

پردازش اطلاعات در ابعاد کوانتومی با استفاده از گیت‌های منطقی مولکولی: مروری بر

تاریخچه، ویژگی‌ها و فناوری‌های مبتنی بر آن

احسان سهیلی^۱، سید نصیب الله دوستی مطلق^{۲*}

۱- پژوهشگر، ۲- استادیار دانشگاه و پژوهشگاه عالی دفاع ملی و تحقیقات راهبردی، پژوهشکده آماد و فناوری دفاعی، تهران، ایران.
(دریافت: ۹۹/۰۲/۱۰، پذیرش: ۹۹/۱۰/۲۱)

چکیده

در صنعت الکترونیک ثابت شده است که، پایین آوردن مقیاس قطعات سیلیکونی تا زیر ۱۰nm و بسته‌بندی میلیون‌ها مورد از آن‌ها در یک تراشه ایده جالبی نخواهد بود. این امر به دلیل مصرف انرژی بالا، هزینه ساخت بالا، محدودیت‌های ناشی از مکانیک کوانتومی و دشواری‌های فنی است که مانع از کوچک‌تر شدن بیشتر افزاره‌های الکترونیکی می‌شوند. لذا، بایستی محققان به چیزی غیر از سیلیکون فکر کنند تا افزاره الکترونیکی با تراکم بسیار زیاد بسازند. از این‌رو، داده ورزی مولکولی، می‌تواند با بررسی و اکتشاف گستره وسیعی از ساختارهای مولکولی، جایگزین مناسبی برای منطق دیجیتال مرسوم ارائه دهد تا قادر به کدگذاری یا دست‌کاری مؤثر داده‌ها باشد. بنابراین، بسترهای مولکولی را می‌توان به‌عنوان افزاره‌های محاسباتی در نظر گرفت که براساس مجموعه‌ای از عملگرهای منطقی، ورودی‌های فیزیکی و شیمیایی را به خروجی‌های مطلوب تبدیل می‌کنند. این حوزه در زیرشاخه سخت‌افزار فناوری‌های محاسبات کوانتومی قرار می‌گیرد و بنابراین، ساخت افزاره‌های الکترونیکی و حسگرهای مولکولی کارآمدتر تأثیرات مثبت معناداری بر توانمندی‌های دفاعی و امنیتی یک کشور دارند. در این مقاله مروری، ابتدا مختصری از تاریخچه افزاره‌های مولکولی ارائه می‌شود، چرا که آگاهی از سیر تحول یک موضوع علمی می‌تواند زمینه‌ساز پیشرفت اصولی‌تر باشد. در گام بعدی، دلایل اصلی تغییر رویکرد به سوی افزاره‌های مولکولی توضیح داده شده و با معرفی گیت‌های منطقی مورد استفاده، محدودیت‌های بنیادین و فنی حاکم بر ادوات کلاسیک ذکر می‌شوند. سپس، قابلیت‌های مختلف گیت‌های منطقی مولکولی در دو زمینه الکترونیک مولکولی و حسگرهای منطقی شیمیایی به تفصیل مورد بحث قرار گرفتند تا توانایی‌های مولکول‌ها در سامانه‌های محاسباتی مختلف اثبات شوند.

کلیدواژه‌ها: محاسبات کوانتومی، گیت منطقی مولکولی، الکترونیک مولکولی، حسگرهای منطقی مولکولی

۱- مقدمه

اطلاعات، در طول سال‌های متمادی مورد توجه قرار گرفته است. با ظهور موضوعاتی که به‌عنوان چالش‌های پیش روی الکترونیک سیلیکونی مطرح شدند، محققان یافتن رهیافت دیگری برای ساخت افزاره‌های الکترونیکی را ضروری دیدند و چه چیزی آموزنده‌تر از طبیعت برای مواجهه با این معضل‌ها! در مقیاس بسیار بزرگ، حیات از بسیاری جهات شبیه یک رایانه است، با این تفاوت که در اینجا نقش مدارهای الکتریکی را مدارهای زیست شیمیایی ایفا می‌کنند؛ این مدارها، شبکه‌های پیچیده‌ای از واکنش‌ها و مسیرهایی هستند که عملکرد صحیح اندامگان را ممکن می‌سازند. در این راه، طراحی سامانه‌ای از گیت‌های منطقی مولکولی بسیار مهم است، به‌نحوی که بتوان مولکول‌هایی با قدرت تصمیم‌گیری ساخت [۳]. آریه آویرام^۱ بر این باور بود که بهترین و دقیق‌ترین پردازنده و حامل اطلاعات، سامانه‌های

پردازش اطلاعات، مهم‌ترین فعالیت انسان است که البته با صرف انرژی فراوانی نیز همراه است. مغز ما در حدود سه میلیارد نورون دارد که هر یک از آن‌ها در حدود ۱۰ هزار اتصال با نورون‌های دیگر دارد. این شبکه‌ی فوق‌العاده بسیار متراکم است، به نحوی که هر mm^3 از بافت نورونی شامل حداکثر یک میلیارد اتصالات نورونی است. درحالی‌که مغز تنها ۲٪ کل وزن بدن را تشکیل می‌دهد، اما در حالت استراحت ۲۰٪ از میزان انرژی بدن را مصرف می‌کند [۱]. از سوی دیگر، امروزه قدرت پردازش/ذخیره/و حفاظت از اطلاعات یکی از مؤلفه‌های بسیار مهم در ساختار یک سازمان یا تجهیزات به‌کار گرفته شده توسط آن سازمان می‌باشد [۲]. از این‌رو، اهمیت ذخیره‌سازی، انتقال و پردازش

^۱ Arieh Aviram

* رایانامه نویسنده مسئول: doustimotlagh@chmail.ir

ارائه شد، می توان در یک افزاره الکترونیکی، چیدمان مد نظر از الکترونها را (با فاصله ای در مقیاس نانو) ساخت و سپس، مولکول (های) خاصی را به شیوه مناسب در فضای خالی بسیار کوچک بین الکترونها قرار داد، به نحوی که الکترونها را به هم متصل کند [۷]. همین ایده به ظاهر ساده، سنگ بنای ساخت افزاره های الکترونیک مولکولی بود.

حال، مسئله این است که بدانیم، منظور از یک مولکول منطقی چیست؟ لزوم تغییر رویکرد به ادوات مولکولی چیست؟ و چگونه می توان یک مولکول را به صورت منطقی و با تعاریف مرسوم در الکترونیک کلاسیک همساز کرده و از آن برای ساخت افزاره های الکترونیکی همچون یکسوکننده ها، ترانزیستورها، حسگرها، کلیدها و ... استفاده کرد؟ علاوه بر این، در حالی که ایران سرشار از منابع انسانی (با دانش و نوآور) است و به لحاظ علمی در جمع کشورهای پیشرفته ی دنیا (در زمینه هایی همچون نانو فناوری/ هسته ای/ پزشکی) قرار داشته و دارد، اما در زمینه ای مانند محاسبات منطقی مولکولی که میان رشته ای و به اصطلاح در مرز دانش است، حرکت معناداری صورت نگرفته است. پس به نظر می رسد جای پژوهش در زمینه معرفی گیت های منطقی مولکولی و فناوری های مرتبط با آن در کشور ما خالی باشد؛ که هدف نگارندگان این مقاله نیز همین است. شکل (۱) توزیع اختراعات ثبت شده در زمینه پردازش منطقی اطلاعات در مقیاس مولکولی را نشان می دهد. این داده ها، با استفاده از وب سایت "patentinspiration" و کلیدواژه های "molecular computation"، "molecular electronics"، "molecular logic gate"، "molecular gate" (در تاریخ ۱۳۹۹/۰۱/۱۲) به دست آمده است. همان طور که مشاهده می شود، تنها کشورهای پیشرفته (و هندوستان) در این زمینه اختراعاتی را به ثبت رسانده اند. در حالی که سهم ایالات متحده و چین بسیار بیشتر از سایر کشورهاست، کشورمان سهمی از آن ندارد.



شکل (۱): نقشه توزیع جهانی اختراعات ثبت شده

الکترونیک مولکولی مزایای متعددی نسبت به الکترونیک مرسوم نیمه هادی دارد. مهم ترین مزیت ادوات مولکولی، امکان کاهش قابل توجه ابعاد است. این کاهش ابعاد در محدوده ۱ nm، باعث کاهش قابل توجه انرژی مصرفی شده و افزایش قابل توجه

طبیعی هستند که تقریباً در بسیاری از موارد از مولکول ها به عنوان عنصر اصلی استفاده می کنند.

پردازش اطلاعات مولکولی خصیصه بسیاری از سامانه های شیمیایی و زیستی است. موجودات زنده همواره در حال پردازش اطلاعات برای حفظ بقا خود هستند. علاوه بر این، هر سلول زنده، افزاره ای به لحاظ فضایی مجزاست که ماده، انرژی و اطلاعات را با محیط پیرامون خود مبادله می کند [۴]. برای دستیابی به این موضوع، هر سلول باید متصل به محیط بوده و شبکه ای داخلی برای پردازش اطلاعات خود داشته باشد. این فرایند پویای (دینامیک) ناشی از اندرکنش متقابل سلول ها با محیط اطراف، به عنوان شرط اساسی زنده بودن (حیات) شناخته می شود. اگر چه، دستگاه های محاسبات مولکولی اغلب به واسطه فرآیندهای پردازش اطلاعات در طبیعت شناخته می شوند، اما آن ها لزوماً بر اساس مولکول های زیستی^۱ روی نخواهند داد؛ و محققان توانسته اند پردازش اطلاعات را بر اساس مولکول های سنتز شده جدید (در مقیاس آزمایشگاهی)، با ویژگی های دلخواه، انجام دهند. مولکول های نانو مقیاس را می توان به نحوی در سامانه مورد نظر طراحی نمود که بتوانند عملیاتی مشابه آنچه گیت های منطقی بولی انجام می دهند را به اجرا در آورند [۵]. خلاقیت محققان میان رشته ای برای بهره بردن از قابلیت های فیزیک، شیمی و زیست شناسی، مسیرهای مختلفی از محاسبات غیرمعارف (ترکیبی از محاسبات مولکولی الهام گرفته از زیست شناسی و محاسبات کوانتومی) را برای عبور از مشکلات الکترونیک سیلیکونی ارائه می دهند.

کلیدزنی مولکولی^۲ با ورودی ها (و خروجی های) شیمیایی، فوتونیک یا الکتروشیمیایی حوزه ای است که توسط دسیلوا^۳ و همکارانش در سال ۱۹۹۳ پایه ریزی شد که در آن غالباً از محلول ها به عنوان میزبان استفاده می شود تا بتوان از مولکول ها به عنوان یک کلیدی بین دو حالت مختلف استفاده کرد [۴]. در واقع، می توان در مدارهای زیست شیمیایی از مولکول های شناور در یک حلال استفاده کرد تا به عنوان کلیدی [حساس به تغییرات خارجی] برای رهگیری عناصر یا گونه های خاص شیمیایی یا زیستی مورد استفاده قرار گیرند و به اصطلاح یک گیت منطقی مولکولی شیمیایی ساخته شود. از سوی دیگر، الکترونیک مولکولی اساساً بر روی کارکردهای منتج از جریان مانند ترانزیستورها، یکسوکننده ها، سیم های تک مولکولی و ... متمرکز می شود که شامل اتصال های چندگانه فلز-مولکول است. در ابتدایی ترین و البته هوشمندانه ترین حالت که در اواخر قرن نوزده

^۱ Biomolecules

^۲ Molecular switching

^۳ de Silva

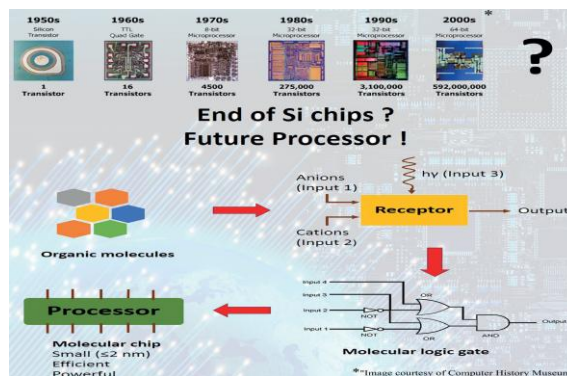
سیلیکون با کاهش اندازه تغییر چشمگیری دارد، در حالی که مولکول‌ها با شکاف انرژی پهنی که دارند در اندازه‌های کوچک افزاره نیز مشخصات خود را حفظ می‌کنند (به واسطه ابعاد ذاتاً کوچکشان). از نقطه نظر اقتصادی، هزینه راه‌اندازی خط تولید افزاره‌های سیلیکونی در سال ۲۰۰۰ میلادی در حدود ۲/۵ میلیارد دلار بود، اما به ترتیب در سال‌های ۲۰۱۰ و ۲۰۱۵ میلادی به حدود ۱۵ و ۱۰۰ میلیارد دلار افزایش داشته است. این افزایش هزینه عملاً قدرتمندترین شرکت‌ها را نیز با مشکل رو به رو می‌کند. هزینه بالا بیشتر به این دلیل است که فرآیند تولید ادوات سیلیکونی یک رهیافت بالا-به-پایین است، یا اینکه گه‌گاه بایستی خط تولیدهای جدیدی برای نسل‌های جدید تراشه‌ها ایجاد نمود. در مقابل، تولید مولکول‌ها یک فناوری پایین-به-بالاست که از اتم‌ها برای ساخت مولکول‌ها استفاده می‌کند. تنها همین مزیت، می‌تواند به تولید آسان‌تر، سریع‌تر، کم‌هزینه‌تر منجر شود. از لحاظ تراکم، 10^8 - 10^7 افزاره بر روی تراشه پنتیوم^۴، تقریباً در حدود یک سانتی‌متر مربع از مساحت واقعی تراشه را اشغال می‌کند. اما این مقدار برای مولکول‌های آلی با ابعاد ۳ nm - ۱ و دارای سه شاخه (مانند گیت‌های ترانزیستور) در حدود 10^{14} مولکول است. یعنی با استفاده از مولکول‌ها می‌توان افزاره‌هایی بسیار متراکم‌تر ساخت [۷].

در حال حاضر، محاسبات مولکولی بسیار کمتر از محاسبات امروزی (بر پایه مواد نیم‌رساناها) به واقعیت پیوسته است. اگرچه، خواص نیم‌رساناها را می‌توان (با در نظرگیری اثرات اندازه آن‌ها و رهیافت‌های دیگر همچون آرایش آن‌ها) کنترل نمود، با این حال، مجموعه گسترده‌ای از واکنش‌های شیمیایی که طی ۱۵۰ سال گذشته توسعه یافته‌اند، محققان را قادر ساخته است که به گستره متنوعی از ساختارهای مولکولی دست یابند. از این دیدگاه، خواص مولکول‌ها را می‌توان به صورت هدفمند در طی یک فرآیند هدفمند اصلاح نمود که خود افزایش چشمگیر کنترل و تنظیم پذیری خواص افزاره را متضمن می‌شود.

۳- محدودیت‌های الکترونیک کلاسیک

پیشرفت فناوری‌های پردازش اطلاعات (و در نتیجه، عملکرد نهایی ادوات) به وسیله مؤلفه‌های متعددی محدود می‌شود. برخی از محدودیت‌ها، نتیجه ساده‌ای از اصول بنیادین فیزیک هستند، از قبیل نظریه نسبیت خاص انیشتین^۵، اصل عدم قطعیت هایزنبرگ^۶ و غیره. این محدودیت‌ها مطلق هستند، بدین معنی که قیدهایی را بر هر سامانه فیزیکی اعمال می‌کنند و پیشرفت

سرعت ادوات را به دنبال دارد. امروزه یک پردازنده چند گیگاهرتزی ابعادی در حدود 1 cm^2 و توان مصرفی‌ای از مرتبه 10^1 W دارد. با تحقق مجتمع‌سازی در حوزه الکترونیک مولکولی، این ابعاد ده‌ها برابر کاهش می‌یابد و به همان نسبت توان مصرفی نیز کاهش می‌یابد.



