شود. شبیه‌سازی محاسباتی نانوساختارهای بروفن در چهارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و نظریه تابع غیرتعادلی گرین (NEGF) و با بهره‌گیری از بسته‌ی نرم‌افزاری VNL-ATK انجام می‌شود.

نتایج نشان می‌دهد عملکرد حسگری به ساختار هندسی بروفن، موقعیت‌های جذب گاز و جهت ترابرد بار الکتریکی وابسته است. بیشترین بازه تغییرات نسبی جریان در دستگاه‌های مبتنی بر نانوریبون آرمچیر χ_3 و نانوریبون زیگزاگ β_{12} قبل و بعد از جذب گاز در محدوده‌ی ۰/۱ تا ۱/۵ ولت به ترتیب ۶۲٪ و ۳۸٪ است. تغییرات نسبی جریان در ولتاژ ۰/۱ ولت برای هر دو دستگاه مذکور تقریبا با هم برابر و حدود ۳۲٪ است. بالا بودن تغییرات نسبی جریان در نتیجه جذب NO_2 در ولتاژهای کم نشان می‌دهد که سنسورهای مبتنی بر نانوریبون آرمچیر بروفن فاز χ_3 حساسیت و انتخاب‌پذیری بالایی را برای آشکارسازی مولکول‌های کوچک گاز NO_2 دارند.

کلمات کلیدی: فازهای χ_3 و β_{12} بروفن، نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ، حسگر گاز، خصوصیات ترابرد، رفتارهای جذبی، نظریه تابعی چگالی (DFT)، نظریه تابع غیرتعادلی گرین (NEGF)، مولکول گاز NO_2.

نوع مقاله: پژوهشی

دریافت: ۱۴۰۲/۰۴/۱۲

بازنگری: ۱۴۰۳/۰۳/۱۸

پذیرش: ۱۴۰۳/۰۷/۰۸

نام نویسنده‌ی مسئول: دکتر سیده فاطمه مولایی زاده

نشانی نویسنده‌ی مسئول: ایران-خوزستان-دزفول- بلوار سرداران شهید- دانشگاه صنعتی جندی شاپور دزفول- دانشکده‌ی مهندسی برق و کامپیوتر

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

حق انتشار این مستند، متعلق به نویسندگان آن است. ۱۴۰۴ ©. ناشر این مقاله، انجمن مهندسین برق و الکترونیک ایران است.

این مقاله تحت گواهی زیر منتشرشده و هر نوع استفاده غیرتجاری از آن مشروط بر استناد صحیح به مقاله و با رعایت شرایط مندرج در آدرس زیر مجاز است.

Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International license

(https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

۱- مقدمه

با توسعه سریع تکنولوژی صنعتی و ترافیک، آلودگی هوا به یک مسئله جدی تبدیل شده است. وجود بیش از حد گازهای سمی نه تنها تهدیدی برای سلامت انسان به شمار می‌آید، بلکه به محیط زیست نیز صدمه جدی وارد می‌کند[۱]. گازهای سمی نظیر NO_2 دلیل اصلی وخامت بیماری‌های قلبی-عروقی و تنفسی، عدم رشد گیاهان، خورندگی فلزات، اثرات گلخانه‌ای و تخریب لایه اُزون هستند. اثرات جدی این گازها نیاز به حسگرهای گازی کارآ را برای پایش و حذف گازهای مضر افزایش داده است[۲،۳].

نانو مواد دوبُعدی به دلیل داشتن نسبت سطح به حجم بالا به طور وسیعی برای شناسایی گازهای خطرناک خصوصاً در غلظت‌های نسبتاً پایین استفاده می‌شوند[۴،۵]. سنتز موفقیت‌آمیز بروفن در سال ۲۰۱۵، چشم‌انداز روشنی را در تحقیقات مرتبط با حسگری گاز می‌گشاید[۶]. بروفن یک ماده آلوتروپیک[۱] با یک ساختار فلزی بسیار ناهمسانگرد، نازک و سبک است. خصوصیات فیزیکی و شیمیایی بی‌نظیر و قابل تنظیم آن می‌تواند بروفن را به عنوان یک کاندید بالقوه در طراحی حسگرها مطرح نماید[۷،۸،۹].

مطالعات نشان می‌دهد برهم‌کنش بروفن مثلثی و مولکول‌های کوچک گاز در مقایسه با گرافن بسیار قوی‌تر است. با این حال، این ماده دوبُعدی بدون بستر[۲] پایدار نیست. از این رو، با ایجاد نقص‌های نقطه‌ای یا شش‌ضلعی‌های توخالی در بروفن مثلثی، آلوتروپ‌های دیگری نظیر χ_3 و β_{12} سنتز شدند[۶،۱۰]. ویژگی جالب این دو نانوصفحه‌ی بروفن، آن است که پایدار هستند و بدون بستر می‌توانند وجود داشته باشند[۱۱]. همین امر سبب شده است تا این دو فاز بروفن در این پژوهش مورد توجه قرار گیرند.

دو فاز χ_3 و β_{12} بروفن دارای ساختار هندسی کاملاً مسطح بوده و ساختار نواری آن‌ها ماهیت فلزی بروفن را در این فازها تأیید می‌کند درحالیکه برخی نانومواد مانند گرافن و فسفرن، نیمه‌رسانا و برخی دیگر مانند نیترید بور شش‌ضلعی تک لایه، عایق کامل هستند. صفحات بروفن برخلاف گرافن دارای قابلیت ناهمسانگردی در خواص مکانیکی هستند. این ناهمسانگردی در هدایت الکتریکی نیز گزارش شده است که باعث می‌شود ورق بروفن یک گزینه ایده‌آل برای تنظیم دقیق ادوات الکترونیکی باشد[۱۲].

نانوریبون‌های فازهای χ_3 و β_{12} بروفن در سال ۲۰۱۷ سنتز شدند. مطالعه خواص الکترونی نانوریبون‌های بروفن (BNR)[۳] نشان داده است که پیوند قوی بین اتم‌های بور، آن را از سایر نانوریبون‌های دوبُعدی متمایز می‌کند به طوری که همه نانوریبون‌های آن، فلزی هستند[۷]. تنوع در لبه نانوریبون‌ها منجر به آلوتروپ‌های مختلف با خصوصیات جذاب و منحصر به فرد می‌شود. نانوریبون‌های آرمچیر[۴] و زیگزاگ دارای خاصیت فلزی هستند[۱۳]. مطالعه خواص نانوریبون‌های بروفن از اهمیت قابل توجهی برخوردار است و می‌تواند قابلیت به‌کارگیری آن‌ها را در حسگرهای گازی امکان‌پذیر سازد[۱۴].

تا آنجا که می‌دانیم مطالعات انجام شده در زمینه نانوصفحات و نانوریبون‌های فازهای χ_3 و β_{12} بروفن بسیار اندک است. به عنوان مثال، در سال ۲۰۱۷، جذب گازهای CO_2، CO، NO_2، NO و NH_3 بر روی نانوصفحه‌ی بروفن مورد بررسی قرار گرفت و نشان داده شد تغییر جریان ناشی از برهم‌کنش‌های فوق را می‌توان به عنوان حالت روشن/خاموش برای ساخت دستگاه حسگر گاز مبتنی بر بروفن در نظر گرفت. همچنین، درمقایسه با فسفرن، گرافن و MoS_2، گازها پیوند قوی‌تری بر روی بروفن دارند[۱۵]. در سال ۲۰۱۸ دریافتند بروفن از توانایی و ظرفیت جذبی خوبی نسبت به مولکول SO_2 برخوردار است[۹] در سال ۲۰۲۱، رفتارهای جذبی گازهای CO، CO_2، NO، NO_2 و NH_3 بر روی نانوصفحات فاز β_{12} بروفن بررسی شد و مشخص شد بروفن به دلیل برهم‌کنش قوی با گازهای CO، NO، NO_2 و NH_3 می‌تواند به عنوان یک ماده حسگری حساس به گازهای سمی مورد استفاده قرار گیرد[۱۶].

در سال ۲۰۱۹، مطالعه‌ای بر روی جذب مولکول‌های سولفید هیدروژن (H_2S) بر روی نانوریبون فاز χ_3 بروفن انجام شد. نتایج نشان داد که مولکول H_2S باعث کاهش قابل توجه جریان در منحنی جریان-ولتاژ نانوریبون فاز χ_3 بروفن می‌شود و برای حسگری گاز H_2S مناسب است[۱۷]. در سال ۲۰۲۰، رفتار جذبی گازهای CO، CO_2، NO، NO_2 و NH_3 بر روی فاز β_{12} بروفن بر بستر MoS_2 بررسی شد و نتایج نشان داد جذب NH_3 بر روی بروفن بسیار قوی‌تر از گرافن است. همچنین خصوصیات ترابردی و عملکرد حسگری نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} بروفن بررسی شد و نشان داده شد عملکرد حسگری بروفن در معرض NH_3 قوی‌تر است[۱۸]. در سال ۲۰۲۲، رفتار جذبی گازهایCO، CO_2، NO، NO_2 و NH_3 بر روی فاز χ_3 بروفن با بستر WSe_2 بررسی شد و نشان داده شد گازهای CO، NO، NO_2 و NH_3 بر روی نانومواد به صورت شیمیایی جذب می‌شوند و مولکول گاز CO_2 به صورت فیزیکی جذب می‌شود. خصوصیات ترابردی و عملکرد حسگری نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 نیز بررسی شد و نشان داده شد بروفن نسبت به NO حساس‌تر است[۱۹].

