

Адсорбция органической макромолекулы на графене со щелью в электронном спектре

Давыдов С.Ю.¹, Посредник О.В.²

posrednik1009@gmail.com

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

² СПбГЭТУ "ЛЭТИ", Санкт-Петербург, Россия

Контакт органической макромолекулы (ММ) со свободным и эпитаксиальном графене со щелью в электронном спектре рассмотрен в рамках ранее предложенных модели оборванных связей, где $i = 1, 2, \dots$ [1] и модели НОМО-LUMO. В низкоэнергетическом приближении закон дисперсии для щелевого графена имеет вид $\epsilon_{\pm} = \epsilon_D \pm 2\Delta$, где ϵ_D - точка Дирака, 2Δ - ширина щели. Показано, что зонные вклады в числа заполнения графена в бесщелевом и щелевом графене практически одинаковы. Поэтому основное внимание было уделено локальным состояниям в щели ϵ_D , возникающим вследствие адсорбции ММ на свободном графене, для энергии которых ϵ_{\pm} и чисел заполнения n_{\pm} получены аналитические выражения.

В задаче об эпитаксиальном щелевом графене в качестве полупроводниковой подложки рассматривались политипы SiC, плотность состояний которых описывалась моделью Халдейна-Андерсона. Было продемонстрировано, что основной эффект полупроводниковой подложки состоит в сдвиге точки Дирака эпитграфена: ϵ_D . Для упрощения теории была использована модель НОМО-LUMO [2], в рамках которой из набора оборванных связей ϵ_{\pm} выбирают только высшую по энергии заполненную молекулярную орбиталь (НОМО) и низшую незаполненную орбиталь (LUMO). Показано, что локальные уровни ϵ_{\pm} в щелевом графене играют ту же роль, что и примесные уровни в полупроводнике.

Кратко обсуждается возможность использования щелевого графена в резистивных биосенсорах. Рассмотренная система SiC- SLG - ММ (биомолекула), выступающая в роли антитела, представляет собой модель биосенсора в исходном состоянии, когда тестируемая биомолекула (антиген) еще не приведена в контакт с антителом. Сигналом детектирования антитела служит вызванное антигеном изменение проводимости графена. Бесщелевой графен обладает металлической проводимостью, а щелевой графен характеризуется активационной (полупроводниковой) проводимостью. Лучший вариант работы сенсора - появление щели в графене под влиянием антигена.

Один из авторов работы (С.Ю.Д.) признателен поддержке РНФ (грант 22-12-00134).

Ссылки

[1] С.Ю. Давыдов. ФТТ, 2022, **64**, 2050.

[2] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев. ФТТ, 2023, **65**, 2048.