شکل (۲): محاسبات مبتنی بر الکترونیک سیلیکونی در مقابل محاسبات منطقی مولکولی [۸]

۲- مقایسه افزاره‌های حالت جامد و مولکولی

قانون مور بیان می‌کند که تعداد (به لحاظ اقتصادی مقرون به‌صرفه) ترانزیستورهای موجود در میکرو تراشه‌ها با گذر زمان به صورت نمایی افزایش می‌یابد. در اولین تخمین در ۱۹۶۵ میلادی، فرض شد که تعداد ترانزیستورها هر ۱۲ ماه دو برابر می‌شود، اما این روند در سال ۲۰۱۰ میلادی به هر ۲۴ ماه افزایش یافت. در واقع، در اغلب حوزه‌هایی که مدارهای الکترونیکی حضور دارند، صنعت توانسته پا را فراتر از پیش‌بینی‌های قانون مور^۱ برد. در حدود پنجاه سال پیش، طول کانال اصلی یک ترانزیستور در حدود $10 \mu\text{m}$ بود؛ با این حال، در طول این چند دهه، ترانزیستورهای سنتی به میزان قابل توجهی کوچک شده‌اند و هم اکنون به ابعادی کمتر از ۱۰ nm در ادوات تحقیقاتی رسیده‌اند [۹]. با این حال، این قانون نمی‌تواند برای همیشه معتبر باقی بماند، و به دلیل مشکلات غیرقابل اجتنابی که در مسیر کوچک‌سازی^۲ افزاره‌های الکترونیک سیلیکونی وجود دارند بایستی به سراغ فناوری‌های جایگزین رفت. محدودیت اصلی صنعت نیم‌رسانای سیلیکونی برای اولین بار توسط غول این صنعت یعنی شرکت اینتل^۳ مطرح شد [۱۰]. مشکلاتی که پیشروی الکترونیک سیلیکونی هستند در دو دسته کلی محدودیت‌های ناشی از اصول بنیادین فیزیک و محدودیت‌های فنی دسته‌بندی می‌شوند. به‌عنوان یک مثال کلی، ساختار نواری

^۴ Pentium

^۵ Einstein's special theory of relativity

^۶ Heisenberg's uncertainty principle

^۱ Moore's law

^۲ Miniaturisation

^۳ Intel Corporation

می‌رسد. بنابراین، سطوح (مقادیر) بسیار بالاتری از آلاینده‌گی برای حصول اطمینان از باز تولید پذیری افزاره‌های سیلیکونی کوچک مورد نیاز است. از سوی دیگر، میزان آلاینده‌گی 10^{18} در هر cm^3 (۱۲۵ اتم آلاینده‌گی در هر مکعب) به نیم رساناهایی منجر می‌شود که خواص فلزی (رسانا) از خود بروز می‌دهند [۱۴].

در سال ۲۰۱۲ میلادی، فناوری‌های ساخت ترانزیستورهای دو گیتی به کانال 22 nm دست یافتند که نشان می‌داد هنوز می‌تواند بهبود یابد (چرا که کوتاه‌ترین طول ممکن کانال 10 nm خواهد بود) [۱۳]. با این وجود، کاهش طول به کمتر از 10 nm ، حساسیت ترانزیستورهای اثر میدانی را به پارامترهای خارجی چندین برابر می‌کند؛ گیت باید با دقت چند ساخته شود که فراتر از توان فنی صنعت نیم‌رساناست. از سوی دیگر، از آنجایی که ثابت شبکه سیلیکون 0.543 nm است، یک کانال 22 nm از افزاره‌ها، تنها به اندازه 40 اتم سیلیکون درازا دارد. علاوه بر این، در کمتر از 20 nm اثر تونل‌زنی بسیار قوی‌تر شده و نشت جریان‌ها شدیداً افزایش می‌یابد [۱۵]. بنابراین، هر پیشرفتی (که به لحاظ اقتصادی به صرفه باشد)، تنها می‌تواند شامل مواد، طراحی‌ها، یا نمونه‌های جدیدی از پردازش اطلاعات باشد.

یافته‌های تجربی وسیعی که در طی این سالیان از تراپرد کتروان از میان مولکول‌های مجزا به دست آمده‌اند، بیانگر آن هستند که تقریباً تنها راه حل باقی مانده برای فرار از چالش‌های موجود در کوچک‌سازی مدارهای الکتریکی مرسوم، تحقق الکترونیک مولکول - مقیاس (تک مولکولی) است. زیرا تک مولکول‌ها سازنده کوچک‌ترین ساختارهای پایدار قابل تصور هستند [۱۶].

پردازش اطلاعات پیشرفته در سامانه‌های مولکولی می‌تواند به چندین روش مختلف تحقق یابد. به‌طور مفهومی، ساده‌ترین رویکرد شامل سامانه‌هایی می‌شود که در آن‌ها گونه‌های مولکولی رفتار عناصر نیم‌رسانا را تقلید می‌کنند و این به معنی پیروی از الگوی کلاسیکی الکترونیک است. ساختار فرضی اولیه مولکولی دقیقاً همانند ادوات نیم‌رسانا بر پایه سیلیکون رفتار می‌کند، با این تفاوت که کوچک‌تر بوده و مواد متفاوتی در آن به کار رفته‌اند.

۴- تاریخچه ادوات مولکولی

ظهور شاخه الکترونیک مولکولی را می‌توان به مطالعات انجام شده توسط هانس کوهن^۶ و همکارانش نسبت داد. مشخصاً در سال ۱۹۷۱ میلادی گزارشی در مورد اندازه‌گیری رانش از میان

فنی نمی‌تواند آن‌ها را حذف نماید. تنها راه چشم‌پوشی از این قیدها، تغییر روش‌های قبلی و استفاده از سازوکاری متفاوت (اما با موانع و مشکلات قابل حل) برای پردازش اطلاعات است. نوع دیگر محدودیت، از فناوری‌های به کار رفته و اقتصاد (بحث بهره اقتصادی افزاره) نشئت می‌گیرد. خنک‌سازی افزاره، آلاینده غیر همگون ساختار، انتقال ناخواسته سیگنال‌ها بین کانال‌های ارتباطی^۱، تأخیر و تونل‌زنی الکترون بهترین مثال‌ها از محدودیت‌های این چینی هستند. در تضاد با محدودیت‌های بنیادین حاکم بر محاسبات، محدودیت‌های فنی را می‌توان با دست‌یابی به پیشرفت‌های فنی مناسب از میان برداشت. در ادامه، مهم‌ترین محدودیت‌هایی (ناشی از اصول بنیادی فیزیک و مشکلات فنی) که بر افزاره‌های پردازش اطلاعات تحمیل می‌شوند، معرفی خواهند شد.

بارزترین محدودیت در پردازش اطلاعات از نظریه نسبیت خاص انیشتین ناشی می‌شود. از آنجایی که سرعت نور در خلأ^۲ بیشترین سرعت در دسترس است، اطلاعات نمی‌توانند سریع‌تر از نور سفر کنند (منتقل شوند). این مورد، هم‌آهنگ انتقال اطلاعات و هم‌اندازه (سایز) نهایی افزاره‌ای که با زمان کلیدزنی از پیش تعریف شده کار می‌کند را محدود می‌نماید [۱۱]. محدودیت دیگر از مکانیک کوانتومی نشئت می‌گیرد. مدت زمان مورد نیاز برای سویچ (تغییر وضعیت) هر سامانه فیزیکی به یک حالت متعامد، براساس اصل عدم قطعیت هایزنبرگ محدود می‌شود. یعنی، هر فرآیند منطقی دودویی در سامانه‌ای با انرژی میانگین ΔE نمی‌تواند در مدت زمانی کمتر از Δt روی دهد و عملکرد نهایی یک رایانه به وسیله انرژی کل آن محدود می‌شود [۱۲].

به لحاظ فنی، یک ترانزیستور کلاسیک (یا هر افزاره دیگری که بر پایه نیم‌رساناها ساخته شده باشد)، بایستی به اندازه کافی بزرگ باشد تا از پیوستگی حالات الکترونیکی تشکیل‌دهنده یک نوار انرژی (به‌عنوان مثال، نوار ظرفیت و نوار رانش^۳)، سود ببرد. اجزایی که بسیار کوچک‌اند اثر محدودیت‌های کوانتومی^۴ را تجربه خواهند کرد که مشخصه‌های الکتریکی و اپتیکی نیم‌رساناها را تغییر می‌دهد. علاوه بر این، کنترل غلظت و توزیع آلاینده‌گی‌ها^۵ در چنین ابعاد کوچکی، بسیار دشوار است [۱۳]. یک مکعب سیلیکونی $1 \times 1 \times 1 \mu\text{m}$ ، با چگالی آلاینده 10^{16} در هر cm^3 حاوی 10^4 اتم آلاینده‌گی است. این مقدار برای یک مکعب سیلیکونی با طول یال 1 nm ، به‌طور میانگین تنها به $1/25$ اتم آلاینده‌گی

¹ Crosstalk

² $c = 299792458 \text{ m} \cdot \text{sec}^{-1}$

³ Valence band and conduction band

⁴ Quantum confinement effect

⁵ Dopant

⁶ Hans Kuhn

محققان تصور می‌کردند که پیش از این در آستانه دستیابی به چنین پیشرفت‌هایی بوده‌اند. در واقع، در اوایل دهه ۱۹۶۰، در اواسط دهه ۱۹۸۰ و در اوایل دهه ۲۰۰۰، سه بار این اتفاق افتاد. هر بار، این شاخه از علم مجبور شد (به‌واسطه نتایج ضعیف) از وعده‌ها و امیدهایی که ایجاد کرده بود پا پس بکشد. با این حال، داستان الکترونیک مولکولی به خاطر آن چیزی که در مورد ماهیت تحقیق و پیشرفت و نیز در مورد ظرفیت بشر برای خوش‌بینی و گستاخی می‌گوید، ویژه است. در ادامه به‌صورت فهرست‌وار، به بخش‌های مهم تاریخ ادوات مولکولی اشاره می‌کنیم:

۱. آرتور فن‌هیپل^{۱۲} و گروه تحقیقاتی او در دانشگاه MIT اولین کسانی بودند که رشد تک مولکول‌ها را به‌عنوان رهیافتی محتمل کشف کردند. وی در سال‌های ۱۹۵۹ و ۱۹۶۵ به ترتیب ویراستار دو کتاب با عناوین «علم و مهندسی مولکولی»^{۱۳} و «طراحی مولکولی مواد و ادوات»^{۱۴} بود.
۲. در سال ۱۹۵۹ میلادی، نیروی هوایی ایالات متحده برای توسعه مدارهای حالت جامد از بلورهای معدنی آلاییده شده، از شرکت‌های Westinghouse، Texas Instruments و چندین شرکت دیگر حمایت مالی کرد (آغازگر نگاه پایین به بالا به مواد مورد استفاده بود).
۳. عدم موفقیت کامل شرکت Westinghouse در ارائه یک مدار مولکولی بر پایه بلورهای ژرمانیوم و در مقابل، موفقیت‌های مداوم مدارهای مجتمع سیلیکونی، موجب ناپدید شدن موج اول الکترونیک مولکولی شد.
۴. آویرام و راتنر در دهه ۱۹۷۰، عصر جدیدی از الکترونیک مولکولی را براساس مولکول‌های آلی به‌جای بلورهای معدنی آغاز کردند.
۵. ایده استفاده از مولکولی‌های آلی مورد توجه توسط شیمیدانی به نام «فارس‌ت کارتر»^{۱۵} در آزمایشگاه تحقیقاتی نیروی دریایی ایالات‌متحده قرار گرفت. کارتر توانست مجموعه‌ای شامل متخصصین شیمی، فیزیک تجربی، مهندسی برق، محققان زیست‌فناوری، آینده‌پژوهان و سیاست‌گذاران دفاع ملی آمریکا را گرد هم آورد.
۶. در همین حال، پروژه‌های ملی‌ای با بودجه مناسب (اما با جاه‌طلبی کمتر) در ژاپن، اتحاد جماهیر شوروی و بریتانیا کلید خوردند.

تک لایه‌های نمک‌های کادمیوم اسیدهای چرب به چاپ رسید [۱۷]. آن نتایج نشان دادند که با افزایش ضخامت لایه، رسانش به‌طور نمایی کاهش می‌یابد. بنابراین، تونل‌زنی الکترون از میان لایه‌های آلی را آشکار کرد. چند سال پس از آن، یک دانش‌آموخته دانشگاه نیویورک با نام آریه آویرام، پایان‌نامه دکتری خود را با یک پیشنهاد جسورانه شروع کرد: «با توجه به نشانه‌ای از طبیعت، [که] از مولکول‌ها برای انجام بسیاری از پدیده‌های فیزیکی استفاده می‌کند، ممکن است بتوان اجزای الکترونیکی را تا اندازه مولکولی کاهش داد». آنچه آویرام پیشنهاد کرد، انقلابی بود: گذار از روند کوچک‌سازی در قانون مور و جایگزینی آن با ایده استفاده از تک مولکول‌های آلی به‌جای ترانزیستورهای سیلیکونی و دیویداها. او در مقاله‌ای با همکاری استاد مشاورش، مارک راتنر^۱، حتی یک نقطه شروع نظری برای چنین انقلابی توصیف کرد: یک یکسوکنده مولکولی^۲ برای تبدیل جریان متناوب به جریان مستقیم [۱۸]. پس از آن، توسعه میکروسکوپ پروب روبشی^۳ در سال ۱۹۸۲ میلادی صورت پذیرفت [۱۹]. این فناوری قدرتمند (به‌عنوان نقطه عطفی در تاریخ الکترونیک) توانست علاوه‌بر، نقشه‌برداری سطح^۴، به مشخصه‌یابی خواص تراپرد این ساختارها نیز بپردازد. از سوی دیگر، نظریه‌های به‌کار رفته برای تفسیر مشخصه‌های جریان-ولتاژ اتصال‌های مولکولی در دهه ۱۹۹۰ میلادی توسعه یافتند. به عنوان مثال، اولین رهیافت از فرمول‌بندی لاندائو^۵ بهره برد [۲۰]، به‌نحوی که از پراکندگی کشسان و تعیین مؤلفه‌ای، موسوم به «ضریب عبور»^۶ استفاده می‌کرد. پس از آن، رهیافت‌های نظری دیگری همچون تابع گرین غیرتعادلی^۷، فرمول‌بندی بریت-ویگنر^۸ و مدل سیمونز^۹ ارائه شدند که بسیار قدرتمندتر بودند [۲۱]. در سال ۲۰۰۵ کریستین یواشیم^{۱۰} و همکارش رهیافتی کنترلی ارائه دادند^{۱۱} تا بتواند از سامانه‌های کوانتومی مانند تک مولکول‌ها برای انجام عملیات محاسباتی استفاده کند [۲۲]. در این میان، طراحان تراشه در مواجهه با قانون مور با موانع سخت‌تری رو به‌رو شده‌اند تا جایی که مهندسين شرکت اینتل در سال ۲۰۱۵ میلادی اعلام کردند که دستیابی به گره ۱۰ nm تا سال ۲۰۱۷ به تأخیر می‌افتد [۲۳]. این اتفاق نشان داد که پیشرفت‌های الکترونیک مولکولی تا چه اندازه حیاتی بوده‌اند.

¹ Mark Ratner

² Molecular rectifier

³ Scanning probe microscopy (SPM)

⁴ Surface topography

⁵ Landauer

⁶ Transmission coefficient

⁷ Nonequilibrium Green's function (NEGF)

⁸ Breit-Wigner formula

⁹ Simmons model

¹⁰ Christian Joachim

¹¹ Quantum Hamiltonian Computing

¹² Arthur R. von Hippel

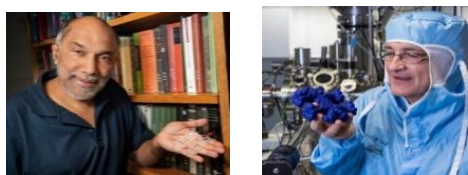
¹³ Molecular Science and Molecular Engineering

¹⁴ The Molecular Designing of Materials and Devices

¹⁵ Forrest Carter

۱۹۹۳ میلادی پایه گذاری شد [۶]. همچنین، وی در زمینه طراحی شیمیایی محصولی با عنوان «آنالیزورهای گازی/الکترولیت برای محافظت از خون» (OPTI[®]) همکاری کرد که هم اکنون توسط شرکت Optimedical عرضه می شود [۲۴].