تحقیقات در زمینه بررسی رفتار جذبی و ترابرد الکتریکی مولکول‌های کوچک گاز بر روی فازهای χ_3 و β_{12} بروفن در مراحل اولیه خود قرار دارد. از این رو، در این مطالعه قصد داریم رفتار جذبی گاز NO_2 را در این دو فاز ساختاری بروفن بررسی و با هم مقایسه نماییم. برای این منظور، با شبیه‌سازی نانوساختارها در محیط VNL-ATK و در چهارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT)[۵] [۲۰]، می‌توان اطلاعات مهمی در مورد پیکربندی‌های احتمالی جذب، موقعیت‌های مستعد جذب، انرژی جذب، انتقال الکترون و تغییر در خصوصیات الکترونی را فراهم کرد که می‌تواند نقش مهمی در ساخت و توسعه حسگرهای گاز داشته باشد. سپس ترابرد و عملکرد حسگری

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ این دو فاز ساختاری را بر مبنای تابع غیرتعادلی گرین (NEGF)[۶] [۲۱] بررسی می‌کنیم.

۲- روش انجام پژوهش

روش انجام پژوهش در سه مرحله خلاصه شده است: ساخت مدل‌های نانوساختارهای بروفن، تاثیر جذب مولکول NO_2 بر نانوساختارهای بروفن و تاثیر جذب مولکول NO_2 بر ترابرد نانوساختارهای بروفن. در ادامه، توضیحات هر مرحله بیان می‌گردد.

۲-۱- ساخت مدل‌های نانوساختارهای بروفن

به منظور مدلسازی صفحات χ_3 و β_{12} بروفن مناسب برای جذب مولکول‌های گاز، ابتدا سلول‌های واحد اولیه[۷] آن‌ها را بهینه کرده سپس از ابر یاخته‌ها[۸] با ابعاد مورد نظر استفاده می‌شود. در راستای محور A به اندازه ۱۵Å خلاء ایجاد می‌کنیم تا تابع موج‌های دو لایه مجاور با هم برهمنهی نداشته باشند. فازهای χ_3 و β_{12} دارای ناهمسانگردی هستند، از این رو می‌توان با برش در جهت‌های مختلف از صفحه‌ی بروفن، نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ را به وجود آورد. ساخت نانوریبون‌های هر فاز به گونه‌ای صورت می‌گیرد که ابتدا سلول واحد اولیه را در دو جهت چرخش می‌دهیم، سپس از ابر یاخته با ابعاد مورد نظر استفاده می‌کنیم. علاوه بر خلاء ۱۵Å در راستای محور A، برای تبدیل آن از نانومواد دوبُعدی به یک‌بُعدی در راستای محور B به اندازه ۸Å خلاء ایجاد می‌کنیم. جهت‌های چرخش به گونه‌ای در نظر گرفته می‌شود که منتج به نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ شود.

لازم به ذکر است برای ساخت سیستم‌هایی با ابعاد کمتر از سه بُعد، در رهیافت‌های مبتنی بر شرایط تناوبی، وارد کردن خلاء در راستای مطلوب، معادل با محدود بودن سیستم در آن راستا است.

۲-۲- تاثیر جذب مولکول NO_2 بر نانوساختارهای بروفن

برای بررسی تاثیر جذب مولکول بر روی نانوساختارها، ابتدا مولکول گاز NO_2 را بهینه کرده، سپس آن را در موقعیت‌های تقارنی متفاوت هر نانوساختار قرار می‌دهیم. با توجه به اینکه مولکول NO_2 دارای یک اتم نیتروژن و دو اتم اکسیژن است، امکان جذب مولکول از سمت اتم O و N وجود دارد، به همین خاطر ما مولکول NO_2 را از هر دو سمت در جهت عمود به ساختار بروفن نزدیک می‌کنیم. پس از جذب مولکول بر روی سطح نانوساختارها، واهلش[۹] انجام می‌دهیم. با استفاده از نظریه DFT، انرژی جذب، تفاضل چگالی بار[۱۰] و چگالی کل حالت‌ها (DOS)[۱۱] در موقعیت‌های متمایز تقارنی محاسبه می‌شود. از تابعی[۱۲] PBE[۱۳] با روش تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)[۱۴] برای تابعی‌های تبادلی همبستگی[۱۵] استفاده می‌شود. برای یافتن پایدارترین موقعیت جذب، انرژی جذب موقعیت‌های متفاوت را محاسبه می‌کنیم. موقعیتی که بیشترین انرژی جذب را داشته باشد، پایدارتر است. پس از آن برای بررسی ویژگی‌های الکترونی ساختارها، تفاضل چگالی بار و DOS را بررسی می‌کنیم.

۲-۳- تاثیر جذب مولکول NO_2 بر ترابرد

برای بررسی بهتر قابلیت نانوریبون‌ها به عنوان یک دستگاه نانوحسگر، مشخصه جریان-ولتاژ، تغییرات نسبی جریان و طیف انتقال[۱۶] را در پایدارترین موقعیت محاسبه خواهیم کرد. انتقال الکترونی و جریان الکتریکی به صورت تابعی از ولتاژ بایاس اعمال شده برای هر مولکول گاز با استفاده از تابع غیرتعادلی گرین (NEGF) در نرم‌افزار VNL-ATK مطالعه و بررسی خواهد شد. برای به دست آوردن مشخصه‌های جریان-ولتاژ و طیف انتقال، نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ هر دو فاز χ_3 و β_{12} را به دستگاه[۱۷] تبدیل می‌کنیم.

۳- نتایج

جدول (۱) پارامترهای مورد استفاده در این پژوهش را نشان می‌دهد که عبارتند از: ۱) بهینه کردن سلول واحد اولیه، ۲) محاسبه انرژی جذب، تفاضل چگالی بار و DOS نانوصفحات و نانوریبون‌ها و ۳) محاسبه مشخصه جریان-ولتاژ، تغییرات نسبی جریان و طیف انتقال دستگاه نانوریبون‌های فازهای χ_3 و β_{12}.

پارامترها بر اساس تست همگرایی برگزیده شدند. در تمامی مراحلی که احتیاج است بهینه‌سازی سلول واحد اولیه و واهلش جایگاه‌های اتمی پس از جذب مولکول گاز NO_2 صورت گیرد از پارامترهای مرتبط با هر ساختار که در جدول (۱) ذکر شده با استفاده از روش LBFGS[۱۸] با دقت ۰/۰۵ eV/Å استفاده می‌شود. در بهینه‌سازی و واهلش از روش DFTB استفاده شده است. برای نمایش انتقال بار بعد از جذب مولکول گاز، سطوح هم‌چگالی[۱۹] در تصاویر تفاضل چگالی بار با مقدار ۰±۰/۰۰۳ $e/Å^3$ انتخاب شده‌اند. مقادیر $+0/003e/Å^3$ و $-0/003e/Å^3$ به ترتیب نشان‌دهنده‌ی افزایش و کاهش چگالی بار بعد از جذب مولکول گاز هستند.

جدول (۱): پارامترهای مورد استفاده در بهینه‌سازی و انجام محاسبات

نانوساختار	انرژی قطع مش[۲۰] (Ry[۲۱])	مش نمونه‌برداری
سلول واحد اولیه فازهای χ_3 و β_{12}	۱۲۰	۱×۳×۳
نانوصفحه‌ی فازهای χ_3 و β_{12}	۱۴۰	۱×۳×۳
نانوریبون آرمچیر فازهای χ_3 و β_{12}	۱۷۰	۱×۱×۱۲
نانوریبون زیگزاگ فازهای χ_3 و β_{12}	۱۶۰	۱×۱×۸
دستگاه نانوریبون آرمچیر فازهای χ_3 و β_{12}	۲۰۰	۱×۱×۳۰
دستگاه نانوریبون زیگزاگ فازهای χ_3 و β_{12}	۱۸۰	۱×۱×۲۸

