

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: MRG5980185

ชื่อโครงการ: อุปกรณ์และสมบัติการส่งผ่านเชิงควอนตัมของวัสดุโครงสร้างนาโน

ชื่อนักวิจัย: จริญญาณี ประสงค์กิจ, มหาวิทยาลัยนครพนม

E-mail Address : jariyanee.prasongkit@npu.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: พฤษภาคม 2559 - พฤษภาคม 2561 (2 ปี)

วัสดุโครงสร้างนาโนเป็นความก้าวหน้าอันยิ่งใหญ่อันเป็นที่ประจักษ์ชัดซึ่งนำไปสู่เป้าหมายของการสร้างอุปกรณ์นาโนอิเล็กทรอนิกส์ งานวิจัยนี้ได้อธิบายวิธีเชิงทฤษฎีเพื่อที่จะจำลองการส่งผ่านอิเล็กตรอนในอุปกรณ์ด้วยการใช้ทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่นร่วมกับวิธีการฟังก์ชันไม่สมมูล ผู้วิจัยได้ทำการสำรวจวัสดุสองมิติเพื่อจำลองอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ระดับนาโน ได้แก่ อุปกรณ์สำหรับการถอดรหัสทางพันธุกรรม อุปกรณ์แก๊สเซ็นเซอร์ และอุปกรณ์สปินทรอนิกส์ สำหรับการประยุกต์ใช้ในด้านเซ็นเซอร์ เราได้ศึกษาแผ่นแกรฟีนที่มีความบกพร่องเชิงเส้น 2 ชนิด คือ ชนิดแปดเหลี่ยม/ห้าเหลี่ยม และ เจ็ดเหลี่ยม/ห้าเหลี่ยม และสำรวจความเป็นไปได้ของการนำมาประยุกต์ใช้เป็นอุปกรณ์เซ็นเซอร์ตรวจจับแก๊สและดีเอ็นเอ สำหรับการประยุกต์ใช้ในการตรวจจับแก๊ส การค้นพบของเราแสดงให้เห็นว่ากระแสไฟฟ้าที่ไหลผ่านแกรฟีนถูกจำกัดอยู่ที่ความบกพร่องเชิงเส้นผ่านการความคุมแรงดันเกจซึ่งเพิ่มปฏิกิริยาเคมีที่ขอบเกรน ซึ่งน่าจะเป็นความหวังที่จะนำมาประยุกต์ใช้ในงานด้านแก๊สเซ็นเซอร์ สำหรับการนำมาใช้ในการถอดรหัสพันธุกรรมพบว่า จากการสุ่มตัวอย่างของการวางตัวของดีเอ็นเอจำนวนมากโดยการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล เราแสดงให้เห็นความเป็นไปได้ในการแยกเบสทั้ง 4 ชนิด ด้วยการใช้แกรฟีนที่มีความบกพร่องเชิงเส้น เราพบการเปลี่ยนแปลงสมบัติการนำไฟฟ้าสัมพันธ์กับการส่งผ่านอิเล็กตรอนที่สถานะโมเลกุลใกล้เคียงกับระดับเฟอร์มิและการเชื่อมกันระหว่างเบสกับฐานนาโน นอกจากนี้ สำหรับการประยุกต์ใช้ในด้านแก๊สเซ็นเซอร์ เรายังแสดงให้เห็นถึงการคำนวณแบบเฟอร์สพริชฟีลของคุณสมบัติกระแส-แรงดัน และการนำไฟฟ้าของ $\text{Au}(111):\text{S2-ไบฟีนิล-S2}:\text{Au}(111)$ ซึ่งแสดงถึงพฤติกรรมการแทรกสอดเชิงควอนตัมที่ขึ้นอยู่กับชนิดของแก๊สที่เกาะกับโมเลกุลไบฟีนิล ในกรณีของการประยุกต์ใช้ด้านสปินทรอนิกส์ เราได้ทำการประเมินศักยภาพของการใช้ โมลิบดีนัมไดซัลไฟด์ MoS_2 เชื่อมกับโลหะผสมฮอยส์เลอร์ Fe_3Si และคำนวณค่าสัมประสิทธิ์การนำเข้าของสปิน (SIE) และอัตราส่วนแมกนีโตรีซิสแทนซ์ (MR) ที่ขึ้นกับความหนาของ MoS_2 พบว่าค่า MR สูงสุดที่ได้คือ 300% ด้วยค่า SIE ประมาณ 80% สำหรับช่องว่างที่ใช้ MoS_2 ที่ 3 และ 5 ชั้น วัสดุนาโนที่เราได้ศึกษาในงานวิจัยนี้แสดงถึงความเป็นไปได้ของการพัฒนาอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์สำหรับอนาคต

คำสำคัญ: การส่งผ่านอิเล็กตรอน; เฟอร์สพริชฟีล; วัสดุโครงสร้างนาโน; การถอดรหัสพันธุกรรม; แก๊สเซ็นเซอร์; สปินทรอนิกส์

Abstract

Project Code: MRG5980185

Project Title: Device and quantum transport properties of nanostructured materials

Investigator : Jariyane Prasongkit, Nakhon Phanom University

E-mail Address : jariyane.prasongkit@npu.ac.th

Project Period : May 2016 - May 2018 (2 years)

Nanostructure materials have witnessed tremendous progress toward the goal of nanoelectronic devices. Our study describes theoretical approaches to model electronic transport of nanoscale systems, which are based on the density functional theory (DFT) combined with non-equilibrium Green's function method (NEGF). We have explored two-dimensional materials to study a few nanoscale electronic devices, namely, DNA sequencing, gas sensor and spintronics (magnetic tunnel junction) devices. For sensing application, we investigate two types of extended line defects in graphene: octagonal/pentagonal and heptagonal/pentagonal reconstructions and explore the application of this system as gas sensor and DNA sequencing devices. For gas sensor, our findings show that the electric current is confined to the line defect through gate voltage control, which combined with the enhanced chemical reactivity at the grain boundary, makes this system a highly promising candidate for gas sensor applications. For DNA sequencing, by sampling over a large number of different orientations generated from molecular dynamics simulations, we theoretically demonstrate that distinguishing between the four nucleobases using line defects in a graphene-based electronic device appears possible. The changes in conductance are associated with transport across specific molecular states near the Fermi level and their coupling to the pore. Additionally, for gas sensing application, we present first principle calculations of current-voltage characteristics and conductance of Au(111):S2-biphenyl-S2:Au(111), showing the quantum interference behavior depending on the type of exposed gases. In the case of spintronics application, we evaluate the performance of MoS₂-based tunnel junctions using Fe₃Si Heusler alloy electrodes. We calculate the spin injection efficiency (SIE) and the magnetoresistance (MR) ratio as a function of the MoS₂ thickness. We find a maximum MR of 300% with a SIE of about 80% for spacers comprising between 3 and 5 MoS₂ monolayers. Our proposed nanomaterials thus demonstrates the possibility of developing a new generation of electronic devices.

Keywords: Electron transport; First-principles; Nanostructured materials; DNA sequencing; Gas