۱۰. کریستین یواشیم (که پایان نامه دکتری وی در ۱۹۸۵ میلادی^۷، اولین پایان نامه الکترونیک مولکولی در اروپا بود)، در اواخر ۱۹۸۶، به عنوان محقق پسادکتری به گروه دکتر آویرام در IBM پیوست. در آنجا، تئوری الکترونیک مولکولی را کامل کرد و برای سرگرمی از میکروسکوپ تونل زنی روشی^۸ (STM) برای بررسی تک مولکول ها استفاده می کرد. وی توانست در سال ۱۹۸۷ میلادی (به همراه همکاران خود)، برای اولین بار از STM برای کلیدزنی روشن/خاموش یک تک کلید تک مولکولی همی کوئین^۹ استفاده کند. به طور هم زمان، اولین تئوری اوربیتال مولکولی برای جریان تونل زنی از میان مولکول را توسعه داد که خود بعدها (در ۱۹۹۰ میلادی) زمینه ساز شیوه محاسباتی Elastic Scattering Quantum Chemistry شد. در حال حاضر، این روش، شیوه استاندارد برای محاسبه و تفسیر تصاویر STM مربوط به مولکول های جذب شده بر روی یک سطح است [۲۵].

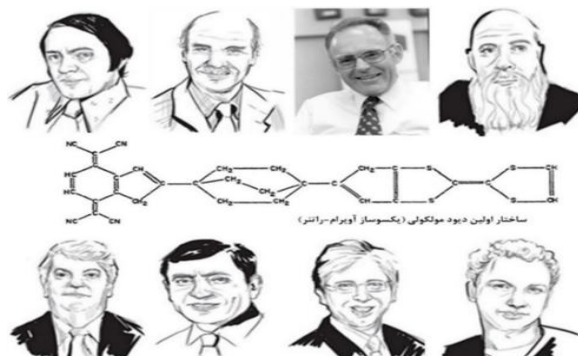


شکل (۴): کریستین یواشیم (راست) و آمیلرا دسیلوا (چپ)

۱۱. در ایالات متحده، پیشنهاد تحقیق رید و تور بر روی میز جین الکساندر^{۱۰}، مسئول کمک هزینه ها (و سپس معاون مدیر) در آژانس پروژه های تحقیقاتی پیشرفته دفاع^{۱۱} (DARPA) قرار گرفت. آژانس به سرعت این کار را تأمین مالی کرده و سپس در سال ۱۹۹۸ میلادی، حمایت خود را از طریق برنامه Moletronics گسترش داد. در نهایت، پشتیبانی DARPA از رید، تور و همکارانشان و گروه های مشابه در Hewlett-Packard، IBM، Northwestern، Penn State و دیگر مناطق، به حدود ۱۵ میلیون دلار در سال افزایش یافت.

۱۲. دنی پراث^{۱۲} و همکارانش در سال ۲۰۰۰ میلادی، انتقال الکترونیکی در سیم ساخته شده از DNA را اندازه گیری کردند.

۷. علی رغم وعده های بسیار خوش بینانه کارتر، هیچ کس موفق نشد حتی یک دیود یا ترانزیستور تک مولکولی تولید کند و موج دوم الکترونیک مولکولی نیز از بین رفت.



شکل (۳): برخی از تأثیرگذارترین محققان در تاریخ الکترونیک مولکولی. بالا، از چپ به راست؛ آویرام، راتنر، مور، کارتر. پایین، از چپ به راست؛ رید، تور، وایس و هنریک شون. طرحی از ساختار اولین یک سوساز مولکولی موسوم به یک سوساز آویرام-راتنر

۸. در یکی از کنفرانس هایی که با تلاش های آویرام در جزایر ویرجین^۱ برگزار شد، مارک رید^۲ از دانشگاه ییل^۳ (که در زمینه تهیه ریزساختارها تخصص داشت) با یک شیمیدان به نام جیمز تور^۴ ملاقات کرد که توانسته بود راهی برای سنتز مولکول های آلی بیابد که می توانستند (حداقل از لحاظ نظری) به عنوان «افزارهای کلیدزنی مولکولی» عمل کنند. اما تور هنوز نمی دانست چگونه مولکول هایش را به یک مدار وصل کند تا ببینند آیا واقعاً می توانند مشخصه کلیدزنی را از خود نشان دهند یا خیر. رید یک راه حل ارائه داد: اینکه او از شیوه های تولید ریز ساختارها برای ایجاد الکترودهایی که به وسیله یک شکاف کوچک از هم جدا شده اند استفاده کند تا بتواند مولکول های تور را به داخل آن شکاف بریزد. اگر فقط یک مولکول به صورت پلی در شکاف عمل کند و الکترودها را به هم متصل کند، هر جریانی که در مدار شارش یابد، قابل اندازه گیری خواهد بود.

۹. به موازات این پیشرفت ها، گروه دیگری از محققان شیمی در اروپا (دسیلوا و همکارانش) توانستند منطق مولکولی را به صورت یک شاخه تجربی جدید در شیمی معرفی کرده و آشکار سازی/کلیدزنی بر مبنای اصل کلی نشر نور (انتقال الکترون ایجاد شده توسط فوتون)^۵ را ایجاد کنند. این رهیافت از الگوی الکترونیک کلاسیکی پیروی نمی کند و در سال

⁶ <http://www.optimedical.com/products-services/opti-CCA-TS2.html>

⁷ با موضوع «ریاضیات فیزیک حاکم بر مفهوم الکترونیک مولکولی»

⁸ Scanning Tunneling Microscopy (STM)

⁹ Hemi quinone

¹⁰ Jane "Xan" Alexander

¹¹ Defense Advanced Research Projects Agency (DARPA)

¹² Danny Porath

¹ Virgin Islands

² Mark Reed

³ Yale

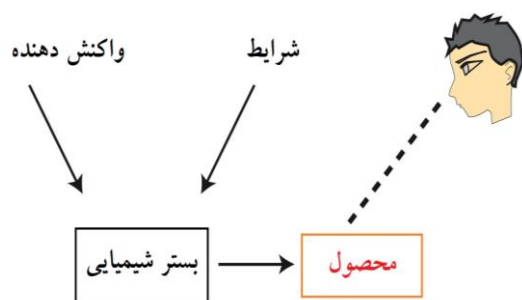
⁴ James Tour

⁵ Photoinduced electron transfer (PET)

برخلاف اینکه در حدود نیم قرن پیش ایده ساخت افزاره‌های مولکولی بیان شده، اما این حوزه هنوز نتوانسته است به آن چیزی که استحقاق دارد دست یابد. داشتن رقیبی قدرتمند همچون الکترونیک سیلیکونی، در کنار مسائل نظری و پیچیدگی‌های فنی در راه ساخت ادوات مولکولی باعث شده تا سیر تکامل آن، این چنین کند پیش رود. با این حال، از مجموع توضیحات و مطالعات صورت گرفته، به نظر می‌رسد که تمامی چالش‌های مرتبط با طراحی یک محاسبه‌گر مولکولی قابل حل باشند و تولید افزاره‌های مولکولی فعال (که هدف همیشگی فناوری نانو بوده است)، یک گزاره واقع‌گرایانه باشد.

۵- مولکول منطقی

مهم نیست که اطلاعات به چه صورتی کدگذاری می‌شوند؛ سیگنال‌های الکتریکی (الکترونیک کلاسیک)، پالس‌های نوری (فوتونیک)، یا حرکت‌های مکانیکی. تنها موضوعات مهم، تمیز پذیری سیگنال‌های منسوب به مقادیر منطقی و اصول جبر بولی هستند. هر سامانه فیزیکی که حالت مربوط به آن را بتوان به صورت یک تابع بولی از سیگنال‌های ورودی (با ذات بولی) توصیف نمود، یک «گیت منطقی» است. به لحاظ شیمیایی، یک آزمایش ساده شامل افزودن پیش ماده‌های مورد نظر به محیط واکنش تحت شرایط آزمایشگاهی (مانند افزایش دمای واکنش) است. در این حالت، با توجه به تغییر یک مشخصه (مانند رنگ) یا تغییر فرم فیزیکی، فرد مشاهده می‌کند که حاصل این آزمایش تبدیل مواد اولیه به محصول مشخصی است.



شکل (۶): طرح‌واره‌ای از یک سامانه شیمیایی ساده [۲۷]

این فرآیند از دید یک دانشمند علم رایانه به نحوی روی می‌دهد که محصول، خروجی حاصل از مجموعه ورودی‌های فیزیکی و شیمیایی است. البته، هنگام بیان این قیاس باید به این نکته توجه گردد که ورودی‌های یک دستگاه منطقی ساده این قدرت را دارند که به طور آبی خروجی به دست آمده را کنترل کرده و تغییر دهند، فرآیندی که در واکنش‌های شیمیایی قابل حصول نیست.

چنین سیم‌هایی جایگزین کارآمدی برای اتصالات مس در مدارهای الکترونیکی بودند [۲۶].

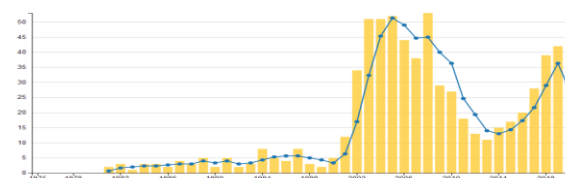
۱۳. در سال ۲۰۰۳ میلادی، یکی از همکاران تور به نام پل وایس^۱ (در Penn State) به مجله Science گفت که برخی از نتایج قبلی رید و تور در مورد خواص الکترونیکی-مولکولی، مانند مقاومت دیفرانسیلی منفی، آن‌طور که در مقاله ۱۹۹۹ میلادی ذکر شده، نبودند.

۱۴. در سال ۲۰۰۱ میلادی، یان هنریک شون^۲ در آزمایشگاه بل^۳ با یک سری اکتشافات عالی در الکترونیک مولکولی، از جمله جام مقدس این شاخه از علم، یعنی ترانزیستور تک مولکولی، انفجاری به پا کرد. دستاوردی که قطعاً می‌توانست جایزه نوبل را برای وی به همراه داشته باشد. اما، تنها یک سال بعد ثابت شد که این ترانزیستور و تقریباً هر چیز دیگری که شون مدعی به انجام آن‌ها بود، کاملاً ساختگی و نادرست بوده‌اند. این اتفاق، موج سوم الکترونیک مولکولی را با شکستی بزرگ رو به رو کرد.

۱۵. تأسیس سازمان ملی ابتکارات نانو فناوری^۴ در ایالات متحده (و برنامه‌های مشابه در سایر کشورها) و دریافت کمک مالی ۲۰ میلیارد دلار تا سال ۲۰۱۵ میلادی که به تغییر فرهنگ پژوهش، هدفمند شدن تحقیقات، انجام آزمایش‌های کنترلی و بهبود کیفیت نتایج منجر شد.

۱۶. آغاز موج چهارم الکترونیک مولکولی، با سرعت بسیار کمتر اما دقیق‌تر، و تأثیرگذاری معنادارتر بر سایر حوزه‌های تحقیقاتی از جمله در نمایشگرهای دیود آلی نشر نور، گرافن‌ها، حافظه میله‌ای ممریستر^۵، تحقیقات نانوعصبی و اندرکنش انسان-ماشین.

روند رو به رشد توجه محققان و مخترعان به الکترونیک مولکولی را می‌توان در شکل زیر مشاهده نمود.



شکل (۵): تعداد پتنت‌های ثبت شده در تاریخ ۱۳۹۹/۰۱/۱۲ در تارنمای patentinspiration با استفاده از پنج کلیدواژه molecular logic gate، molecular electronics، computation، molecular logic .. molecular gate

^۱ Paul Weiss

^۲ Jan Hendrik Schön

^۳ Bell

^۴ National Nanotechnology Initiative

^۵ Memristor

^۶ Logic gate

باشد، خروجی نیز پایین خواهد بود. یا گیت OR که همان جمع منطقی متغیرهای ورودی است، یکی از گیت‌های اصلی است که تمام توابع دیگر را می‌توان به کمک آن ساخت. وقتی هر کدام از ورودی‌ها در حالت بالا باشند، گیت OR خروجی بالا (یک منطقی) تولید می‌کند و زمانی که تمام ورودی‌ها پایین باشند، خروجی پایین به دست می‌آید. بنابراین، این گیت هر حالت بالایی در هر یک از ورودی‌ها را تشخیص می‌دهد. از همه مهم‌تر، برخی از این گیت‌های منطقی دو ورودی، اجازه ساخت پردازنده‌های محاسباتی را می‌دهند که در رایانه‌های مدرن ضروری هستند.

جدول (۲): عملگرهای منطقی دوگانه بولی؛ عناوین، جدول درستی، علائم و نماد جبری برای سامانه‌ای با دو ورودی منطقی [۲۷]

Input		Output						Output		Output	
(A)	(B)						(Carry)	(Sum)	(Borrow)	(Diff.)	
0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	
0	1	0	1	1	0	0	0	1	1	1	
1	0	0	1	0	1	0	0	1	0	1	
1	1	1	1	0	0	1	1	0	0	0	

Name	AND	OR	INH	XOR	XNOR	NOR	Half-adder	Half-subtractor
Symbol								
Algebraic expression	AB	$A+B$	$\bar{A}B$	$A\bar{B}+\bar{A}B$	$\overline{A\bar{B}+\bar{A}B}$	$\overline{A+B}$	Carry Sum	Borrow Diff.

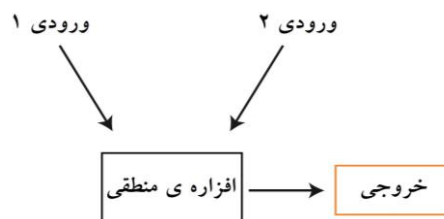
در بخش بعد، به سراغ معرفی ادواتی خواهیم رفت که قطعاً بیشترین تأثیرپذیری را از تغییر رهیافت داشته و بیشترین تأثیرگذاری را بر آینده بشر خواهند داشت.

۶- الکترونیک مولکولی

۶-۱- انواع الکترودها، و روش‌های ساخت پیوندگاه

مولکولی

در محل پیوندگاه‌های الکترونیک مولکولی، جایی که مولکول‌ها به‌عنوان جزء سازندهٔ افزار الکترونیکی عمل می‌کنند، سیگنال الکتریکی از طریق الکترودهای جفت شده با مولکول وارد یا از مولکول خارج می‌شود. در واقع، حامل‌های بار از طریق یکی از الکترودها به مولکول تزریق شده و سپس از طریق الکترودهای دیگر جمع می‌شوند. هر دو فرآیند تزریق و جمع‌آوری بار در فصل مشترک الکترودها-مولکول روی می‌دهند. بنابراین، واضح است که ویژگی‌های این فصل مشترک نقش بسیار مهمی در خواص الکتریکی ادوات مولکولی دارد [۲۸]. تاکنون بسته به نوع کاربرد، و تک یا بس مولکول بودن پیوندگاه مولکولی مدنظر، انواع مختلفی از الکترودها برای ساخت یک افزار مولکولی استفاده شده‌اند. لیستی از آن‌ها در شکل (۸) آمده است. از آنجایی که در ابتدای توسعهٔ الکترونیک مولکولی غالباً از الکترودهای فلزی استفاده شده است، بیشتر گزارش‌های ثبت شده به این نوع الکترودها که غالباً از جنس طلا بودند مربوط می‌شوند.