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

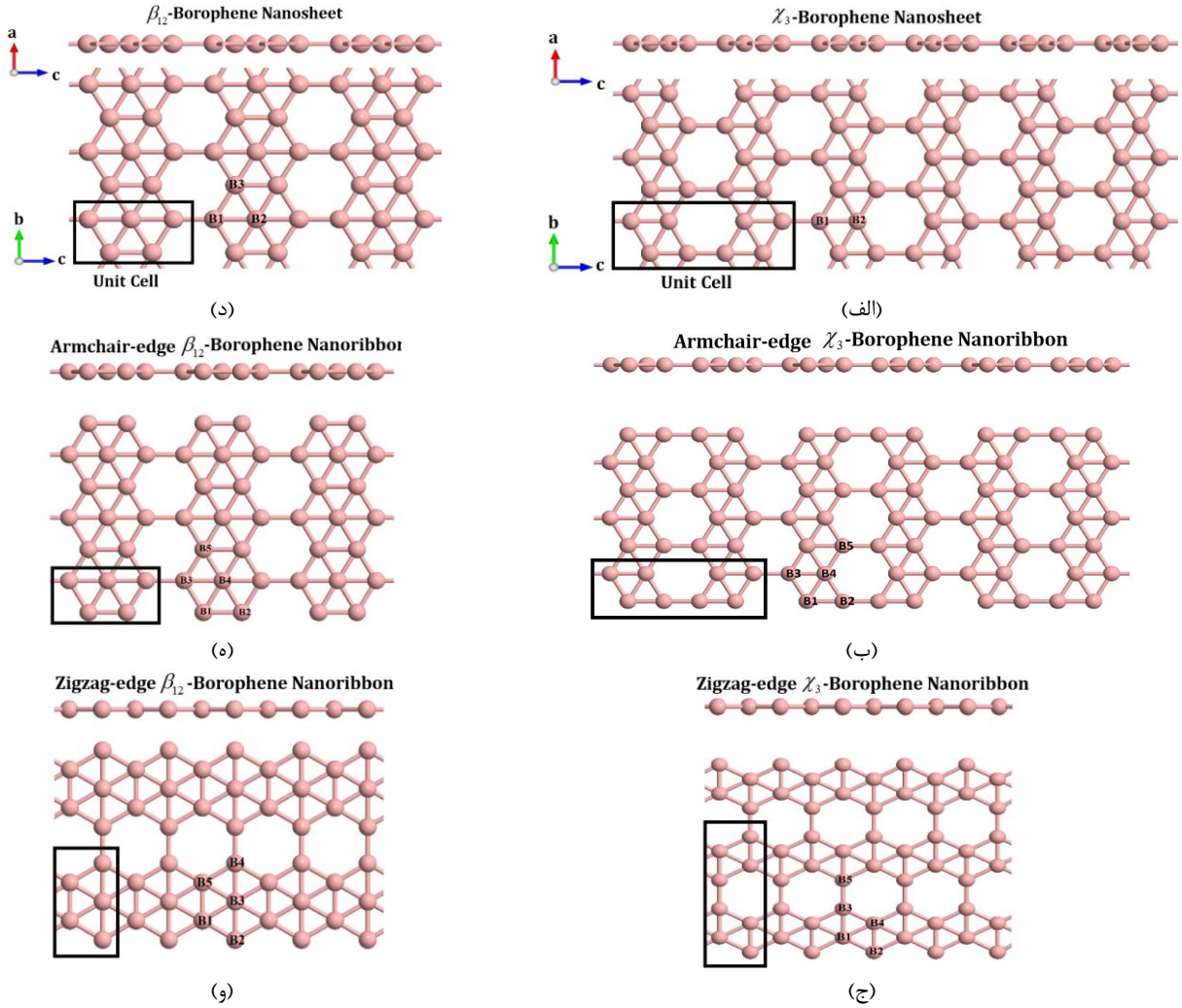
[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

۳-۱- نانوساختارهای فاز χ_3 و β_{12} بروفن و جذب مولکول گاز NO_2 بر روی آن‌ها

در شکل (۱) ساختار نانوصفحات فاز χ_3 و β_{12}، نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 بروفن و نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} بروفن به همراه موقعیت‌های متفاوت جذب نشان داده شده‌اند. به عنوان مثال، ساختار نانوصفحه‌ی فاز χ_3 بروفن از نظر تقارنی دارای دو موقعیت متمایز تقارنی B1 و B2 است، در حالیکه در ساختار نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن تعداد موقعیت‌های متمایز به پنج موقعیت (B1 تا B5) افزایش می‌یابد. این پنج موقعیت به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که دو موقعیت آن در لبه نانوریبون و دو موقعیت دیگر آن در همسایه اول لبه و یک موقعیت آن داخل ساختار قرار گرفته‌اند. دلیل انتخاب این پنج موقعیت این بوده است که انتظار می‌رود جذب در لبه‌های نانوریبون بیشتر باشد. در هر ساختار، مولکول گاز NO_2 در موقعیت‌های متفاوت از سمت اتم O و از سمت اتم N در جهت عمود، به ساختار بروفن نزدیک خواهد شد. در شکل (۲) به عنوان نمونه، جذب مولکول گاز NO_2 در موقعیت B1 ساختار نانوصفحه χ_3 بروفن نشان داده شده است.

۳-۱-۱- مقایسه انرژی جذب

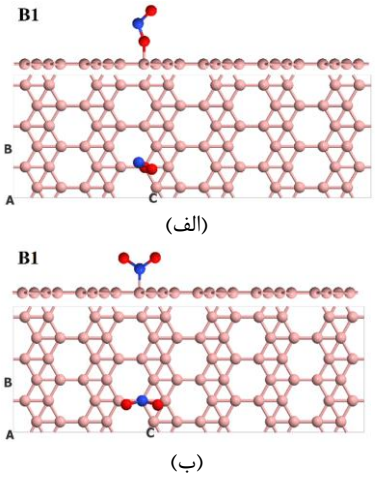
با استفاده از داده‌های حاصل از شبیه‌سازی، انرژی جذب مولکول گاز NO_2 در موقعیت‌های متمایز ساختارهای نانوصفحات و نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ χ_3 و β_{12} از سمت اتم O و از سمت اتم N محاسبه شد. با مقایسه انرژی جذب هر ساختار، می‌توان از نظر انرژی، مطلوب‌ترین و پایدارترین موقعیت را تعیین کرد. موقعیتی که بیشترین انرژی جذب را داشته باشد، پایدارتر است.



شکل (۱): نمایش سلول واحد اولیه، موقعیت‌های متفاوت جذب و ساختارهای مربوط به (الف) نانوصفحه فاز χ_3 بروفن، (ب) نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن، (ج) نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن، (د) نانوصفحه فاز β_{12} بروفن، (ه) نانوریبون آرمچیر فاز β_{12} بروفن و (و) نانوریبون زیگزاگ فاز β_{12} بروفن. سلول واحد اولیه با مستطیل مشکی رنگ و موقعیت‌های متفاوت جذب با حروف B1 تا B5 نشان داده شده است

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]



شکل (۲): نمایش جذب مولکول گاز NO_2 از نمای بالا و کنار در موقعیت B1 نانوصفحه χ_3 بروفن از سمت (الف) اتمO و (ب) اتم N

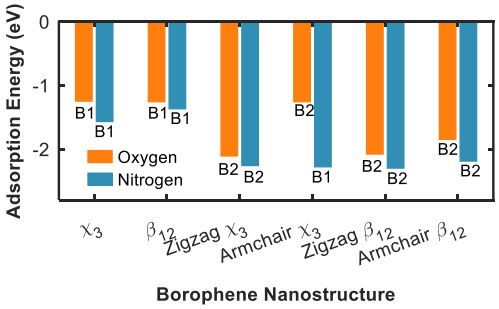
جدول (۲) و شکل (۳) به ترتیب یک مقایسه کمی و کیفی میان انرژی جذب NO2 در نانوساختارهای مختلف بروفن را نشان می‌دهد. همانطور که دیده می‌شود مولکول NO2 از سمت N با انرژی بیشتری جذب می‌شود و اتصال قوی‌تری را برقرار می‌کند. همچنین انرژی جذب درنانوریبون‌ها از نانوصفحات بیشتر است. علت این رفتار، هندسه لبه ساختار نانوریبون‌ها است که حساسیت و واکنش‌پذیری آن را افزایش داده است. بیشترین انرژی جذب نیز در هر کدام از ساختارهای نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 و β_{12} بروفن در موقعیت‌های B1 یا B2 قرار دارد که در لبه ساختار نانوریبون هستند.

جدول (۲): مقایسه انرژی جذب NO_2 در نانوساختارهای مختلف بروفن از سمت اتم‌های N و O

نام ساختار	جهت مولکول NO_2	انرژی جذب در موقعیت‌های مختلف جذب بر حسب الکترون ولت				
		B1	B2	B3	B4	B5
نانوصفحه فاز χ_3 بروفن	N	-۱/۵۷*	-۰/۵۷	-	-	-
	O	-۱/۲۵*	-۰/۶۰	-	-	-
نانوصفحه فاز β_{12} بروفن	N	-۱/۳۷*	-۰/۰۶	-۰/۸۸	-	-
	O	-۱/۲۶*	-۰/۳۴	-۱/۰۰	-	-
نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن	N	-۲/۲۸*	-۱/۶۳	-۱/۰۰	-۰/۰۲۷	-۱/۳۱
	O	-۱/۱۷	-۱/۲۶*	-۱/۰۰	-۰/۱۳	-۱/۱۶
نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن	N	-۰/۵۸	-۲/۲۶*	-۱/۲۰	-۰/۲۷	-۱/۸
	O	-۰/۵۷	-۲/۱۱*	-۱/۳۱	-۰/۶۱۱	-۱/۲۰
نانوریبون آرمچیر فاز β_{12} بروفن	N	-۲/۱۰	-۲/۱۹*	-۱/۳۵	-۰/۰۲	-۰/۷۴
	O	-۱/۸۴	-۱/۸۵*	-۱/۲۹	-۰/۲۷	-۱/۰۷
نانوریبون زیگزاگ فاز β_{12} بروفن	N	-۰/۹۱	-۲/۳۰*	-۰/۲۳	-۱/۱۶	-۰/۵۲
	O	-۰/۵۲	-۲/۰۸*	-۰/۰۷	-۱/۱۰	-۰/۸۰

مقادیری که با * مشخص شده‌اند، پایدارترین حالت هستند.