شکل (۷): طرح‌واره‌ای از یک سامانه منطقی ساده [۲۷]

۵-۱- منطق بولی^۱

اگرچه صنعت نیم‌رسانا، محاسبات را به مرکز توجهات جهانی آورد، اما پیش از آن که ترانزیستورها ساخته شوند نیز ایده‌های محاسباتی در دسترس بوده و تاریخ طولانی‌ای دارند. به‌طور خلاصه، سامانه اعداد دودویی اجازه می‌دهد که «درست» را به «۱» و «اشتباه» را به «۰» نسبت دهیم که به‌نوعی ارائهٔ یک بیانیه در بستر ریاضیات است. میراث ماندگار جرج بول^۲ در ایرلند^۳، روش دست‌کاری این اعداد ساده با عملیات منطقی بود. گیت‌های منطقی که چنین عملیاتی را انجام می‌دهند، در ابتدایی‌ترین شکل خود، تنها دارای یک ورودی و یک خروجی هستند.

جدول (۱): عملگرهای منطقی دوگانه بولی؛ عناوین، جدول درستی، علائم و نماد جبری برای سامانه‌ای با یک ورودی منطقی [۲۷]

Input (A)	Output			
0	0	1	1	0
1	1	0	1	0

Name	YES	NOT	PASS 1	PASS 0
Symbol				
Algebraic expression	A	\bar{A}	1	0

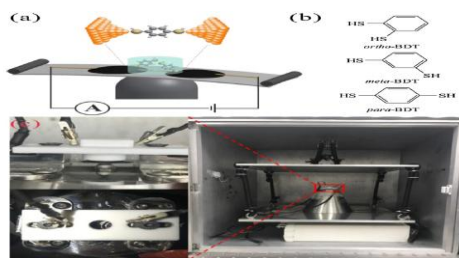
همان‌طور که در شکل فوق مشاهده می‌شود، گیت NOT هر سیگنال دودویی که دریافت می‌کند را معکوس می‌کند. سه مورد دیگر (YES, PASS 1, PASS 2) کمتر در صنعت نیم‌رسانا مورد توجه قرار گرفته‌اند. با این حال، در کاربردهای ارائه شده برای مولکول‌های منطقی بسیار مورد استفاده قرار می‌گیرند. همان‌طور که در جدول (۲) نمایش داده شده است، منطق دو ورودی اجازه انجام عملیات بیشتری می‌دهد. به‌عنوان مثال، گیت AND تنها زمانی خروجی بالا (یک منطقی) تولید می‌کند که همه‌ی ورودی‌ها در حالت بالا باشند و اگر هر یک از ورودی‌ها در حالت پایین

¹ Boolean logic

² George Boole

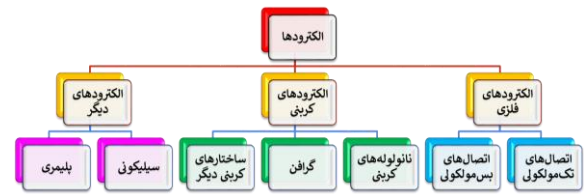
³ Ireland

نظر، روش مکانیکی است. ایده ساخت و کنترل مکانیکی پیوندگاه‌های شکست^۱ برای اولین بار در سال ۱۹۸۵ میلادی و به منظور مطالعه خواص تونل‌زنی ابر رساناها داده شد [۴۳]. اما، اولین بار مارک رید و همکارانش بودند که در ۱۹۹۷ از روش MCBJ برای بررسی ویژگی‌های تک مولکول‌ها استفاده کردند [۳۱]. از سه بخش تشکیل شده است؛ یک زیر لایه انعطاف‌پذیر که حاوی یک سیم فلزی یا نانو ساختار الگو داده شده است، یک میله فشار دهنده برای شکستن نانو ساختار و محافظی برای خم کردن زیر لایه. حرکت عمودی میله فشار دهنده (که می‌تواند به‌دقت توسط اپراتور کنترل شود) نیرویی بر زیر لایه منعطف اعمال می‌کند. هنگامی که زیر لایه خم می‌شود، کشیدگی سیم فلزی شروع می‌شود و در نتیجه سطح مقطع شکاف کاهش می‌یابد. افزایش کشیدگی، در نهایت منجر به شکستگی کامل سیم فلزی در محل شکاف می‌شود. در نهایت، با شکست سیم فلزی، دو وجه الکتروود تمیز، به‌صورت خودکار، تهیه می‌شوند. فاصله بین الکتروودها را می‌توان به‌دقت با انجام فرآیند خمش/آسایش زیرلایه^۲ کنترل نمود. پس از جاگذاری مولکول‌ها با گروه‌های لنگری مناسب در دو انتهای آن (در شکاف تنظیم‌پذیر بین دو الکتروود) الکتروودها به هم متصل می‌شوند و می‌توان خواص الکترونیکی مولکول را بررسی و اندازه‌گیری نمود. اخیراً، محققان چینی در آزمایشگاه شیمی - فیزیک سطوح جامد توانستند نحوه و میزان تراورد بار از میان پیوندگاه ساخته شده با تک مولکول‌های بنزن دی‌تایپول^۳ را با استفاده از این تکنیک بررسی کنند [۴۴]. آن‌ها پایداری مکانیکی و اجزاء مورد نیاز برای اندازه‌گیری رسانش را بهبود داده تا بتوانند اندازه‌گیری‌های دقیق‌تری را برای انواع مختلف اتصال‌های استفاده شده انجام دهند.



شکل (۹): طرح‌واره‌ای از مجموعه‌ی MCBJ، مولکول‌های استفاده شده و تصاویر از مجموعه‌ی MCBJ آماده شده در مقاله فوق [۴۴]

وقتی از رهیافت‌های شیمیایی بهره برده می‌شود، بایستی بیشترین توجه به مولکول‌های اتصال (پُل) معطوف گردد. ممکن است این مولکول‌ها به‌صورت تصادفی به نقاط دلخواهی بر روی الکتروودها متصل شوند یا هر دو گروه عاملی فعال آن‌ها به یک



شکل (۸): انواع مختلف الکتروودهای بکار رفته در ساخت پیوندگاه‌های مولکولی

اما، نکته حائز اهمیت دیگر آنست که از چه روشی برای ساخت این پیوندگاه‌ها (همان فصل مشترک مولکول و الکتروود) استفاده شود. براین اساس، روش‌های متنوعی اعم از روش‌های میکروسکوپی، شیمیایی، الکتریکی، و مکانیکی به‌کار گرفته شده‌اند که هر یک مزایا و معایب مربوط به خود را دارند. لازم به ذکر است که آدرس‌دهی عبارت است از توانایی یک افزاره دیجیتال برای آنکه بتواند بدون نیاز به اجزای دیگر، پاسخ سیگنال ورودی را داده و آن را به بخش‌های (ادوات) دیگر بفرستد. در جدول (۳) به برخی از مهم‌ترین روش‌های استفاده شده اشاره می‌شود.

جدول (۳): مقایسه برخی روش‌های ساخت اتصال‌های مولکولی

روش ساخت اتصال مولکولی	تعداد مولکول‌ها	آدرس‌دهی	ساخت	بازده	رفرنس
scanning probe microscopy	تک گروه	دشوار	پیچیده	بالا	[۲۹]، [۳۰]
mechanically controllable break junction	تک	خیر	پیچیده	بالا	[۳۱]
electromigration nanogap	تک	بله	پیچیده	پایین	[۳۲]
electrochemical deposition	تک	بله	پیچیده	بالا	[۳۳]
surface-diffusion-mediated deposition	تک	خیر	پیچیده	بالا	[۳۴]
self-aligned lithography	گروه	دشوار	سرراست	میانی	[۳۵]
nanopore or nanowell	گروه	بله	سرراست	میانی	[۳۶]
on-wire lithography	گروه	دشوار	سرراست	میانی	[۳۷]
buffer interlayer-based junction	گروه	محتمل	سرراست	بالا	[۳۸]
CNT-based junction	تک	بله	پیچیده	میانی	[۳۹]
graphene-based junction	تک	بله	پیچیده	بالا	[۴۰]
silicon-based junction	گروه	دشوار	پیچیده	میانی	[۴۱]
polymer-based junction	گروه	دشوار	پیچیده	میانی	[۴۲]

به‌دلیل گستردگی این موضوع، تنها به چند مورد از آن‌ها می‌پردازیم. یکی از معروف‌ترین روش‌های تشکیل پیوندگاه مورد

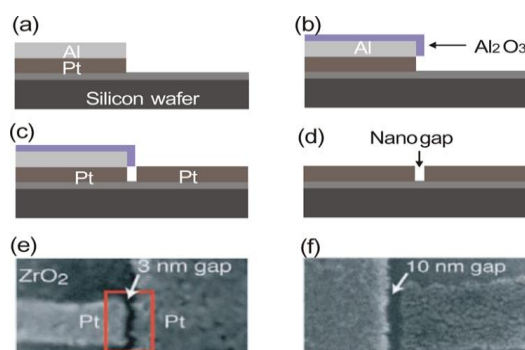
^۱ Mechanically Controllable Break Junction (MCBJ)

^۲ Bending or relaxing the substrate

^۳ Benzene dithiol (BDT)

به لحاظ شیمیایی، نانو لوله های کربنی از کربن های پیوندی sp^2 تشکیل می شوند. بنابراین، می توان آن ها را با بهره گیری از تکنیک های مناسب فعال کرده و امکان برهمکنش با دنیای خارج را از طریق اتصال های جدید مانند گروه های کربوکسیلیک ایجاد نمود. براساس این ایده، روشی ترکیبی متشکل از لیتوگرافی پرتو الکترونی در وضوح بالا و اکسیداسیون دقیق با پلاسمای اکسیژن مورد استفاده قرار گرفت تا شکاف های نانو مقیاس مناسبی در نانو لوله های کربنی تک جداره ایجاد شوند [۳۹]. در ناحیه بریدگی، نانو لوله کربن تک جداره با گروه های کربوکسیلیک عامل دار خواهد شد که امکان تشکیل اتصال قوی بین نانو لوله ها و مولکول ها را با استفاده از پیوند شیمیایی کووالانسی مانند پیوند آمید^۲ فراهم می آورد. این نتیجه بسیار حائز اهمیت است، چرا که وجود چنین پیوندهایی پایداری افزاره مولکولی را به شدت افزایش داده و به کارگیری پیوندگاه های تک مولکولی از نانو لوله های کربنی را به عنوان حسگر یا کلید محتمل تر می کند. در این روش، به طور خلاصه، آرایه ای از ترانزیستورهای مبتنی بر نانو لوله کربنی تک جداره که توسط فوتولیتوگرافی ساخته می شود، با لایه ای از PMMA پوشیده می شود، به طوری که روزنه بسیار کوچکی باز بماند. سپس، پلاسمای اکسیژن از طریق روزنه تزریق می شود تا الکترودهای دو وجهی پوشیده شده با گروه های کربوکسیلیک را به وسیله اکسیداسیون دقیق موضعی تولید کند (شکل ۱۱). لازم به ذکر است که می توان اندازه نانو شکاف را با تغییر مدت زمان قرارگیری در معرض اکسیژن کنترل کرد. این روش لیتوگرافیکی سه مزیت عمده دارد. نخست، وجود گروه عاملی کربوکسیلیک و تشکیل پیوندهای قوی شیمیایی بین الکتروده و مولکول، مقاومت افزاره مولکولی در برابر محرک های خارجی و تغییرات شیمیایی اضافی را بهبود بخشیده و باعث افزایش چشمگیر پایداری افزاره مولکولی می شود. دوم اینکه، به دلیل شکل هندسی شبه - یک بعدی، که الکترودهای مبتنی بر نانو لوله های کربنی تک جداره (به صورت طبیعی) دارند، سایت های محدودی برای اتصال با مولکول ها فراهم می آورند. زمانی که این مشخصه با یک طراحی خاص برای مولکول ها همراه می شود، دقت و خلوص اندازه گیری های به عمل آمده در مقیاس مولکولی را می توان تضمین کرد. یعنی امکان آشکارسازی بسیاری از اطلاعات بنیادین در مقیاس مولکولی را فراهم می آورد. سوم اینکه، تمام فرآیند ساخت تحت شرایط محیطی انجام می شود که دشواری ها و پیچیدگی های دستیابی به چنین ادوات پیچیده ای را به مقدار قابل توجهی کاهش می دهد. از سوی دیگر، این فرآیند ساخت را می توان به تولید در مقیاس صنعتی گسترش داد.

الکتروده بچسبند و در نتیجه بازده اتصال های مولکولی کاهش یابد. رهیافت پیشنهاد شده برای کم کردن احتمال وقوع این مسائل، استفاده از یک مولکول دو عاملی است که تنها یک انتهای آن بتواند با الکتروده واکنش دهد. سپس، مولکول دوم برای پل زدن بین ترمینال های آزاد مولکول اول استفاده می شود. انتخاب مولکول دوم به گونه ای انجام می شود که هر دو انتهای آن به گروه عاملی دوم (آزاد) مولکول اول وابسته بوده و هیچ بستگی ای به سطح الکترودها نداشته باشد [۴۵]. برای آزمون این رهیافت در ادوات الکترونیک مولکولی، تکنیک جدیدی به نام «لیتوگرافی خودهم تراز شده»^۱ معرفی شده است تا بستر آزمایشی مناسبی برای اندازه گیری های الکتریکی در مقیاس مولکولی را بسازند [۳۵]. با این الکترودهای خود هم تراز شده، آن ها ثابت کردند که شیمی واکنش می تواند گوناگونی مولکول ها و گروه های عاملی فعال در مولکول ها را به شکل چشمگیری افزایش دهد، به نحوی که بتوان به جای ساخت الکترونیک نانو مقیاس روشی برای سنتز آن فراهم آورد. همان طور که در شکل (۱۰) مشاهده می شود، ابتدا با استفاده از روش انباشت لایه اتمی، لایه ای از اکسید زیر کونیوم بر روی ویفر سیلیکونی تمیزی قرار داده می شود. سپس، الکتروده آلومینیوم / پلاتینیوم (با ضخامت تقریبی ۳ nm و پهنای تقریبی ۲۰۰ nm) بر روی آن لایه نشانی می شود (با استفاده از لیتوگرافی پرتوی الکترونی)، به نحوی که لایه نازکی از اکسید سیلیسیوم بین فیلم های فلزی قرار داده می شود تا حذف لایه نازک آلومینیوم در مرحله بعد راحت تر شود. پس از قرار گرفتن در معرض اکسیژن محیط، لایه اکسیدی بر روی سطح آلومینیوم تشکیل می شود. در گام بعدی، الکتروده دوم با پهنای تقریبی ۳۰ nm و گافی (فاصله از الکتروده اول) که به ضخامت لایه اکسید بستگی دارد، تهیه می شود. سپس، با استفاده از محلول تترامیل آمونیوم هیدروکسید لایه های اضافی پاک می شوند تا گاف نانو مقیاس حاصل شود. مزیت اصلی این روش در تولید انبوه شکاف هایی در مقیاس مولکولی و با بازده قابل توجه است.

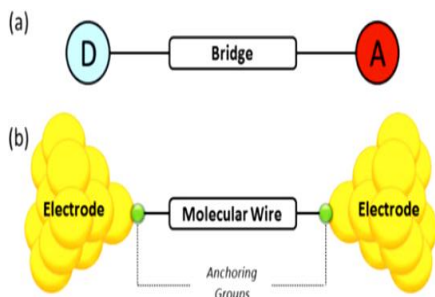


شکل (۱۰): فرآیند ساخت الکترودهای نانومقیاس بر اساس روش لیتوگرافی خودهم تراز شده [۳۵]

² Amide

¹ Self-aligned lithography

مولکولی^۱ برای اتصال ادوات مولکولی به یکدیگر استفاده می‌شود. سیم‌های مولکولی ساده‌ترین بخش افزاره‌ی الکترونیکی هستند و برای توسعه‌ی یافته‌ها یا فناوری‌های به‌خصوص (که برای فهم الکترونیک در مقیاس مولکولی لازم‌اند) بسیار مناسب‌اند. بررسی سیم‌های مولکولی از دو لحاظ حائز اهمیت است: ۱- سیم مولکولی به‌عنوان مسیری برای انتقال بار (الکترون‌ها) در ادوات مولکولی مطرح است که با استفاده از ساختارهای مختلفی مانند زنجیره‌های هیدروکربنی^۲، ترکیبات آلی-فلزی^۳، آرایه‌های پرفیرین^۴، نانولوله‌های کربنی^۵ و مولکول‌های زیستی^۶ (DNA و کاروتین^۷) قابل ساخت هستند. ۲- بررسی سیم مولکولی، جنبه‌های مهمی را در رسانش تک مولکول‌ها نمایان می‌کند؛ از جمله اتصال در فصل مشترک الکتروود-مولکول، تنظیم ترازهای انرژی و اندازه‌گیری رسانش در مقیاس مولکولی. در شکل (۱۳) ساختار کلی یک سیم مولکولی نشان داده شده است.



شکل (۱۳): طرح‌واره‌ای از یک سیم مولکولی [۴۶]

همان‌طور که در شکل فوق پیداست، به‌طورکلی، سیم‌های مولکولی استفاده‌شده در نانو مدارها را می‌توان به لحاظ ساختاری به دو بخش تقسیم نمود: گروه‌های لنگری^۸ که وظیفه اتصال به الکترودهای خارجی را برعهده دارند و ستون فقرات (بخش اصلی) مولکولی^۹ که به‌عنوان مسیری برای ترابرد بار عمل می‌کند [۴۷]. ارجحیت سیم را می‌توان تا حدودی با رسانایی الکترونیکی آن (با انجام اندازه‌گیری‌های رسانش) ارزیابی کرد. با این‌حال، محققان در این نکته اجماع نظر دارند که هم ساختار مولکول‌ها و هم ویژگی‌های ذاتی فصل مشترک الکتروود-مولکول بر روی اندازه‌گیری رسانایی اثر گذارند. بنابراین، بخش اصلی و گروه‌های

¹ Molecular Wire

² Hydrocarbon chains

³ Metal-Organic compounds

⁴ Porphyrin arrays

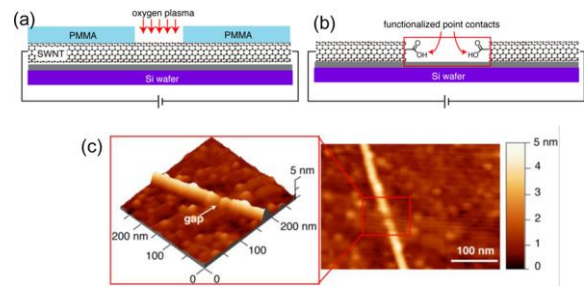
⁵ Carbon Nanotubes

⁶ Biological molecules (Biomolecule)

⁷ Carotene

⁸ Anchoring groups

⁹ Molecular backbones



شکل (۱۱): فرآیند برش اکسیدی با استفاده از لیتوگرافی برای ساخت نقاط اتصال نانولوله‌های کربنی تک‌جداره [۳۹]

۷- قابلیت‌های مولکولی در مدارهای الکترونیکی و حسگرهای شیمیایی

همواره جذابیت و ارزش یک شاخه علمی به این بستگی دارد که تا چه اندازه می‌تواند برای کاربردهای واقعی در زندگی مفید باشد، یا چگونه می‌تواند در زمینه‌های میان رشته‌ای استفاده شود. اگر شاخه جدید بتواند تأثیرات مثبتی بر روی افراد و کاربردها داشته باشد، تلاش‌های جامعه علمی برای توسعه آن شاخه موفق خواهد بود. در این قسمت به برخی جنبه‌های عملیاتی استفاده از مولکول‌ها در فیزیک و شیمی اشاره می‌شود (شکل ۱۲).



شکل (۱۲): قابلیت‌های مولکولی در مدارهای الکترونیکی و حسگرهای منطقی شیمیایی.

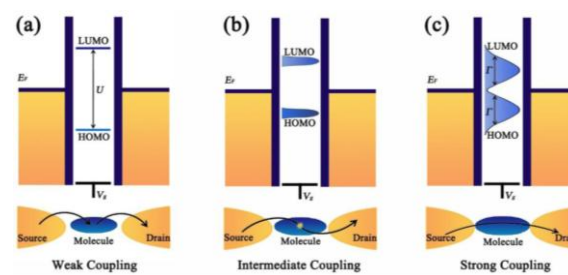
۷-۱- سیم مولکولی

هدف نهایی الکترونیک مولکولی، ساخت نانو مدارهایی متشکل از مؤلفه‌های الکترونیک مولکولی مجزا است. برای ارتباط ساختار اصلی هر قطعه الکترونیک با پایه‌های خارجی آن و همچنین ارتباط بین قطعات مختلف در یک مدار الکترونیکی، به اتصال و سیم مناسب نیاز است. در الکترونیک مولکولی نیز از سیم

۲-۷- یکسوساز (دیود) مولکولی

دیود یا یکسوکننده که شار جریان در یک جهت بایس (مستقیم^۴) را امکان‌پذیر می‌کند، درحالی‌که مانع از عبور جریان در جهت مخالف (معکوس^۵) می‌شود، یک افزاره^۶ الکترونیکی دو ترمینال^۷ بسیار مهم است. به‌طور متعارف، یکسوکننده‌ها به‌صورت اتصال‌های p-n^۸ متشکل از دو نوع ماده با حالت‌های الکترونیکی متفاوت (با استفاده از آلایش بلور) تجمع می‌شوند که یکی از بالغ‌ترین فناوری‌های نیم‌رسانا در صنعت سیلیکون هستند. بررسی دیودهای مولکولی کمک زیادی به افزایش درک محققان از نحوه انتقال الکترون‌ها در سامانه‌های باز^۹ مولکولی می‌کند. در طی دو دهه اخیر، انواع مختلفی از یکسوسازهای مولکولی معرفی و بررسی شده‌اند. بعضی یکسوسازها با استفاده از خواص ذاتی ساختارهای مولکولی ساخته شده‌اند. گروهی دیگر از یکسوسازها با جفت‌شدگی^{۱۰} متفاوت در فصل مشترک الکتروود مولکول ایجاد شده‌اند که شامل شیوه‌هایی همچون استفاده از الکتروودهای مختلف با توابع کار^{۱۱} متفاوت یا استفاده از الکتروودهای ترکیبی، استفاده از مولکول‌ها با گروه‌های لنگری^{۱۲} (اتم‌های لینک دهنده) مختلف شکل (۱۵) و... می‌باشند. سازوکارهای کلی یکسوکنندگی مولکولی که براساس مطالعات نظری و دستاوردهای تجربی به‌دست آمده‌اند، عبارتند از: مدل آویرام-راتنر (مدل AR) [۱۸]، مدل گرنیلوویچ-براتفوسکی-ویلیامز^{۱۳} (مدل KBW) [۴۸] و مدل داتا-پاولسون^{۱۴} (مدل DP) [۴۹]. یکسوساز آویرام-راتنر اولین افزاره الکترونیک پیشنهاد شده در حوزه الکترونیک مولکولی است. این ساختار، شامل سه ناحیه دهنده عایق و پذیرنده است. در این مدل، کل ساختار شامل سه ناحیه تونل‌زنی است که یکی از الکتروودها را به ناحیه پذیرنده، ناحیه پذیرنده را به ناحیه دهنده و ناحیه دهنده را به الکتروود دیگر متصل می‌کند (در این حالت، ترازهای مولکولی با اعمال ولتاژ تغییر می‌کنند). مدل KBW ساده شده^{۱۵} مدل AR است که تنها یک اوربیتال مولکولی در ناحیه مرکزی دارد. در این مدل، سدهای تونلی غیرمتقارن، باعث یکسوسازی جریان می‌شود. مکانیسم این مدل به این صورت است که فاصله اوربیتال از دو الکتروود یکسان نیست و به یکی از الکتروودها نزدیک‌تر است. از آنجایی‌که بیشتر ولتاژ اعمالی بر روی سد عایقی که طول بیشتری دارد افت می‌کند، شرایط رزونانس تونل‌زنی از طریق این تراز و با

لنگری سیم‌های مولکولی براساس معماری افزاره طراحی می‌شوند، درعین حال ماده تشکیل دهنده الکتروودها نیز اهمیت مشابهی دارد. در مورد فصل مشترک الکتروود-مولکول نیز بایستی به نوع برهمکنش موجود و هندسه محل تماس دقت شود. برهمکنش‌های غیرکووالانسی مانند برهمکنش واندروالس^{۱۶} یا انباشتگی آروماتیک^{۱۷} به‌عنوان پیوندهایی با جفت‌شدگی ضعیف و برهمکنش‌های کووالانسی به‌عنوان پیوندهایی با جفت‌شدگی قوی شناخته می‌شوند. میزان جفت‌شدگی الکترون‌ها بین الکتروودها و مولکول‌ها (که به لحاظ فیزیکی به‌عنوان سد انرژی بین الکتروود و مولکول در نظر گرفته می‌شود) یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های فصل مشترک الکتروود-مولکول است. بر اساس نتایج حاصل از قیاس بین قدرت جفت‌شدگی الکتروود-مولکول (Γ) و انرژی اضافه (U)^{۱۸}، سه نوع مختلف از میزان جفت‌شدگی در نظر گرفته می‌شوند: جفت‌شدگی ضعیف ($\Gamma << U$)، جفت‌شدگی قوی ($\Gamma \gg U$) و جفت‌شدگی متوسط. جفت‌شدگی‌های مختلف، تفاوت در همپوشانی توابع موج مولکول‌ها و حالت‌های الکترونیکی الکتروودها را آشکار می‌کنند؛ بنابراین، به سازوکارهای ترابرد و رسانایی‌های الکتریکی مختلف منجر می‌شود شکل (۱۴). در رژیم جفت‌شدگی ضعیف، ترازهای HOMO و LUMO مولکول‌ها کاملاً مشخص بوده و ترابرد الکترون به‌صورت یک فرآیند دومرحله‌ای صورت می‌پذیرد. در رژیم جفت‌شدگی متوسط، ترازها پهن‌تر و به انرژی فرمی الکتروودها نزدیک‌تر می‌شوند و ترابرد الکترون از طریق مولکول‌ها انجام می‌گیرد، درحالی‌که با الکترون‌های مولکول برهمکنش دارد. در رژیم جفت‌شدگی قوی، پهن‌شدگی زیادی برای ترازهای انرژی مولکولی روی می‌دهد و الکترون‌ها از طریق یک فرآیند تک-مرحله‌ای منتقل می‌شوند.



شکل (۱۴): نمایش طرح‌وار ترازهای انرژی فرآیند ترابرد بار در اتصال‌های مولکولی با قدرت جفت‌شدگی‌های متفاوت بین الکتروودها و مولکول‌ها. (a) در رژیم جفت‌شدگی ضعیف، (b) در رژیم جفت‌شدگی متوسط، و (c) در رژیم جفت‌شدگی قوی [۲۸]

^۴ Forward

^۵ Reverse

^۶ Open Systems

^۷ Coupling

^۸ Work functions

^۹ Anchoring groups

^{۱۰} Kornilovitch-Bratkovsky-Williams

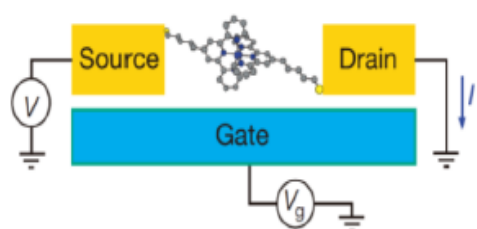
^{۱۱} Datta-Paulsson

^{۱۶} Van der Waals

^{۱۷} Aromatic stacking

^{۱۸} عبارت است از انرژی موردنیاز برای خارج شدن یک الکترون از HOMO منهای انرژی به‌دست‌آمده از افزودن یک الکترون به LUMO.

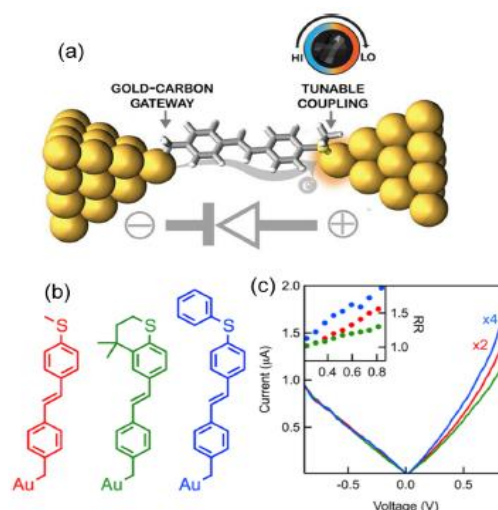
(الکترودهای چشمه و چاهک^۱) را به وسیلهٔ تعدیل ولتاژ اعمالی در الکتروده سوم (الکتروده گیت) کنترل می‌نماید. به‌طور کلی، هر جزء الکترونیک که بتوان جریان عبوری از آن را توسط یک ورودی دیگر کنترل کرد، ترانزیستور نامیده می‌شود. در الکترونیک مرسوم، جریان الکتریکی عبوری از ترانزیستور توسط جریان پایه سوم (جریان بیس در ترانزیستورهای دو پیوندی) و یا ولتاژ پایه سوم (ولتاژ گیت در ترانزیستورهای اثر میدان) قابل کنترل است. در الکترونیک مولکولی، کنترل جریان ترانزیستور توسط اعمال ولتاژ به گیت (V_G) و ایجاد میدان الکتریکی صورت می‌گیرد. هرچه میزان تأثیرگذاری این میدان بر سطوح انرژی ساختار مولکولی (کانال ترانزیستور) بیشتر باشد، کنترل جریان ترانزیستور راحت‌تر صورت می‌گیرد و ترانزیستور حاصل از لحاظ کاربردهای عملی کیفیت بالاتری دارد. در مورد حاضر، از مولکول‌های مناسب در فضای بین الکترودها استفاده می‌شود شکل (۱۶). از آنجایی که صنعت میکروالکترونیک در حال توسعهٔ مدارهای به‌شدت مجتمعی است که به افزاره‌هایی با ابعاد کوچک‌تر نیاز دارند، یکی از محدودیت‌های موجود به ترانزیستورها باز می‌گردد. بنابراین، ساخت و فهم نحوهٔ رفتار چنین افزاره‌هایی بخش بسیار مهمی از اهداف طولانی‌مدت نانو الکترونیک است. در این بین، پیوندگاه‌های مولکول-الکتروده کربنی و پیوندگاه‌های شکست مهاجرت الکترونی از جمله رهیافت‌هایی هستند که بیشتر مورد توجه قرار گرفته‌اند (به دلیل معماری ذاتی سه-ترمینالی آنها)^[۵۱].



شکل (۱۶): طرحی از یک ترانزیستور تک‌مولکولی با معماری گیت‌زنی از پایین [۳۲]

در یک ترانزیستور، نحوه طراحی و قرارگیری الکتروده گیت بسیار مهم بوده و کاملاً به این بستگی دارد که به‌دنبال چه استفاده‌ای از افزاره باشیم. بنابراین، سه حالت مختلف برای گیت‌زنی ارائه شده است: گیت‌زنی از پایین^۳ (برای بررسی پدیده‌های فیزیکی جدید)، گیت‌زنی از کنار^۴ (برای کنترل تابلرد الکترون)، و گیت‌زنی الکتروشیمیایی (برای جفت‌شدگی مؤثر گیت).

اعمال ولتاژهای متفاوتی در دو قطب رو به‌رو حاصل می‌شوند. این مدل به پیشرفت دیوده‌های مولکولی منجر شد. چرا که برای ایجاد سدهای تونل‌زنی، استفاده از مولکول‌هایی با دنباله‌هایی با طول متفاوت ساده‌تر و در دسترس‌تر از به‌کارگیری ساختارهای پیچیده برای دیوده‌های آویرام-راتنر است. مدل DP مورد دیگر است که در آن از جفت‌شدگی غیریکسان مولکول با دو الکتروده استفاده می‌شود. مولکول‌هایی با تقارن فضایی را به‌صورت متفاوت به دو الکتروده متصل می‌کنند و کل ساختار نامتقارن می‌شود. این ساختار به نرخ‌های تونل‌زنی متفاوت بین اوربیتال و دو الکتروده منجر خواهد شد که به‌طور ضمنی بیان می‌کند که میانگین اشغال شدن اوربیتال با الکترون‌ها به جهت بایس اعمالی در شرایط رزونانس تونل‌زنی بستگی دارد؛ یعنی همان مفهوم یکسوکنندگی.