مقادیری که با - مشخص شده‌اند، برای صفحه معنی‌دار نیستند.



شکل (۳): مقایسه انرژی جذب NO_2 در نانوساختارهای بروفن از سمت اتم O و اتم N در موقعیت‌های B1 یا B2 که بیشترین انرژی جذب را دارند

۳-۱-۲- بررسی انتقال بار بعد از جذب

پدیده حسگری گاز به طور کلی به هندسه مُدهای جذبی مرتبط است. هر مُد جذبی نیز با توجه به پیوندهای جدید شکل گرفته، انتقال بار متفاوتی بین ساختار و مولکول ایجاد می‌کند. برای درک بهتر مکانیسم جذب، در شکل (۴) تفاضل چگالی بار نانوساختارهای فاز χ_3 و β_{12} بروفن پس از جذب مولکول گاز در موقعیت‌هایی که بیشترین انرژی جذب را مطابق با جدول (۲) داشتند، نشان داده شده است. نواحی افزایش چگالی بار به رنگ زرد و نواحی کاهش چگالی بار به رنگ آبی نمایش داده شده است. در این شکل، با توجه به انتقال بار مؤثر انجام شده بین مولکول NO_2 و ساختارها می‌توان نتیجه گرفت که مولکول گاز برهمکنش قوی با ساختارها دارد.

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

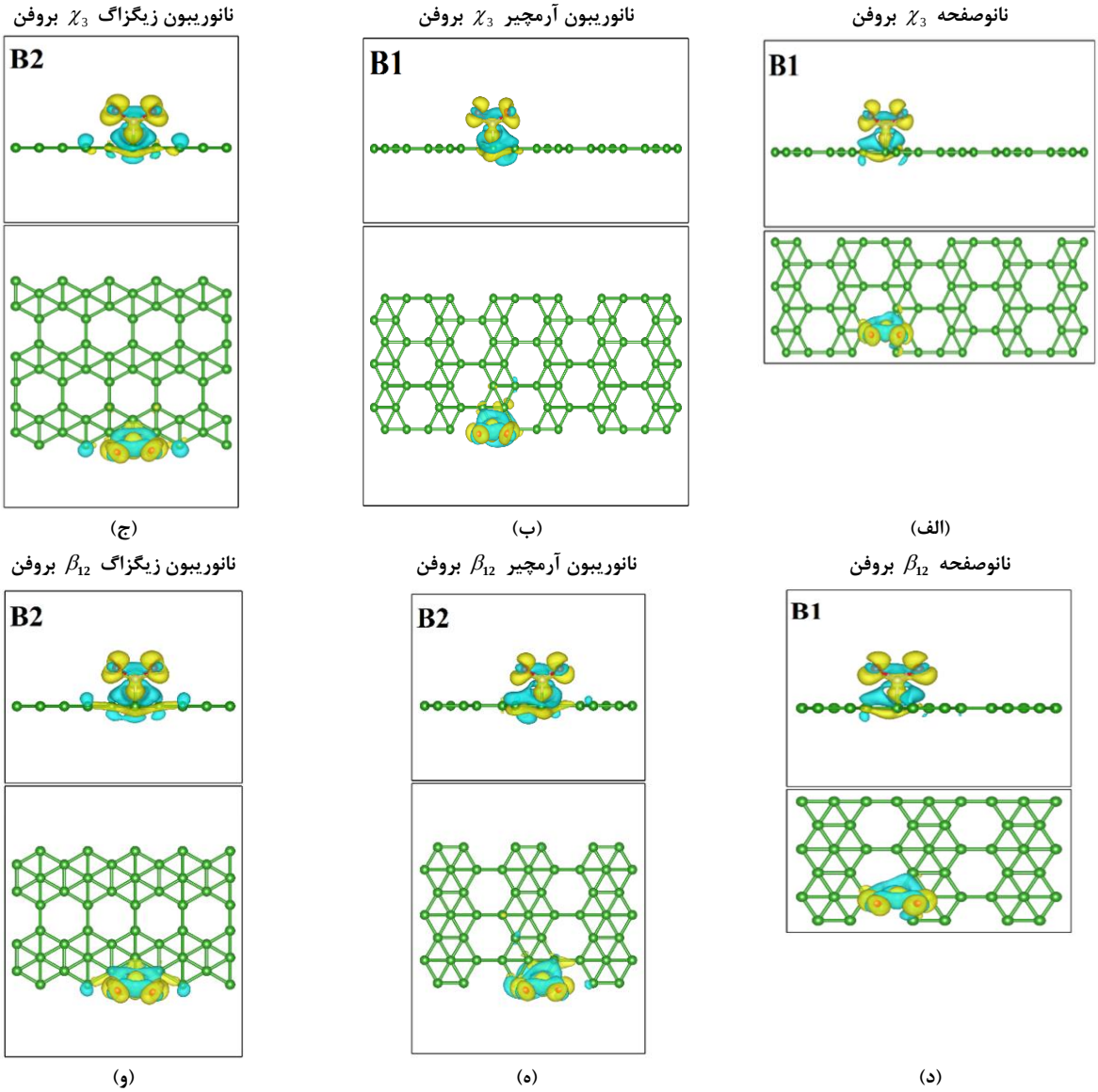
۳-۱-۳- مقایسه نمودارهای DOS

نمودارهای DOS برای تمامی موقعیت‌های قرارگیری مولکول NO_2 از سمت O و N بر روی هر ساختار بررسی شده است. با توجه به شباهت نمودارهای DOS در موقعیت‌های جذبی متفاوت، نمودارهای متناظر با حالت‌های پایدار انتخاب و در شکل (۵) نمایش داده شده‌اند.

با توجه به غیرصفر بودن نمودارهای DOS در ناحیه فرمی در شکل (۵) می‌توان نتیجه گرفت نانوساختارهای فاز χ_3 و β_{12} بروفن خاصیت فلزی دارند. پس از جذب مولکول گاز NO_2، ساختارها همچنان خاصیت فلزی خود را حفظ کرده‌اند. در نمودارهای DOS، قله‌ها نشان‌دهنده انرژی‌هایی هستند که تعداد حالات قرارگیری الکترون در آن‌ها بیشتر است. در نمودارها مشاهده می‌شود پس از جذب مولکول NO_2، تعداد حالات قرارگیری الکترون نسبت به حالت قبل از جذب تغییر می‌کند و در برخی از سطوح انرژی، قله‌ها منبسط شده و در برخی دیگر تیزتر شده‌اند. این تغییرات در چگالی حالت‌ها توسط گاز NO_2 به این معناست که ساختار، مولکول را حس کرده است.

۳-۲- تاثیر جذب مولکول NO_2 بر ترابرد

در این بخش تاثیر جذب مولکول گاز NO_2 بر ترابرد نانوریبون‌های فازهای χ_3 و β_{12} بروفن در موقعیت‌هایی که بیشترین انرژی جذب را داشتند مورد بررسی قرار گرفته است.



شکل (۴): نمایش تفاضل چگالی بار از نمای بالا و کنار پس از جذب مولکول گاز از سمت اتم N در موقعیت‌های B1 یا B2 که بیشترین انرژی جذب را داشتند برای (الف) نانوصفحه فاز χ_3 بروفن، (ب) نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن، (ج) نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن، (د) نانوصفحه فاز β_{12} بروفن، (ه) نانوریبون آرمچیر نانوصفحه فاز β_{12} بروفن و (و) نانوریبون زیگزاگ نانوصفحه فاز β_{12} بروفن. مقادیرسطوح هم‌چگالی، $\pm$ ۰/۰۰۳e/Å^3 هستند. رنگ‌های زرد و آبی به ترتیب افزایش و کاهش چگالی بار را نشان می‌دهد