شکل (۱۵): یک دیوده مولکولی با چند ساختار مختلف گروه‌های لنگری [۵۰]

۷-۳- ترانزیستور مولکولی

ترانزیستور، پرکاربردترین و مهم‌ترین افزاره الکترونیک است که عنصر کلیدی تشکیل‌دهندهٔ مدارات منطقی پیچیده، پردازنده‌ها و حافظه‌ها است. به دلیل حیاتی بودن ترانزیستور در صنعت مدارات مجتمع، در حوزه الکترونیک مولکولی نیز ترانزیستورهای مولکولی مورد توجه قرار گرفته‌اند. ترانزیستور برخلاف دیوده، نیاز به حداقل سه اتصال دارد که ساخت و به‌ویژه گیت‌زنی به آن، چالش‌های فناورانه زیادی را به همراه دارد.

ترانزیستور یک افزاره سه ترمیناله است که مهم‌ترین جزء مدارهای الکترونیک است و انتقال جریان بین دو الکتروده

¹ Source and drain

² Because of their intrinsic 3-terminal device architectures

³ Back gating

⁴ Side gating

۷-۴- کلیدزنی ادوات حافظه‌ای

در مدارات منطقی مدرن، علاوه بر این که وجود واحدهای پردازشی ضرورت دارد، برای ذخیره‌سازی اطلاعات پردازش شده یا داده‌های خام، به واحدهای حافظه‌ای نیز نیاز دارند. بنابراین، در کنار ادوات الکترونیکی مولکولی مرسوم که هدف آنها عمدتاً طراحی مدارات منطقی مورد استفاده در پردازشگرهاست، لزوم ساخت حافظه‌های مولکولی نیز به شدت حس می‌شود. در حوزه الکترونیک مولکولی، برای طراحی ادوات حافظه‌ای معمولاً از مولکول‌هایی با دو ایزومر^۱ پایدار استفاده می‌شود که توانایی گذار بین ایزومرها را داشته باشند. مشخصه کلیدزنی بین دو یا چند حالت متمایز و پایدار، در دو دسته اصلی تقسیم‌بندی می‌شود [۵۲]: (۱) کلیدزنی «غیر گزینشی»^۲ القاء شده و (۲) کلیدزنی «گزینشی»^۳ تک مولکولی. در نوع اول، کلیدزنی معمولاً با گزینش تک مولکول همراه نبوده و اغلب در این حالت، سامانه قبل و بعد از اعمال محرک خارجی با استفاده از تکنیک‌های مشخصه‌یابی مقیاس اتمی بررسی می‌گردد تا نحوه رفتار سامانه به‌طور دقیق تری مشخص شود. در کلیدزنی نوع دوم، از روش‌های میکروسکوپی استفاده می‌شود که می‌توانند با دقت و قدرت زیاد، دستکاری سامانه مقیاس اتمی موردنظر (در اینجا یک مولکول) را فراهم آورند و ویژگی خاصی از مولکول را تغییر دهند. بیشتر فرآیندهای کلیدزنی به‌وسیله میکروسکوپی تونل‌زنی روبشی در دمای پایین^۴ مطالعه می‌شوند (به دلیل توانایی تصویربرداری در مقیاس اتمی). بنابراین، می‌توان نقشه‌برداری موضعی و پیکربندی الکترونیکی را قبل و بعد از کلیدزنی بررسی کرد.

۷-۵- حسگر مولکولی

عموماً، منظور از یک حسگر، سامانه‌ای است (انتقال‌دهنده) که قادر به شناسایی و آشکارسازی حضور ماده یا وقوع اتفاق خاصی باشد (با ایجاد سیگنال مشخص و واضحی). براساس این تعریف، در حسگرهای الکترونیکی شناسایی اهداف مدنظر از طریق جریان الکترونیکی صورت می‌گیرد. در واقع، با بهره بردن از مزایای رابطه بین رسانش مراکز آشکارسازی و برهمکنش آن‌ها با اهداف خارجی، انواع مختلفی از حسگرهای الکترونیکی ساخته شده‌اند. در قیاس با حسگرهای متعارف که براساس روش‌های شیمیایی، فیزیکی یا اپتیکی کار می‌کنند (طیف‌سنجی‌های رامان / فلوروسانس، یا واکنش‌های زنجیر پلیمران)، حسگرهای الکترونیکی کمتر استفاده می‌شوند اما مزیت‌های منحصر به فرد خود را دارند.

برخی از این ویژگی‌ها عبارتند از سادگی، هزینه پایین، قابلیت حمل، حساسیت بسیار بالا، گزینش‌پذیری عالی، آشکارسازی سریع و بدون نیاز به برچسب‌گذاری و توانایی آن برای شناسایی غیر تخریبی در محیط مدنظر. حال اگر در حسگر مدنظر، از مولکول‌ها (به‌طور خاص تک‌مولکول‌ها) به‌عنوان جزء اصلی برای شناسایی پدیده مدنظر استفاده نمود، افزوده‌ی مهمی از الکترونیک مولکولی موسوم به حسگر مولکولی خواهیم داشت.

در حسگرهای الکترونیکی متعارف که مبتنی بر نانو مواد هستند، فرآیند آشکارسازی براساس خواص میانگین تعداد زیادی مولکول انجام می‌پذیرد. اما، در یک حسگر مولکولی، می‌توان ویژگی‌های پیچیده اهداف را (که می‌خواهیم آن‌ها را شناسایی کنیم) در سطح تک‌مولکول بررسی کرد. یعنی، تراپرد اطلاعات را در مقیاس مولکولی (تک مولکولی) تجزیه و تحلیل نموده و به کار گرفت. در میان انواع حسگرهای تک مولکولی سه نوع بیش از همه مورد مطالعه قرار گرفته‌اند و پرکاربرد هستند. حسگرهای مولکولی مبتنی بر واکنش‌های شیمیایی، برهمکنش‌های زیستی و ترموالکتریسیته. در سال ۲۰۰۴ میلادی، تاو^۵ و همکارانش نشان دادند که اتصال گونه میهمان به تک مولکول میزبان را می‌توان به‌صورت الکترونیکی و با سیم‌کشی بین مولکول میزبان و دو الکتروود مطالعه کرد [۵۳]. آنها از پیتایدها^۶ (به‌عنوان مولکول میزبان) برای شناسایی گزینشی یون‌های فلزات واسطه (مانند Cu^{2+} و Ni^{2+}) استفاده کردند. به‌واسطه پیوندهای پیتاید دی پروتونه شده^۷، اتصال ویژه پیتایدها به یون‌های فلزی باعث می‌شود که پیکربندی مولکولی تغییر یافته و مسیر تراپرد نیز تغییر کند. بنابراین، تفاوت در رسانش‌های مولکولی قبل و بعد از اتصال (که خود نتیجه آشکارسازی یون‌های فلزی است) را می‌توان ملاک انجام واکنش شیمیایی دانست.

۷-۶- گیت‌های منطقی مولکولی شیمیایی

برخلاف پیشینه نسبتاً طولانی افزاره‌های مولکولی، وجود مشکلاتی همچون عملیات بازیابی^۸ اطلاعات، پایداری طولانی مدت و نحوه اتصال‌دهی در سامانه، باعث شده تا ساخت رایانه مولکولی واقعی سخت به نظر آید. با این حال، کاربردهای دیگری از چنین سامانه‌های منطقی‌ای وجود دارند، به‌نحوی که با دریافت (و پردازش منطقی) سیگنال‌های چندگانه‌ی ورودی، نتایج منطقی‌ای را در قالب گیت‌های منطقی تعریف شده برای سامانه ارائه می‌دهند. بهبود تشخیص پزشکی (برای این قابلیت اصطلاح

⁵ Tao

⁶ Peptides

⁷ Deprotonated

⁸ Recycled operation

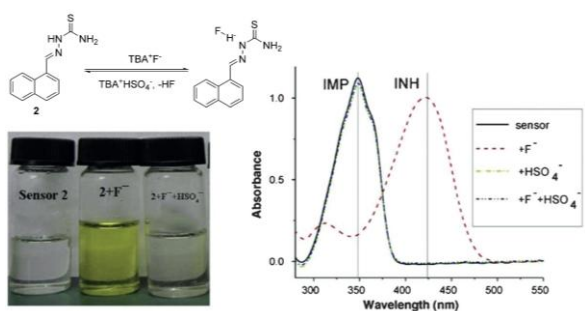
¹ Isomer

² Non-selective switching

³ Selective switching

⁴ Low-temperature scanning tunneling microscopy (LT-STM)

در سال ۲۰۱۱، یک حسگر شیمیایی تیوسمیکاربازید^۴ برای آشکارسازی یون های F⁻ سنتز شد [۵۷]. در این گزارش، مشاهده شد که محلولی از این حسگر در DMSO^۵ حسگر گزینشی بسیار خوبی برای شناسایی یون های F⁻ در طیفسنجی های جذب و نشر است. با افزودن یون های مدنظر به محلول ذکر شده، تغییری بسیار واضح از بی رنگ به زرد، در رنگ آن دیده می شود. جالب اینجاست که این فرآیند کاملاً برگشت پذیر بوده و کافی است که مقداری یون HSO₄⁻ به آن افزوده شود شکل (۱۸). این چرخه برگشت پذیر را می توان چندین بار تکرار کرد. این نتیجه نشان می دهد که حضور آنیون های HSO₄⁻ مانع از برهمکنش آنیون های فلئور با حسگر شیمیایی سنتز شده می شود، چرا که HSO₄⁻ خاصیت اسیدی بیشتری نسبت به حسگر دارد. این فرآیند کلیدزنی برگشت پذیر وابسته به رنگ را می توان به صورت یک گیت منطقی مولکولی نمایش داد، به طوری که HSO₄⁻ و F⁻ سیگنال های ورودی بوده و جذب در ۳۴۸ nm و ۴۲۱ nm سیگنال های خروجی خواهند بود (یعنی خروجی ایتیکی است). این سیگنال های خروجی گیت های منطقی INH و IMPLICATION را نشان می دهند شکل (۱۹) و جدول (۴).

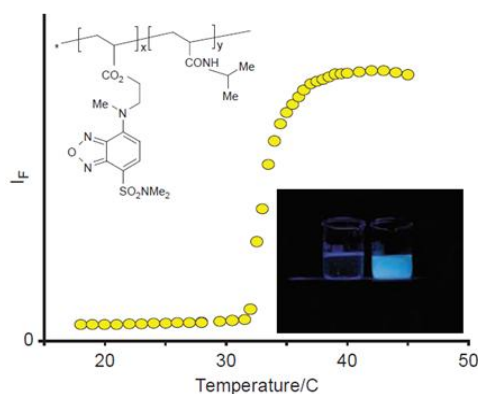


شکل (۱۸): ساختار مولکول سنتز شده و مکانیسم وابستگی یون F⁻ برای ساخت حسگر یونی با قابلیت برگشت پذیری. تغییر طیف جذب و تغییر رنگ محلول DMSO حاوی مولکول سنتز شده در اثر افزودن یون های F⁻ و HSO₄⁻ آمده اند [۳۲]

این مثال، نشان می دهد که می توان یک مدار منطقی ترتیبی را به گونه ای با استفاده از این گیت منطقی طراحی کرد، که فرآیند کلیدزنی مبتنی بر تغییر رنگ، به صورت باز تولید پذیر (تکرار پذیر) روی دهد. این بدان معناست که، سامانه معرفی شده ویژگی های یک ماشین حافظه (با رفتار «نوشتن - خواندن - پاک کردن - خواندن») برای پردازش اطلاعات در سطح مولکولی را داراست. این مشخصه با استفاده از ورودی های «set» (افزودن F⁻)

آزمایشگاهی بر روی تراشه^۱ ارائه شده است و استفاده از گیت های منطقی AND یا INHIBIT برای تشخیص عفونت فرد آلوده (مثلاً در بیماری های واگیر یا بیوتورویسم) از جمله کاربردهای این گونه سامانه هاست [۵۴]. همچنین، حسگرهای مولکولی که کوچک تر، سریع تر و حساس تر هستند، را می توان به منظور آشکارسازی مواد مخدر، مواد منفجره (حتی بیرون از کیف حاوی مواد) و عوامل شیمیایی در فرودگاه ها، و اماکن عمومی یا حساس امنیتی به کار برد. در ادامه، در قالب مثال هایی، به برخی از قابلیت های گیت های منطقی مولکولی شیمیایی با جنبه های علمی واضح تر اشاره می شود.

دماسنج های مولکولی فلئورسانس را می توان با ترکیب مونومرها و پلیمرها به نحوی تهیه کرد که مشخصه گذار فاز وابسته به دما را از خود نشان دهند [۵۵]. دماسنج ها حاصل از ترکیب پلیمرهای آکریلامید^۲ و مقدار بسیار کمی (کمتر از یک درصد) از یک مولکول فلئورفور (حاوی بنزوفورازان^۳) می باشند. در محیط پیرامون زنجیره های اصلی کopolymer کاهش می یابد. در این حالت، افزایش دما (بیش از یک ناحیه آستانه دمایی) منجر می شود که این پلیمرها افزایش واضحی در نشر فلئورسانس خود نشان دهند و حسگرهای دمایی حساسی به حساب آیند شکل (۱۷). کوچک بودن ناحیه آستانه دمایی و افزایش سریع دما باعث می شود که بتوان این مولکول را به عنوان یک عمل منطقی YES در نظر گرفت. نکته جالب تر آن است که می توان با افزودن دو نوع از واحد آکریلامید، علاوه بر حفظ حساسیت و باز تولید پذیری بالا، ناحیه دمایی افزایش نشر فلئورسانس را تنظیم پذیر کرد [۵۶].



شکل (۱۷): تغییر شدت فلئورسانس مولکول در آب، بر حسب افزایش دما. طول موج برانگیختگی ۴۴۴ nm و طول موج نشر ۵۳۳ nm [۵۵]

^۴ Thiosemicarbazide

^۵ Dimethylsulfoxide

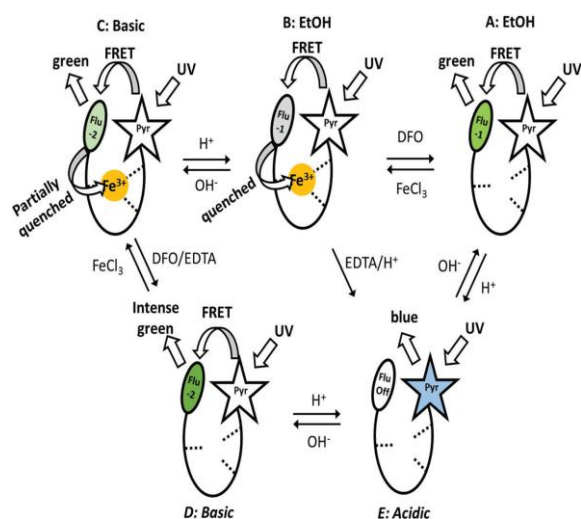
^۶ Writing-reading-erasing-reading

^۱ Lab on a chip

^۲ Acrylamide polymers

^۳ Benzofurazan

متعارف را به یک گیت منطقی دو ورودی اولویت دار AND^۳ تبدیل کرد (با استفاده از افزودن ترتیبی EDTA و یک باز). این شیوه (افزودن EDTA و سپس باز) یک گذرواژه ایجاد می کند که برای رمزگشایی قفل صفحه کلید مولکولی الزامی است. حتی می توان به منظور بهبود سطح امنیت قفل مولکولی، از یک گذر واژه سه حرفی استفاده کرد. بدین منظور، یک ورودی دیگر (که نور فرابنفش است) به عمل های منطقی اضافه می شود. در این حالت، خروجی (که مجدداً سیگنال فلئورسانسی در ۵۲۵ nm خواهد بود) را تنها در صورتی می توان ثبت کرد که ترتیب EDTA، باز و تابش فرابنفش رعایت شود. این گزارش اولین کاری بوده است که در زمینه طراحی یک قفل صفحه کلید در مقیاس مولکولی به چاپ رسیده است.