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

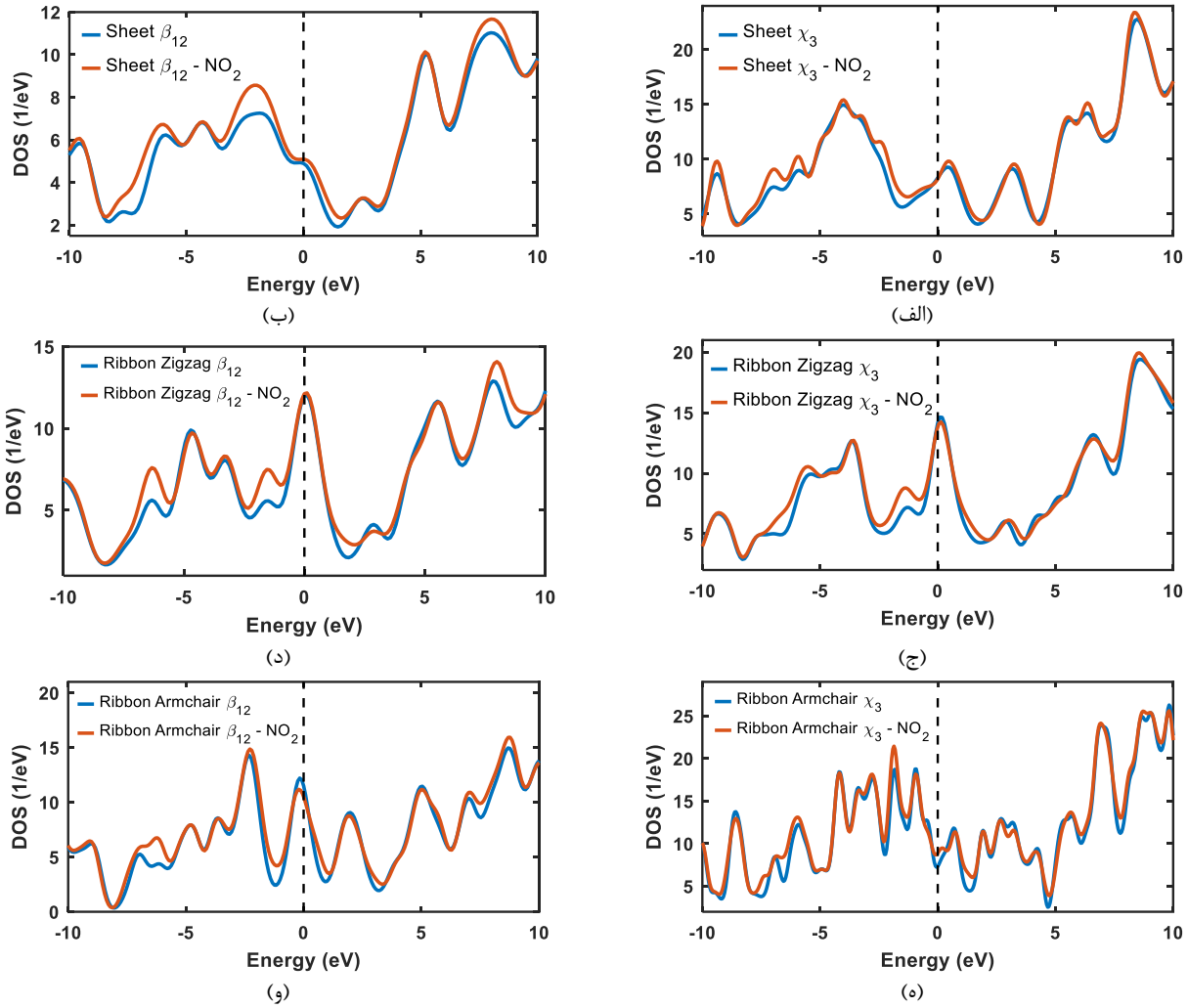
لازم به ذکر است با توجه به وجود چهار نانوریبون مختلف و امکان جذب بر روی ۵ موقعیت متمایز در هر ساختار و نهایتا احتمال اتصال از طریق اتم‌های نیتروژن و اکسیژن، محاسبات برای تعداد بالایی از ساختارهای ریبون + مولکول و مقایسه سیستماتیک بین آن‌ها انجام شده است.

۳-۲-۱- نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 بروفن

مشخصه جریان-ولتاژ و تغییرات نسبی جریان

برای به دست آوردن مشخصه‌های جریان-ولتاژ و طیف انتقال، نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 را به دستگاه تبدیل می‌کنیم. در شکل (۶) ساختار دستگاه نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 بروفن از نمای بالا و کنار نشان داده شده است. ساختار دستگاه از سه قسمت: الکترود چپ، الکترود راست و ناحیه‌ی پراکندگی تشکیل شده است.

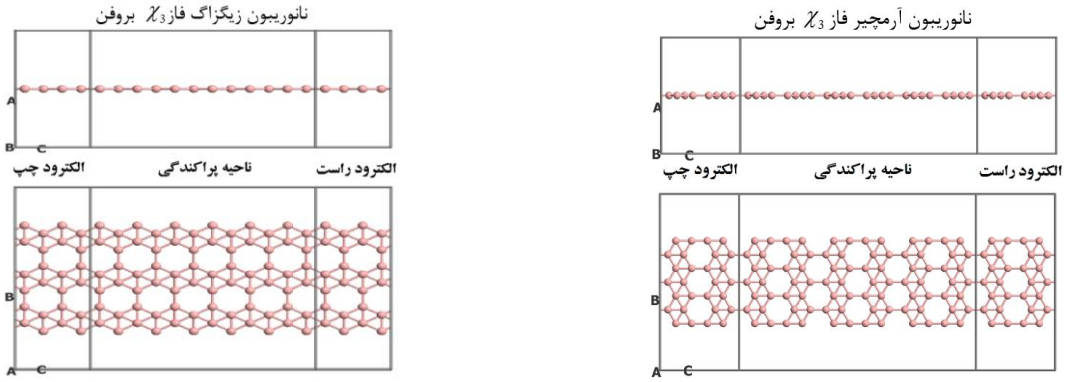
جذب مولکول NO_2 از سمت اتم O و اتم N بر روی ساختارهای دستگاه نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 بروفن در موقعیت‌هایی که بیشترین انرژی جذب را داشتند، انجام شده است. تاثیر جذب مولکول NO_2 بر هدایت الکتریکی در این موقعیت‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. مشخصه جریان-ولتاژ و تغییرات نسبی جریان قبل و بعد از جذب مولکول گاز NO_2 از سمت اتم O و اتم N برای ساختارهای



شکل (۵): نمودارهای DOS قبل و بعد از جذب مولکول NO_2 در موقعیت‌هایی با بیشترین انرژی جذب برای (الف) نانوصفحه‌ی فاز χ_3 بروفن، (ب) نانوصفحه‌ی فاز β_{12} بروفن، (ج) نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن، (د) نانوریبون زیگزاگ فاز β_{12} بروفن، (ه) نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن و (و) نانوریبون آرمچیر فاز β_{12} بروفن (سطح فرمی به صورت خط‌چین نشان داده شده است)

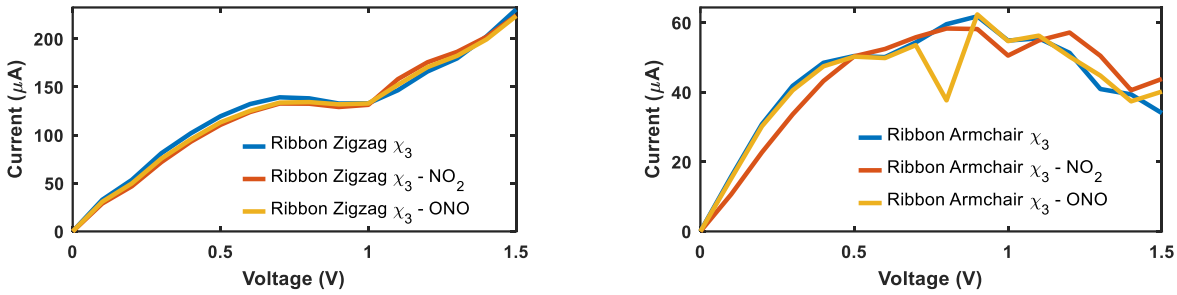
[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

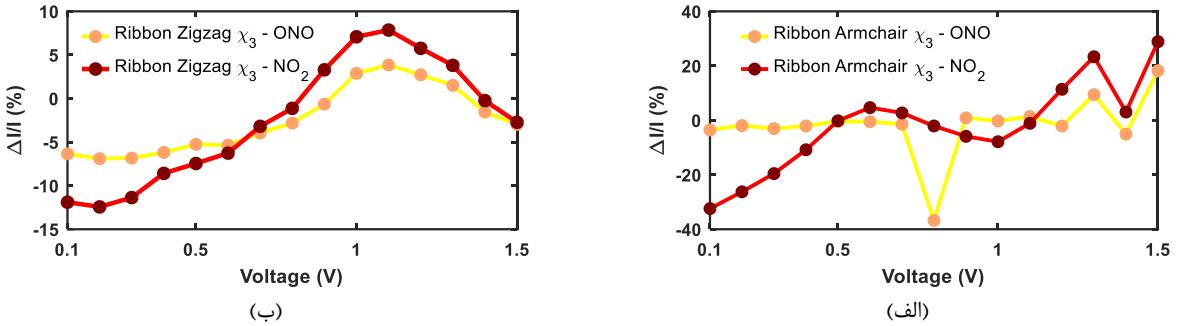


شکل (۶): نمای بالا و کنار ساختار دستگاه‌های مربوط به (الف) نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن و (ب) نانوریبون و زیگزاگ فاز χ_3 بروفن.

نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 بروفن در شکل‌های (۷) و (۸) نشان داده شده است. با توجه به نمودار جریان-ولتاژ ساختار نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن در شکل (۷)-الف می‌توان مشاهده کرد که هدایت الکتریکی ساختار در اثر جذب مولکول NO_2 از هر دو سمت اتم N و اتم O تغییر می‌کند. برای بررسی بهتر تغییرات ناشی از جذب، نمودار تغییرات نسبی جریان رسم شده است. در نمودار تغییرات نسبی جریان در شکل (۸)-الف مشاهده می‌شود جذب مولکول NO_2 از سمت



شکل (۷): نمودار جریان-ولتاژ برای (الف) نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن و (ب) نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن.



شکل (۸): نمودار تغییرات نسبی جریان قبل و بعد از جذب مولکول NO_2 از سمت اتم O و اتمN برای (الف) نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن و (ب) نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن.

اتم N بر روی ساختار نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن در ولتاژ کم ۰/۱ ولت منجر به کاهش ۳۲٪ جریان می‌شود که نشان دهنده یک پاسخ بسیار حساس است. روند تغییرات نسبی جریان به گونه‌ای است که با افزایش ولتاژ، تغییرات نسبی جریان کاهش یافته و سپس افزایش می‌یابد. به گونه‌ای که در ولتاژ ۱/۵ ولت، شاهد افزایش ۳۰٪ جریان نسبت به حالت قبل از جذب مولکول گاز NO_2 از سمت اتم N خواهیم بود. در جذب مولکول NO_2 از سمت اتم O تا ولتاژ ۰/۷ ولت، جریان تغییر چندانی نخواهد داشت اما در ولتاژ ۰/۸ ولت دارای کاهش ۳۷٪ جریان است و با افزایش ولتاژ، تغییرات نسبی جریان کاهش یافته و سپس افزایش می‌یابد تا درنهایت در ولتاژ ۱/۵ ولت، جریان ۱۸٪ افزایش یافته که این موضوع حساسیت زیاد ساختار را در این ولتاژها نشان می‌دهد. بازه تغییرات نسبی جریان برای ساختار نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن در بازه ولتاژهای ۰/۱ تا ۱/۵ ولت از سمت اتم N و اتم O به ترتیب با ۶۲٪ و ۵۵٪ است.

در نمودار جریان-ولتاژ ساختار نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن در شکل (۷)-ب مشاهده می‌شود که هدایت الکتریکی ساختار در اثر

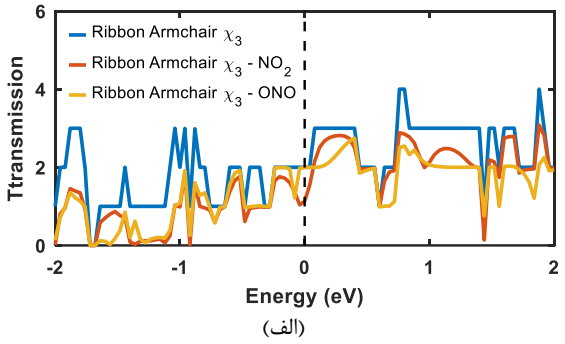
[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]
[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

جذب مولکول NO_2 تغییر می‌کند اما در مقایسه با ساختار نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن تغییرات کمتری از خود نشان می‌دهد. با توجه به نمودار تغییرات نسبی جریان این ساختار در شکل (۸)-ب می‌توان متوجه شد که ساختار پس از جذب مولکول از سمت اتم N شاهد کاهش ۱۲٪ جریان در ولتاژ ۰/۱ ولت است که این بدان معناست که ساختار وجود گاز را حس کرده و حساسیت خوبی از خود نشان می‌دهد. روند تغییرات به گونه‌ای است که با افزایش ولتاژ، تغییرات نسبی جریان کاهش یافته و سپس افزایش می‌یابد تا اینکه در ولتاژ ۱/۱ ولت به ۸٪ می‌رسد و پس از آن یک رفتار کاهشی را نشان می‌دهد. در جذب مولکول NO_2 از سمت اتم O، جریان رفتاری مشابه دارد اما با تغییرات نسبی کمتر، به گونه‌ای که در ولتاژ ۰/۱ ولت، جریان ٪۷ کاهش و در ولتاژ ۱/۱ ولت، جریان ۴٪ افزایش می‌یابد. از نتایج فوق می‌توان به این نتیجه دست یافت که جذب از سمت اتم O میزان تغییرات کمتری در جریان ایجاد می‌کند. بازه تغییرات نسبی جریان در ساختار نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن برای جذب از سمت اتم N حدود ۲۰٪ و برای جذب از سمت اتم O حدود ۱۱٪ است.

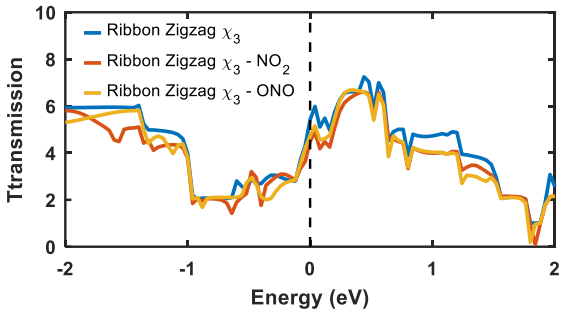
از مقایسه دو ساختار نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 بروفن می‌توان نتیجه گرفت که ساختار نانوریبون آرمچیر χ_3 پس از جذب تغییرات بیشتری را نسبت به نانوریبون زیگزاگ χ_3، از خود نشان می‌دهد که این، بیانگر حساسیت بیشتر این ساختار است؛ پس برای حسگر گاز NO_2، بهتر و مناسب‌تر خواهد بود.

طیف انتقال نانوریبون‌های فاز χ_3 بروفن

به منظور درک بهتر، طیف انتقال برای ساختارهای نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 بروفن بررسی شده است. از آنجا که جریان رابطه مستقیمی با میزان انتقال حامل‌های بار دارد، تغییر در میزان عبور باعث تغییر در جریان می‌شود. در شکل (۹) طیف انتقال ساختارهای نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز χ_3 بروفن قبل و بعد از جذب مولکول گاز NO_2 از هر دو سمت اتم‌های N و O تحت ولتاژ ۰/۱ ولت نشان داده شده است.



(الف)



(ب)

شکل (۹): نمایش نمودار طیف انتقال قبل و پس از جذب مولکول گاز NO_2از سمت اتم‌های N و O برای ساختار (الف) نانوریبون‌آرمچیر فاز χ_3 بروفن و (ب) نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن (سطح فرمی روی صفر تنظیم شده است).

مطابق با شکل (۹) ضریب انتقال ساختار نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن در سطح فرمی، ۲ است، در حالی که مقدار مربوطه در جهت زیگزاگ ۵/۴۳ است که این موضوع، بیشتر بودن میزان جریان ساختار زیگزاگ نسبت به حالت آرمچیر فاز χ_3 بروفن را اثبات می‌کند و در نمودارهای شکل (۷) به خوبی مشاهده می‌شود.

در نمودار طیف انتقال ساختار نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن در شکل (۹)-ب مشاهده می‌شود که ضرایب انتقال پس از جذب مولکول NO_2 از سمت اتم O به ۱/۹۹ و از سمت اتم N به ۱/۱۳ کاهش می‌یابند. از مقایسه این دو می‌توان نتیجه گرفت که حساسیت در جذب از سمت اتم N بیشتر است زیرا پس از جذب دارای ضریب انتقال کمتری خواهد بود و ساختار جریان کمتری را از خود عبور می‌دهد. شکل (۸)-الف نیز تاییدی بر ای این موضوع است.

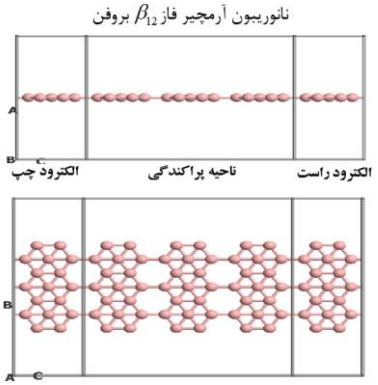
در نمودار طیف انتقال ساختار نانوریبون زیگزاگ فاز χ_3 بروفن در شکل (۹)-ب می‌توان مشاهده کرد که ضرایب انتقال پس از جذب مولکول NO_2 از سمت اتم O به ۴/۷۲ و از سمت اتم N به ۴/۴۲ کاهش می یابند. از مقایسه ضرایب انتقال می‌توان به این نتیجه دست یافت که جذب از سمت اتم N باعث کاهش بیشتر ضریب انتقال و در نهایت کاهش بیشتر جریان می‌شود که در شکل (۸)-ب نیز مشهود است. این موضوع، حساسیت بیشتر ساختار را در جذب از سمت اتم N نشان می‌دهد. علاوه بر این می‌توان نتیجه گرفت که تغییرات نسبی طیف انتقال در ساختار نانوریبون آرمچیر χ_3 بیشتر است که این بدان معناست که این ساختار نسبت به مولکول NO_2 حساسیت و واکنش بیشتری نشان می‌دهد و برای ساخت حسگر مناسب‌تر است.

۳-۲-۲- نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} بروفن مشخصه جریان-ولتاژ و تغییرات نسبی جریان

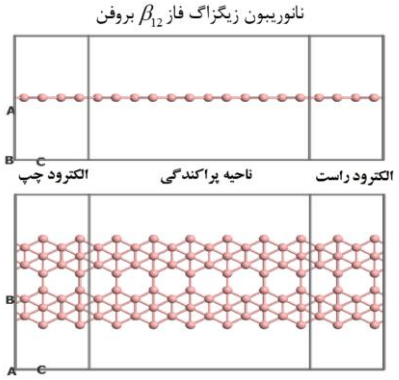
در شکل (۱۰) ساختار دستگاه نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} بروفن از نمای بالا و کنار نشان داده شده است. جذب مولکول NO_2از سمت اتم O و اتم N در موقعیت‌هایی با بیشترین انرژی جذب

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]
[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

بر روی ساختارهای دستگاه نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} صورت گرفته است. تاثیر جذب مولکول NO_2 بر ترابرد ساختارها در این موقعیت‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. مشخصه جریان-ولتاژ و تغییرات نسبی جریان، قبل و بعد از جذب مولکول گاز NO_2 از سمت اتم O و اتم N برای ساختارهای نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} بروفن در شکل‌های (۱۱) و (۱۲) نشان داده شده است.