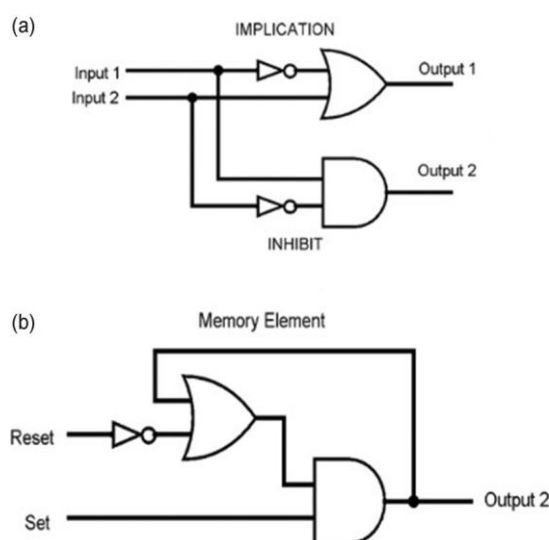
شکل (۲۰): پنج خروجی فلئورسانس مختلف برای قفل صفحه کلید مولکولی در حضور ورودی های مختلف [۵۸]

توانایی زیست حسگری کلیده های مولکولی را می توان برای طراحی و کنترل منطقی سامانه های مبتنی بر حضور محرک خارجی برای رهاسازی دارو استفاده کرد. در پژوهش دیگری، سه لیگاند کربن مونواکسید الکترون گیرنده با Mn(I) کوئوردینه می شود که به کاهش شدید نشر فلئورسانس دنسیل^۴ منجر می گردد [۵۹]. با تابش نور یا اکسید شدن توسط هیدروژن پراکسید، مولکول های مونواکسید کربن آزاد می شوند که نشر سبز رنگ دنسیل در ۵۱۴ nm را بازیابی می کند. آزاد شدن مونواکسید کربن را می توان با تغییر طیف جذب مشاهده نمود. در این گزارش، رفتار منطقی این سامانه در کولونی هایی از سلول سرطانی HCT116 اثبات شد. به طور خلاصه، مولکول رفتاری مشابه دو گیت منطقی OR را از خود نشان می دهد که دارای دو

«reset» (افزودن HSO_4^-) مطالعه شد. نحوه عملکرد این ماشین حافظه ای در شکل (۱۹) و جدول (۴) آمده است.

جدول (۴): جدول درستی متناظر با گیت های منطقی IMP, INH و مدار منطقی یک ماشین حافظه ای [۸]

Input 1 (F ⁻)	Input 2 (HSO ₄ ⁻)	Output 1 (348 nm) IMP	Output 2 (421 nm) INH	Set (F ⁻)	Reset (HSO ₄ ⁻)	Output 2 (421 nm)
0	0	1	0	0	0	0
1	0	0	1	1	0	1
0	1	1	0	0	1	0
1	1	1	0	1	1	0



شکل (۱۹): مدار منطقی مربوط به گیت های IMP, INH و یک ماشین حافظه ای [۸]

شکل (۲۰) پنج خروجی فلئورسانس احتمالی (A تا E) را در حضور ورودی های مختلف از قبیل اسید، باز، آهن (III) و EDTA نشان می دهد [۵۸]. در این گزارش، یک گیت AND ساخته شد که به صورت گذار از کمپلکس آهن در اتانول (حالت B) به حالت D با نشر نور سبز مشاهده می شود. این گذار را می توان از دو مسیر به انجام رساند: (۱) در ابتدا افزودن باز و سپس افزودن EDTA برای حذف آهن، و (۲) افزودن EDTA و سپس افزودن یک باز. هر دو مسیر به یک خروجی منجر می شوند که عبارت است از نشر سبز رنگ شدیدی در ۵۲۵ nm. با این حال، اتصال^۱ آهن با EDTA در محیط بازی نسبت به افزودن مستقیم EDTA به سایدرفور^۲ (حمل کننده آهن) پیش از افزودن یک باز به محلول، مدت زمان بیشتری طول می کشد. بنابراین، این امکان وجود دارد که یک گیت AND دو ورودی

^۳ 2-input-priority-AND

^۴ Dansyl

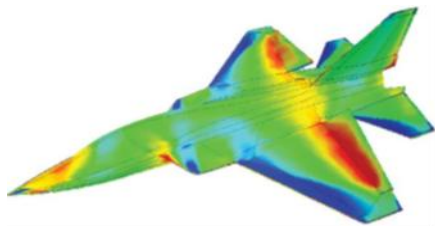
^۱ Chelation

^۲ Siderophore

نقطه‌های سیاه در شکل بالا حاوی قسمت‌هایی از الیاف پلیمری هستند که دارای حسگرهای مولکولی مناسب می‌باشند. Na^+ ، K^+ ، Ca^{2+} ، pH و CO_2 توسط پاسخ فلئورسانس این نقاط اندازه گیری می‌شوند. نقطه کم‌رنگ‌تر مشابه نقاط سیاه است، اما نسبت به اکسیژن (O_2) حساس است [۶۱].

رصد^۳ زباله (تفاله) هسته‌ای: صنایع هسته‌ای، برای انرژی و تسلیحات، در حال رشد هستند و مانیتورینگ تفاله‌های هسته ای از این نظر بسیار مهم است که این اجزاء هسته‌ای دارای تبعات بسیار خطرناکی برای محیط‌زیست هستند. بنابراین، تعداد قابل توجهی از تحقیقات در این زمینه، بر روی آشکارسازی ایزوتوپ‌های رادیواکتیو از قبیل Cs^{137} متمرکز شده‌اند. در یکی از موارد، مشتقی از کالیکسارین استفاده شده است که بر اثر تشکیل پیوند با این ایزوتوپ افزایش فلئورسانس شدیدی را در قالب یک گیت YES نشان می‌دهد [۶۲].

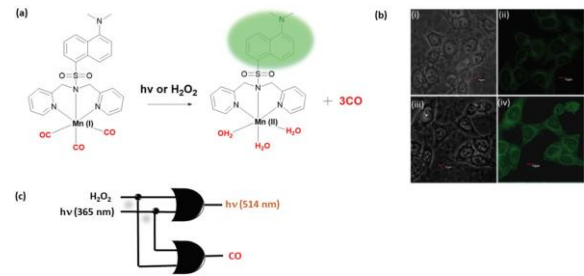
مانیتورینگ فشار هوا بر روی یک جسم پرنده (هواپیما): موادی که به فشار نسبی اکسیژن پاسخ می‌دهند را می‌توان به‌عنوان یک آشکارساز فشار در نظر گرفت، به شرطی که اکسیژن سهم بالایی در فشار کل داشته باشد. این امر را می‌توان برای تصویربرداری توزیع فشار یک شیء (مانند هواپیما در تونل باد) استفاده نمود [۶۳]. در این حالت، ماده انتخاب شده (رنگ های آلی حساس به فشار)، بر روی سطح جسم مورد آزمایش اسپری می‌شوند. بسته به فشار واقعی موضعی اکسیژن، شدت لومینسانس (نشر نور) رنگ تغییر خواهد کرد که با آنالیز آن می‌توان نتایج مناسبی از میزان فشار هوا در بخش‌های مختلف شیء مدنظر به‌دست آورد شکل (۲۳).



شکل (۲۳): تصویر فلئورسانس مدلی از یک هواپیما که با رنگ وابسته به فشاری پوشانده شده است (قرمز؛ فشار بالا و آبی؛ فشار پایین) [۶۳]

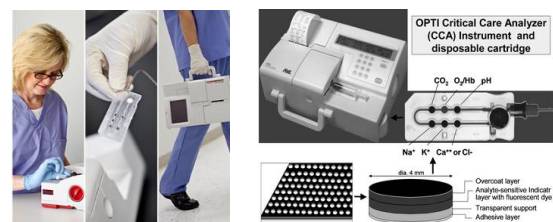
شناسایی عوامل شیمیایی در جنگ‌ها: برخلاف وجود توافقات بین‌المللی برای عدم استفاده از تسلیحات شیمیایی، همواره خطر استفاده از آن‌ها در میدان نبرد یا حتی در مناطق غیرنظامی حس می‌شود؛ و قطعاً اولین راه برای مقابله با آن، شناسایی عامل شیمیایی مدنظر است. در این حالت، می‌توان با

سیگنال خروجی فلئورسانس و مونواکسید کربن است. از آنجایی که نقش سلولی مونواکسید کربن (به‌عنوان مثال در فعالیت‌های ضد التهابی^۱) بسیار حائز اهمیت است، آزادسازی کنترل شده این مولکول گازی، با استفاده از یک عملیات منطقی می‌تواند به تنظیم دقیق تر فرآیندهای بیو شیمیایی منجر گردد.



شکل (۲۱): دو گیت منطقی OR که در حضور هم زمان نور و هیدروژن پراکساید به رهاسازی مونواکسید کربن منجر می‌شود. (a) ساختار شیمیایی کمپلکس تهیه شده. (b) تصاویر میکروسکوپ هم کانون از سلول‌های سرطانی مورد مطالعه (تصاویر میدان درخشان، بدون تابش نور و تحت تابش نور ۴۰۵ nm). (c) دیاگرام گیت منطقی مربوط [۵۹]

اندازه‌گیری الکتروولیت خون: مقدار الکتروولیت‌های خون از قبیل Na^+ ، K^+ ، Ca^{2+} و H^+ را می‌توان در مدت زمان ۳۰ ثانیه با استفاده از یک دستگاه تجاری اندازه‌گیری کرد شکل (۲۲). این کار با استفاده از مجموعه‌ای شامل مولکول‌های مختلف که نقش حسگرها را بازی می‌کنند و براساس گیت‌های منطقی YES با نشر نور مبتنی بر PET صورت می‌گیرد. در این افزاره، میزان شدت نشر نور فلئورسانس در حضور هر یک از کاتیون‌های فوق به مقدار موجود از آن ماده تبدیل و گزارش می‌شود. همان‌طور که قبلاً اشاره شد، این محصول تجاری محاسبات مولکولی اولین بار توسط پروفیسور دسیلوا و همکارانش طراحی شد، و تا سال ۲۰۱۸ در سراسر جهان در حدود ۵۴۰ میلیون دلار فروش داشته است.



شکل (۲۲): تصویری از افزاره ساخته شده برای اندازه‌گیری سریع آنالیت‌های موجود در خون. کاست‌های OPTI LIONTM تصویر سمت راست بالا و OPTI RTM تصویر سمت راست پایین [۶۰]

³ Monitoring

¹ Anti-inflammation

² Photoinduced electron transfer

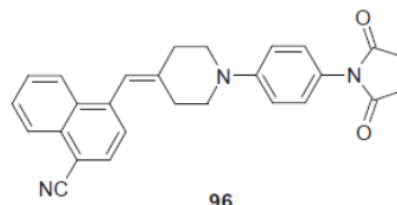
۸- چالش‌ها

اندازه بسیار کوچک مولکول‌ها می‌تواند باعث بالا بردن ظرفیت و سرعت پردازش‌ها (کارایی) شود (جدای از اینکه مشکل کوچک‌سازی ادوات سیلیکونی را نیز حل می‌کند). با این حال همین ابعاد بسیار کوچک می‌تواند پیچیدگی‌های افزاره را دو چندان کند. یکی از اولین موضوعاتی که در طراحی افزاره‌های مولکولی مطرح می‌شود، موضوع «اتصال» است. سادگی اتصالات در دستگاه‌های نیم‌رسانای بزرگ‌تر، یکی از مزیت‌های آن‌هاست، به طوری که خروجی یک دستگاه برای کنترل دستگاه دیگر استفاده می‌شود. با این حال، انتقال خروجی از یک گیت منطقی مولکولی برای به‌کارگیری به‌عنوان ورودی گیت دیگر، کار آسانی نیست. چرا که ذات (ویژگی‌های) ورودی‌ها و خروجی‌ها از بسیاری جهات باهم متفاوت‌اند. شیمی‌دان‌ها این چالش را با استفاده از تک‌مولکولی حاوی گروه‌های عاملی مختلف حل کرده‌اند (بدون نیاز به استفاده از یک مولکول به ازای هر گیت منطقی [۶۷]). در واقع، باید توجه داشت که محاسبات مولکولی نیازی به پیاده‌سازی طرح نیمه‌هادی ندارند. یکی از اهداف محققان می‌تواند این باشد که جایگزین‌های مولکولی‌ای برای نیم‌رساناهای به‌کار رفته در دستگاه‌های منطقی موجود بسازند. اما، باید توجه داشت که گیت منطقی مولکولی شاخه‌ای در حال رشد است و بایستی تفاوت‌های خود را در قیاس با الکترونیک کلاسیک (اعم از مزایا و معایب) در نظر گرفته و مسیرهای منحصر به خود را برای صنعتی (تجاری) شدن برگزیند. موضوع بسیار مهم دیگر در استفاده از ادوات منطقی مولکولی، «نشان‌یابی یا همان آدرس دهی»^۱ است. ادوات منطقی نیم‌رسانا سیم‌هایی دارند که از طریق آن‌ها سیگنال‌های الکتریکی ورودی فرستاده می‌شوند و برخی دیگر که سیگنال‌های الکتریکی خروجی از طریق آن‌ها ظاهر می‌شوند. اگرچه برخی از نمونه‌های مولکولی براین اساس کار می‌کنند، اما اغلب آن‌ها از شیوه‌های دیگر برای نشان‌یابی استفاده می‌کنند. موضوع دیگر به «پایداری» یک سامانه محاسباتی مولکولی مربوط می‌شود. طول عمر مواد نیم‌رسانای معدنی قابل قیاس با مولکول‌های آلی است. با این حال، براساس یافته‌های کنونی، دارا بودن پایداری بالا برای انجام امورات محاسباتی (مثلاً در محیط‌های بیولوژیکی یا شیمیایی) چندان ضروری نیست و از سوی دیگر، میزان پایداری سامانه را نیز می‌توان با تغییر برخی پارامترهای قابل کنترل، بهبود بخشید.

۹- نتیجه‌گیری

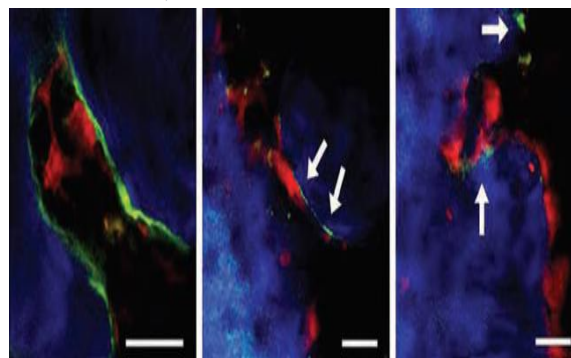
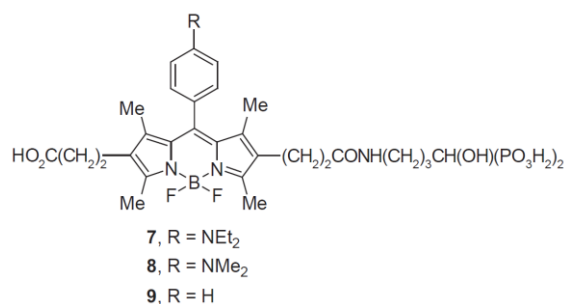
با کوچک‌تر شدن افزاره‌های محاسبات الکترونیک، لزوم ارائه

تشکیل پیوندهای شیمیایی و رصد تغییرات فلئورسانس مولکول مدنظر، سیگنال‌های منطقی خروجی مورد نظر را به شکل گیت‌های YES دریافت کرد [۶۴،۶۵]. مانند حسگر مولکولی زیر برای شناسایی گازهای اعصاب.



شکل (۲۴): مولکولی که به‌عنوان حسگر برای شناسایی گاز اعصاب به کار می‌رود [۶۴]

ردیابی گونه‌ها و یون‌ها در سلول: ردیابی و شناسایی یون‌هایی مانند Zn^{2+} ، Na^+ ، Ca^{2+} ، Mg^{2+} و H^+ در سلول‌های زنده از جمله مواردی هستند که با استفاده از مولکول‌های به‌خصوص و در قالب گیت‌های منطقی YES یا NOT انجام می‌پذیرند. مثلاً، می‌توان از مولکول‌های شکل زیر برای مانیتورینگ سلولی pH در جداره استخوانی موش‌ها استفاده کرد (چرا که این نواحی نسبتاً اسیدی هستند) [۶۶].