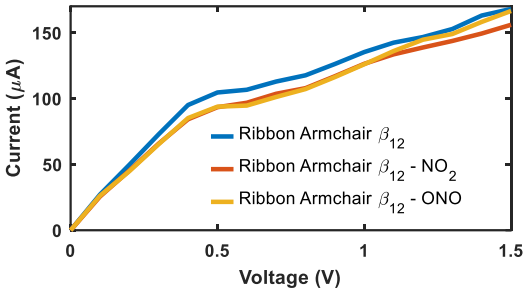
(الف)



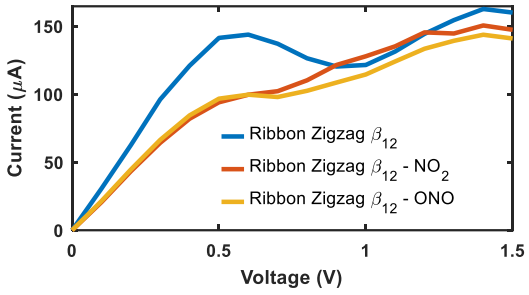
(ب)

شکل (۱۰): نمای بالا و کنار ساختار دستگاه‌های مربوط به (الف) نانوریبون آرمچیر فاز β_{12} بروفن و (ب) نانوریبون زیگزاگ فاز β_{12} بروفن

با توجه به نمودارهای جریان-ولتاژ ساختارهای نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} بروفن در شکل (۱۱) مشاهده می‌شود که جذب مولکول NO_2 از هر دو سمت اتم O و اتم N باعث تغییر در جریان ساختارها می‌شود. در نمودار تغییرات نسبی ساختار نانوریبون آرمچیر

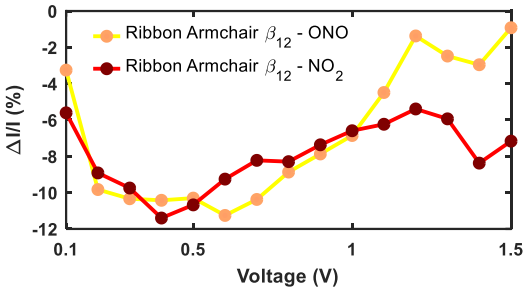


(الف)

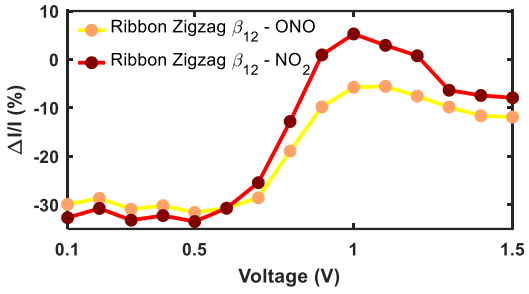


(ب)

شکل (۱۱): نمودار جریان-ولتاژ برای (الف) نانوریبون آرمچیر فاز β_{12} بروفن و (ب) نانوریبون زیگزاگ فاز β_{12} بروفن.



(الف)



(ب)

شکل (۱۲): نمودار تغییرات نسبی جریان قبل و پس از جذب مولکول NO_2 از دو سمت اتم O و اتم N برای (الف) نانوریبون آرمچیر فاز β_{12} بروفن و (ب) نانوریبون زیگزاگ فاز β_{12} بروفن

فاز β_{12} بروفن در شکل (۱۲)-الف می‌توان مشاهده کرد که جریان پس از جذب مولکول NO_2 از سمت اتم N در ولتاژ ۰/۱ ولت حدود ۶٪ کاهش می‌یابد. در این نمودار روند تغییرات نسبی جریان به گونه‌ای است که با افزایش ولتاژ، تغییرات نسبی جریان در ولتاژ ۰/۴ ولت دارای بیشترین تغییرات نسبی درحدود ۱۱/۵٪ است و پس از آن، میزان تغییرات نسبی جریان کاهش یافته و سپس در ولتاژ ۱/۴ ولت تا حدود ۸٪ افزایش می‌یابد. در جذب مولکول NO_2 از سمت O، در ولتاژ ۰/۱ ولت، جریان حدود ۳٪ کاهش می‌یابد و در ولتاژ ۰/۶ ولت، جریان حدود ۱۱/۳٪ تغییرات دارد که بیشترین میزان تغییرات در این نمودار است. با افزایش بیشتر ولتاژ میزان تغییرات نسبی جریان کاهش و افزایش می‌یابد. بازه تغییرات نسبی جریان در نانوریبون آرمچیر فاز β_{12} بروفن برای جذب از سمت اتم N حدود ۶٪ و برای جذب از سمت اتم O حدود ۱۱٪ است.

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

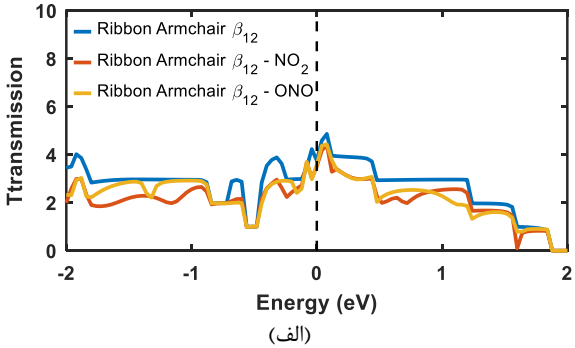
با توجه به نمودار تغییرات نسبی جریان ساختار نانوریبون زیگزاگ فاز β_{12} بروفن در شکل (۱۲)-ب می‌توان مشاهده کرد که پس از جذب مولکول NO_2 از سمت اتم N، جریان ساختار در ۰/۱ ولت ۳۳٪ کاهش می‌یابد که این میزان کاهش، حساسیت بالای ساختار را نشان می‌دهد. تا حدود ۰/۵ ولت میزان تغییرات جریان ثابت می‌ماند و پس از آن با افزایش ولتاژ، تغییرات جریان کاهش یافته و مجدد در ولتاژ ۱ ولت به اندازه تغییرات نسبی ۵٪ به اوج خود می‌رسد. در این ساختار در جذب مولکول NO_2 از سمت اتم O در ولتاژ ۰/۱ ولت جریان به اندازه ۳۰٪ کاهش می‌یابد و این میزان تغییرات نسبی جریان تا ۰/۷ ولت ثابت می‌ماند و پس از آن یک رفتار کاهشی از خود نشان می‌دهد به گونه‌ای که در ولتاژ ۱ ولت تغییرات نسبی جریان به ۶٪ می‌رسد. بازه تغییرات جریان پس از جذب از سمت اتم N حدود ۳۸٪ و پس از جذب از سمت اتم O حدود ۲۴٪ است. از نتایج به‌دست آمده می‌توان دریافت که جذب از سمت N میزان تغییرات بیشتری در جریان ایجاد می‌کند.

از مقایسه دو ساختار دستگاه نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} بروفن می‌توان نتیجه گرفت که تغییرات جریان پس از جذب مولکول گاز NO_2 در ساختار نانوریبون زیگزاگ β_{12} نسبت به نانوریبون آرمچیر β_{12} بیشتر است که این موضوع حساسیت بیشتر این ساختار را نشان می‌دهد.

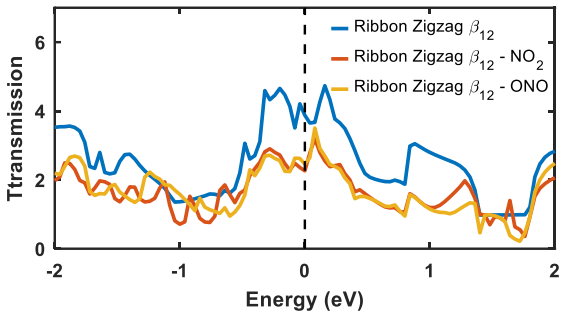
بررسی طیف انتقال نانوریبون‌های فاز β_{12} بروفن

در شکل (۱۳) طیف انتقال ساختارهای نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} بروفن قبل و بعد از جذب مولکول گاز NO_2 از هر دو سمت N و O تحت ولتاژ ۰/۱ ولت نشان داده شده است.

در نمودارهای طیف انتقال ساختارهای نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ فاز β_{12} بروفن مشاهده می‌شود که قبل و بعد از جذب مولکول NO_2 مقدار نمودار در سطح فرمی، صفر نشده است. پس می‌توان نتیجه گرفت که ساختارها خاصیت فلزی دارند و این خاصیت خود را پس از جذب حفظ می‌کنند. ضریب انتقال ساختارهای نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ β_{12} در سطح فرمی به ترتیب ۳/۷۵ و ۳/۸۷ هستند.



(الف)



(ب)

شکل (۱۳): نمودار طیف انتقال قبل و پس از جذب مولکول گاز NO_2 از دو سمت N و O برای ساختار (الف) نانوریبون آرمچیر فاز β_{12} بروفن و (ب) نانوریبون زیگزاگ فاز β_{12} بروفن (سطح فرمی روی صفر تنظیم شده است)

در نمودار طیف انتقال ساختار نانوریبون آرمچیر فاز β_{12} بروفن در شکل (۱۳)-الف ضرایب انتقال پس از جذب مولکول NO_2 از سمت اتم O به ۳/۵۶ و از سمت اتم N به ۳/۵۱ کاهش می‌یابند. از مقایسه این دو مقدار می‌توان متوجه شد که در ولتاژ ۰/۱ ولت، ساختار نسبت به جذب مولکول از سمت اتم N واکنش بیشتری از خود نشان می‌دهد و باعث کاهش بیشتر جریان می‌شود.

در نمودار طیف انتقال ساختار نانوریبون زیگزاگ فاز β_{12} بروفن در شکل (۱۳)-ب ضرایب انتقال پس از جذب مولکول NO_2 از سمت اتم O به ۲/۴۵ و از سمت اتم N به ۲/۲۶ کاهش می‌یابند. با توجه به مقادیر ضرایب انتقال پس از جذب در این ساختار می‌توان پی برد که جذب مولکول NO_2 از سمت اتم N باعث کاهش بیشتر ضریب انتقال و در نهایت کاهش بیشتر جریان در ولتاژ ۰/۱ ولت می‌شود. از مقایسه طیف انتقال دو ساختار نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ β_{12} می‌توان به این نتیجه دست یافت که تغییرات طیف انتقال پس از جذب مولکول NO_2 در ساختار نانوریبون زیگزاگ β_{12} بیشتر است.

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، انرژی جذب، تفاضل چگالی بار و DOS نانوساختارهای بروفن در دو فاز χ_3 و β_{12} پس از جذب مولکول گاز NO_2 از دو سمت اتم N و O در موقعیت‌های جذب متفاوت بررسی شدند. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد پایداری و انرژی جذب مولکول NO_2 در موقعیت‌ها وجهت‌گیری‌های مختلف در نانوساختارهای بروفن متفاوت است. نانوریبون‌های آرمچیر و زیگزاگ فازهای χ_3 و β_{12} بروفن نسبت به نانوصفحات این فازها، انرژی جذب و پایداری بیشتری از خود نشان دادند. با توجه به وجود پیوندهای اشباع نشده در لبه‌ها، انرژی جذب در این نواحی بالاتر بوده و شکل‌گیری پیوندهای شیمیایی در لبه ساختار محتمل‌تر است.

یافته‌های حاصل از بررسی مشخصه جریان-ولتاژ، تغییرات نسبی جریان و طیف انتقال نشان می‌دهد تاثیر جذب مولکول گاز NO_2 بر

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]

[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]

ترابرد در ساختارهای نانوریبون آرمچیر و زیگزاگ هر فاز متفاوت است. در فاز χ_3 بروفن، نانوریبون آرمچیر و در فاز β_{12} بروفن، نانوریبون زیگزاگ نسبت به مولکول گاز NO_2 حساسیت بیشتری نشان می‌دهد. در میان نانوساختارهای بررسی شده، ساختار نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن نسبت به مولکول گاز NO_2 بیشترین تغییرات نسبی جریان را داشته است. نانوریبون آرمچیر فاز χ_3 بروفن می‌تواند گزینه مناسب برای تشخیص مولکول گاز NO_2 باشد.

مراجع

[1] E. Singh, M. Meyyappan, H. S. Nalwa, "Flexible Graphene-Based Wearable Gas and Chemical Sensors", ACS applied materials & interfaces, vol. 9, no. 40, pp. 34544–34586, 2017.

[2] T. Hao, K.S. Chiang, "Graphene-Based Ammonia-Gas Sensor Using In-Fiber Mach-Zehnder Interferometer", IEEE Photonics Technology Letters, vol. 29, no. 23, pp. 2035–2038, 2017.

[3] G. Fiori, F. Bonaccorso, G. Iannaccone, T. Palacios, D. Neumaier, A. Seabaugh, SK. Banerjee, L. Colombo, "Electronics based on two-dimensional materials", Nature nanotechnology, vol. 9, no. 10, pp. 768–779, 2014.

[4] X. Tang, A. Du, L. Kou, "Gas sensing and capturing based on two-dimensional layered materials: Overview from theoretical perspective", Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, vol. 8, no. 4, 2018.

[5] Nasirian S, Shokravi M M. The study of humidity effect on carbon dioxide gas sensing properties of zinc oxide nanowires assisted by polyvinyl alcohol network at room temperature. Journal of Iranian Association of Electrical and Electronics Engineers 2019; 16 (2) :1-7

[6] A.J. Mannix, X.F. Zhou, B. Kiraly, J.D. Wood, D. Alducin, B.D. Myers, X. Liu, B.L. Fisher, U. Santiago, J.R. Guest, M.J. Yacaman, "Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs", Science, vol. 350, no. 6267, pp. 1513-1516, 2015.

[7] Q. Zhong, L. Kong, J. Gou, W. Li, S. Sheng, S. Yang, P. Cheng, H. Li, K. Wu, L. Chen, "Synthesis of borophene nanoribbons on Ag (110) surface", Physical Review Materials, vol. 1, no. 2, 2017.

[8] D. Li, J. Gao, P. Cheng, J. He, Y. Yin, Y. Hu, L. Chen, Y. Cheng, J. Zhao, "2D Boron Sheets: Structure, Growth, and Electronic and Thermal Transport Properties", Advanced Functional Materials, vol. 30, no. 8, p. 1904349, 2019.

[9] H. Cui, X. Zhang, D. Chen, "Borophene: a promising adsorbent material with strong ability and capacity for SO2 adsorption", Applied Physics A, vol. 124, no. 636, pp. 0947-8396, 2018.

[10] B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, W. Li, S. Li, H. Li, P. Cheng, S. Meng, L. Chen, K. Wu, "Experimental realization of two-dimensional boron sheets", Nature chemistry, vol. 8, no. 6, pp. 563–568, 2016.

[11] P. Ranjan, T.K. Sahu, R. Bhushan, S.S. Yamijala, D.J. Late, P. Kumar, A. Vinu, "Freestanding Borophene and Its Hybrids", Advanced Materials, vol. 31, no. 27, p.1900353, 2019.

[12] S.I. Vishkayi, M.B. Tagani, "Freestanding χ3-Borophene Nanoribbons: A Density Functional Theory Investigation", Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 20, no. 15, pp. 10493-10501, 2018.

[13] S.F. Molaeezadeh, M.S. Lakmehsari, M. Arabieh, and Y.T. Azar, "Unraveling the effect of the defect and adsorbate on the magnetic properties of χ3 borophene nanoribbons: an in-silico study", Physica Scripta, vol. 96, no. 1, p. 015812, 2020.

[14] R. Yogi, N.K. Jaiswal, "First-principle study of NO_2 adsorption and detection on the edges of zigzag nitride nanoribbons", Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, vol. 114, pp. 1386-9477, 2019.

[15] V. Shukla, J. Warna, N.K. Jena, A. Grigoriev, R. Ahuja, "Toward the Realization of 2D Borophene Based Gas Sensor", The Journal of Physical Chemistry C, vol. 121, no. 48, pp. 26869-26876, 2017.

[16] T.L. Ta, T.L. Pham, V.A. Dinh, "Toxic Gases on β12 Borophene: the Selective Adsorption", VNU Journal of Science: Mathematics-Physics, vol. 36, no. 2, pp. 66-73, 2020.

[17] M. Fazilaty, M. Pourahmadi, M.R. Shayesteh, S. Hashemian, "χ3 –borophene-based detection of Hydrogen Sulfide via gas nanosensors", Chemical Physics Letters, vol. 741, p.137066, 2019.

[18] J. Li, X. Chen, Z. Yang, X. Liu, X. Zhang, "Highly Anisotropic Gas Sensing of Atom-thin Borophene: A first-principles", Journal of Materials Chemistry C, vol 9, no 3, pp.1069-1076, 2021.

[19] Y. Huo, R. Liu, Q. Sun, Z. Yang, L.C. Xu, and X. Liu, "Inorganic gas sensing performance of χ3-borophene and the van der Waals heterostructure," Applied Surface Science, vol. 581, no. 2, p.151906, 2022.

[20] R. G. Parr, W. Yang, Density-functional theory of atoms and molecules. New York, Ny Oxford Univ. Press, 1994.

[21] Supriyo Datta, Quantum transport: atom to transistor, Cambridge, Uk ; New York: Cambridge University Press, 2005.

زیرنویس‌ها

[1] Allotropic
[2] Substrate
[3] Borophene Nanoribbon
[4] Armchair
[5] Density functional theory
[6] Non-Equilibrium Green's Function
[7] unitcell
[8] Supercell
[9] Relaxation
[10] Charge density difference
[11] Density of States
[12] Functional
[13] Perdew-Burke-Ernzerhof
[14] Generalized Gradient Approximation
[15] Exchange-Correlation Functional
[16] Transmission
[17] Device
[18] Limited-Broyden-Flatcher-Goldfarb_Shanno algorithm
[19] Isosurface
[20] Mesh cut of energy
[21] Rydberg

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-16]
[DOI: 10.61186/jiaeee.22.1.79]