شکل (۲۵): مولکول‌های مورد استفاده برای تصویربرداری فلئورسانس و تصاویر فلئورسانس برانگیختگی دو فوتونه از دیواره استخوانی موش‌ها. سیگنال‌های سبز به خاطر مولکول‌های ۹ (سمت چپ)، ۷ (وسط) و ۸ (سمت راست) هستند. مقیاس مشخص شده ۴۰m است [۶۶]

¹ Addressing

- signalling,” *Nature*, vol. 364, no. 6432, p. 42, 1993.
- [7] J. M. Tour, “Molecular electronics. Synthesis and testing of components,” *Acc. Chem. Res.*, vol. 33, no. 11, pp. 791–804, 2000.
- [8] M. Prasad, M. P. Bhat, H. Jung, D. Lolic, and M. D. Kurkuri, “Anion sensors as logic gates: a close encounter?,” *Chem. Eur. J.*, vol. 22, no. 18, pp. 6148–6178, 2016.
- [9] E. Lörtscher, “Wiring molecules into circuits,” *Nat. Nanotechnol.*, vol. 8, no. 6, pp. 381–384, 2013.
- [10] P. A. Packan, “Pushing the limits,” *Science*, vol. 285, no. 5436, pp. 2079–2081, 1999.
- [11] M. P. Frank and T. F. Knight Jr, “Ultimate theoretical models of nanocomputers,” *Nanotechnology*, vol. 9, no. 3, pp. 162–176, 1998.
- [12] S. Lloyd, “Ultimate physical limits to computation,” *Nature*, vol. 406, no. 6799, pp. 1047–1054, 2000.
- [13] J. D. Meindl, Q. Chen, and J. A. Davis, “Limits on silicon nanoelectronics for terascale integration,” *Science*, vol. 293, no. 5537, pp. 2044–2049, 2001.
- [14] R. O. Carlson, “Electrical properties of near-degenerate boron-doped silicon,” *Phys. Rev.*, vol. 100, no. 4, pp. 1075–1078, 1955.
- [15] D. J. Frank, “Power-constrained CMOS scaling limits,” *IBM J. Res. Dev.*, vol. 46, no. 2.3, pp. 235–244, 2002.
- [16] M. Ratner, “A brief history of molecular electronics,” *Nat. Nanotechnol.*, vol. 8, no. 6, pp. 378–381, 2013.
- [17] B. Mann and H. Kuhn, “Tunneling through fatty acid salt monolayers,” *J. Appl. Phys.*, vol. 42, no. 11, pp. 4398–4405, 1971.
- [18] A. Aviram, M. A. Ratner, “Molecular rectifiers,” *Chem. Phys. Lett.*, vol. 29, no. 2, pp. 277–283, 1974.
- [19] G. Binnig, H. Rohrer, “Gerber Ch., Weibel E,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, no. 1, pp. 57–68, 1982.
- [20] V. Mujica, M. Kemp, and M. A. Ratner, “Electron conduction in molecular wires. I. A scattering formalism,” *J. Chem. Phys.*, vol. 101, no. 8, pp. 6849–6855, 1994.
- [21] C. J. Lambert, “Basic concepts of quantum interference and electron transport in single-molecule electronics,” *Chem. Soc. Rev.*, vol. 44, no. 4, pp. 875–888, 2015.
- [22] I. Duchemin and C. Joachim, “A quantum digital half adder inside a single molecule,” *Chem. Phys. Lett.*, vol. 406, no. 1–3, pp. 167–172, 2005.
- [23] “Intel,” Intel confirms 10nm delayed to 2017, 2015. [Online]. Available: <http://www.extremetech.com/computing/210050-intel->
- [24] “Methods and Applications in Fluorescence,” 2013. [Online]. Available: <https://iopscience.iop.org/journal/2050-6120/page/BM21>.
- [25] “Christian Joachim,” 2018. [Online]. Available: https://www.nims.go.jp/mana/member/principal_investigator/christian_joachim.html.
- [26] D. Porath, A. Bezryadin, S. De Vries, and C. Dekker, “Direct measurement of electrical transport through DNA molecules,” *Nature*, vol. 403, no. 6770, pp. 635–638, 2000.

رویکردی قابل اجرا برای رفع مشکل کوچک‌سازی بیشتر نمایان شده است. از این‌رو، استفاده از سامانه‌های مبتنی بر مولکول‌های منطقی، می‌تواند به دلیل دارا بودن ویژگی‌های ذاتی نهفته در مولکول‌ها (همچون ابعاد بسیار کوچک، پایداری مناسب، کاهش هزینه‌ها و افزایش بازدهی، تنوع ساختاری و گروه‌های عاملی مختلف ...) جایگزین مناسبی باشد. با این حال، بارزترین ویژگی در قابلیت آنها برای ساخت مدارهای مجتمع بسیار مترامکتر از کلیدها، دیودها و ترانزیستورهاست. این گونه سامانه‌ها می‌توانند با بهره‌گیری از مزایای مکانیک کوانتومی به انجام محاسبات پرداخته و اصطلاحاً محاسبات مولکولی را در سامانه‌های الکترونیکی و در قالب عملگرهای منطقی به اجرا درآورند. محاسبات مولکولی، شاخه‌ای از محاسبات سخت افزاری است که به‌جای استفاده از فناوری‌های محاسبه‌گرهای مبتنی بر سیلیکون از DNA، مولکول‌های زیستی و شیمیایی استفاده می‌کند. جنبه‌های مختلف نظری، تجربی و کاربردی از این حوزه در حال بررسی است. علاوه‌بر این، داده‌ورزی زیستی بر روی توسعه الگوریتم‌ها و نرم‌افزارهای جدید متمرکز شده است به نحوی که بتواند ساختار یا عملکرد یک افزاره منطقی مولکولی را پیش‌بینی و محاسبه نماید. با توجه به بررسی پتنت‌های به چاپ رسیده در این حوزه، مشخص شد که برخلاف مزایای بی‌شمار (که در بخش کارکردهای مولکولی به آن‌ها اشاره شد)، هنوز در کشور ما توجه لازم به آن صورت نپذیرفته است. در این مقاله، تلاش شده است تا، با بیان ویژگی‌های منحصر به فرد محاسبات در مقیاس مولکولی و ارائه برخی از قابلیت‌های کاربردی آن در صنعت تجهیزات الکترونیک و حسگرهای شیمیایی زمینه‌آشنایی هرچه بیشتر محققان دانشگاهی و صنعتی فراهم آید.

۱۰- مراجع

- [1] “The brain – Our most energy-consuming organ,” 2013. [Online]. Available: <https://www.universityworldnews.com/post.php?story=20130509171737492>.
- [2] H. Bateni and P. Saeidi, “The Effect of Information Quality Integrity on Information Security Risk Management,” *J. Innovations Appl. Inf. Commun. Technol.*, vol. 1, no. 1, pp. 23–35, 2019. (In Persian)
- [3] A. Credi, “Molecules that make decisions,” *Angew. Chemie - Int. Ed.*, vol. 46, no. 29, pp. 5472–5475, Jul. 2007.
- [4] S. Mann, “Life as a nanoscale phenomenon,” *Angew. Chemie Int. Ed.*, vol. 47, no. 29, pp. 5306–5320, 2008.
- [5] E. U. Akkaya, E. Katz, and U. Pischel, “Molecular Logic: From Single Logic Gates to Sophisticated Logic Circuits, from Fundamental Science to Practical Applications,” *ChemPhysChem*, vol. 18, pp. 1665–1666, 2017.
- [6] P. A. de Silva, N. H. Q. Gunaratne, and C. P. McCoy, “A molecular photoionic AND gate based on fluorescent

- [44] G. Yang and et. al., "Quantum interference effect in the charge transport through single-molecule benzene dithiol junction at room temperature: An experimental investigation," *Chinese Chem. Lett.*, vol. 29, no. 1, pp. 147–150, 2018.
- [45] Q. Shen, X. Guo, M. L. Steigerwald, and C. Nuckolls, "Integrating reaction chemistry into molecular electronic devices," *Chem. Asian J.*, vol. 5, no.5, pp. 1040–1057, 2010.
- [46] M. Kiguchi, "Single-Molecule Electronics," Springer, 2016.
- [47] R. L. McCreery, "Molecular electronic junctions," *Chem. Mater.*, vol. 16, no. 23, pp. 4477–4496, 2004.
- [48] P. E. Kornilovitch, A. M. Bratkovsky, and R. S. Williams, "Current rectification by molecules with asymmetric tunneling barriers," *Phys. Rev. B*, vol. 66, no. 16, p. 165436, 2002.
- [49] F. Zahid, A. W. Ghosh, M. Paulsson, E. Polizzi, and S. Datta, "Charging-induced asymmetry in molecular conductors," *Phys. Rev. B*, vol. 70, no. 24, p. 245317, 2004.
- [50] A. Batra and et al., "Tuning rectification in single-molecular diodes," *Nano Lett.*, vol. 13, no. 12, pp. 6233–6237, 2013.
- [51] M. L. Perrin, E. Burzuri, and H. S. J. van der Zant, "Single-molecule transistors," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 44, no. 4, pp. 902–919, 2015.
- [52] J. L. Zhang and et al., "Towards single molecule switches," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 44, no. 10, pp. 2998–3022, 2015.
- [53] X. Xiao, B. Xu, and N. Tao, "Changes in the Conductance of Single Peptide Molecules upon Metal-Ion Binding," *Angew. Chemie Int. Ed.*, vol. 43, no. 45, pp. 6148–6152, 2004.
- [54] A. P. De Silva, "Molecular logic-based computation," Royal Society of Chemistry, 2016.
- [55] S. Uchiyama, Y. Matsumura, A. P. de Silva, and K. Iwai, "Fluorescent molecular thermometers based on polymers showing temperature-induced phase transitions and labeled with polarity-responsive benzofurazans," *Anal. Chem.*, vol. 75, no. 21, pp. 5926–5935, 2003.
- [56] S. Uchiyama, Y. Matsumura, A. P. de Silva, and K. Iwai, "Modulation of the sensitive temperature range of fluorescent molecular thermometers based on thermoresponsive polymers," *Anal. Chem.*, vol. 76, no. 6, pp. 1793–1798, 2004.
- [57] W. Lu, M. Zhang, K. Liu, B. Fan, Z. Xia, and L. Jiang, "A fluoride-selective colorimetric and fluorescent chemosensor and its use for the design of molecular-scale logic devices," *Sensors Actuators B Chem.*, vol. 160, no. 1, pp. 1005–1010, 2011.
- [58] D. Margulies, C. E. Felder, G. Melman, and A. Shanzer, "A molecular keypad lock: a photochemical device capable of authorizing password entries," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 129, no. 2, pp. 347–354, 2007.
- [59] J. Axthelm and et al., "Co-Registered Molecular Logic Gate with a CO-Releasing Molecule Triggered by Light and Peroxide," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 139, no. 14, pp. 4991–4994, 2017.
- [60] "OPTI Medical Systems, Inc.," 2020. [Online]. Available: <https://www.optimedical.com/>.
- [61] A. P. de Silva, T. P. Vance, M. E. S. West, and G. D. Wright, "Bright molecules with sense, logic, numeracy and
- [27] A. P. De Silva and S. Uchiyama, "Molecular logic and computing," *Nat. Nanotechnol.*, vol. 2, no. 7, p. 399, 2007.
- [28] C. Jia and X. Guo, "Molecule-electrode interfaces in molecular electronic devices," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 42, no. 13, pp. 5642–5660, 2013.
- [29] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, and E. Weibel, "Surface studies by scanning tunneling microscopy," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, no. 1, pp. 57–61, 1982.
- [30] D. J. Wold and C. D. Frisbie, "Formation of metal-molecule-metal tunnel junctions: microcontacts to alkanethiol monolayers with a conducting AFM tip," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 122, no. 12, pp. 2970–2971, 2000.
- [31] M. A. Reed, C. Zhou, C. J. Muller, T. P. Burgin, and J. M. Tour, "Conductance of a molecular junction," *Science*, vol. 278, no. 5336, pp. 252–254, 1997.
- [32] J. Park and et al., "Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors," *Nature*, vol. 417, no. 6890, pp. 722–725, 2002.
- [33] J. Xiang and et al., "A Controllable Electrochemical Fabrication of Metallic Electrodes with a Nanometer/Angstrom Sized Gap Using an Electric Double Layer as Feedback," *Angew. Chemie Int. Ed.*, vol. 44, no. 8, pp. 1265–1268, 2005.
- [34] A. P. Bonifas, and R. L. McCreery, "Soft Au, Pt and Cu contacts for molecular junctions through surface-diffusion-mediated deposition," *Nat. Nanotechnol.*, vol. 5, no. 8, pp. 612–617, 2010.
- [35] J. Tang, Y. Wang, J. E. Klare, G. S. Tulevski, S. J. Wind, and C. Nuckolls, "Encoding Molecular Wire Formation within Nanoscale Sockets," *Angew. Chemie Int. Ed.*, vol. 46, no. 21, pp. 3892–3895, 2007.
- [36] C. Zhou, M. R. Deshpande, M. A. Reed, L. Jones, and J. M. Tour, "Nanoscale metal/self-assembled monolayer/metal heterostructures," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 71, no. 5, pp. 611–613, 1997.
- [37] X. Chen and et al., "On-wire lithography-generated molecule-based transport junctions: a new testbed for molecular electronics," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 130, no. 26, pp. 8166–8168, 2008.
- [38] H. B. Akkerman, P. W. M. Blom, D. M. De Leeuw, and B. De Boer, "Towards molecular electronics with large-area molecular junctions," *Nature*, vol. 441, no. 7089, pp. 69–72, 2006.
- [39] X. Guo and et al., "Covalently bridging gaps in single-walled carbon nanotubes with conducting molecules," *Science*, vol. 311, no. 5759, pp. 356–359, 2006.
- [40] Y. Cao and et al., "Building High Throughput Molecular Junctions Using Indented Graphene Point Contacts," *Angew. Chemie Int. Ed.*, vol. 51, no. 49, pp. 12228–12232, 2012.
- [41] G. J. Ashwell and et al., "Molecular bridging of silicon nanogaps," *ACS Nano*, vol. 4, no. 12, pp. 7401–7406, 2010.
- [42] Y. Okawa and et al., "Chemical wiring and soldering toward all-molecule electronic circuitry," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 133, no. 21, pp. 8227–8233, 2011.
- [43] J. Moreland and J. W. Ekin, "Electron tunneling into superconducting filaments using mechanically adjustable barriers," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 47, no. 2, pp. 175–177, 1985.

- chemical switches: an approach to detection of reactive organophosphate chemical warfare agent vapors," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 128, no. 15, pp. 5041–5048, 2006.
- [66] T. Kowada and et al., "In vivo fluorescence imaging of bone-resorbing osteoclasts," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 133, no. 44, pp. 17772–17776, 2011.
- [67] J. Andréasson and U. Pischel, "Smart molecules at work mimicking advanced logic operations," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 39, no. 1, pp. 174–188, 2010.
- utility," *Org. Biomol. Chem.*, vol. 6, no. 14, pp. 2468–2480, 2008.
- [62] H. F. Ji, G. M. Brown, and R. Dabestani, "Calix[4]arene-based Cs⁺ selective optical sensor," *Chem. Commun.*, no. 7, pp. 609–610, 1999.
- [63] O. S. Wolfbeis, "Materials for fluorescence-based optical chemical sensors," *J. Mater. Chem.*, vol. 15, no. 27–28, pp. 2657–2669, 2005.
- [64] T. J. Dale and J. Rebek, "Fluorescent sensors for organophosphorus nerve agent mimics," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 128, no. 14, pp. 4500–4501, 2006.
- [65] S. Bencic-Nagale, T. Sternfeld, and D. R. Walt, "Microbead