

MODELIZACIÓN AB-INITIO DE NANOSISTEMAS BASADOS EN GRAFENO Y HETEROESTRUCTURAS ESPINTRÓNICAS

Sindy Julieth Rodríguez Sotelo

sindy.rodriguez@santafe-conicet.gov.ar

Doctorado en Física

Director: Eduardo Aldo Albanesi

Lugar de realización: Instituto de Física del Litoral

Fecha de la defensa: 20 de marzo de 2019

RESUMEN

El grafeno es un alótropo bidimensional del carbono, con propiedades físicas y químicas excepcionales, es un material flexible, liviano, transparente, con alta movilidad de carga y gran área superficial, entre otras. Desde su obtención experimental en el 2004 por Andre Geim y Konstantin Novoselov, hasta la fecha, ha sido un material prometedor con múltiples aplicaciones en campos como la electrónica, bioingeniería, biomedicina y nanotecnología.

Particularmente, en la construcción de biosensores, el grafeno es un material que ofrece muchas ventajas, ya que, es sensible, selectivo, de bajo ruido electrónico intrínseco y además, biocompatible. Trabajos experimentales y teóricos dan cuenta de la facilidad del grafeno para adsorber bacterias, células e incluso moléculas, hecho que permite estudiar qué propiedades específicas modifica el material luego de la absorción, información útil para la eventual funcionalización y caracterización de un biosensor basado en grafeno. Trabajos en esta dirección, con nucleobases de ADN han sido explorados por diversos investigadores.

Dependiendo del tipo de interacción generada entre el grafeno y las moléculas de interés biológico, los mecanismos o modos de sensado pueden ser: ópticos, magnéticos, mecánicos y electrónicos. De acuerdo a la literatura, en los últimos años ha ganado gran interés el desarrollo de transistores de efecto de campo basados en grafeno (GFETs), que son dispositivos electrónicos con tres contactos metálicos (fuente "source", drenaje "drain d" y compuerta "gate") y un canal de grafeno. Al aplicar voltajes de polarización tanto en el drenaje como en la compuerta, es posible medir la respuesta del dispositivo, obteniendo la conductancia y las curvas de corriente características, antes y después de la interacción entre la superficie de grafeno con biomoléculas.

En este trabajo se estudiaron teóricamente los efectos que produce la fisisorción de diez aminoácidos en las propiedades electrónicas del grafeno, para evaluar su eventual aplicación en un detector de aminoácidos. Para ello se modeló un dispositivo que comprende dos electrodos de grafeno (fuente R y

drenaje L) conectados a un canal de grafeno. Dependiendo del aminoácido adsorbido sobre el canal, se pueden modelar los efectos en las propiedades eléctricas, debido a las diferencias en la transferencia de carga, la concentración de dopaje, el tipo de dopante y la generación de dipolos eléctricos locales. Se calcularon las curvas de transmisión y de corriente-voltaje características de cada sistema, considerando voltajes de polarización positivos y negativos (entre -2 y 2 V).

Esta tesis se dividió en seis capítulos a saber: i) Introducción, ii) Conceptos teóricos, iii) Descripción de los sistemas modelados, iv) Resultados y discusión de adsorción de aminoácidos, v) Efecto de la adsorción de aminoácidos en el transporte electrónico de una hoja de grafeno y, vii) Conclusiones.

ABSTRACT

Ab-initio modeling of nanosystems based on graphene and spintronic heterostructures

Graphene is a bidimensional of carbon allotrope, with unique physical and chemical properties. The graphene is a flexible material, lightweight, transparent, with high charge mobility and high surface area, among others. Since the experimental obtainment of graphene in 2004 by Andre Geim and Konstantin Novoselov, graphene has become a promising material with applications in electronic, bioingner, bio-medicine and nanotechnology. Particularly, in the biosensors building, the graphene is a material with numerous advantages: is sensitive, have a low electronic noise and is biocompatible.

In this work we have studied theoretically the effects in the electronic properties of the graphene due to the adsorption process with ten amino acids. We have modeled a device with two graphene based-leads (source R and drain L) connected to a graphene channel. According to the amino acid adsorbed on the channel, we modeled the effect in the electric properties due to the charge transfer, the doping concentration and the formation of the local dipoles. We calculated the characteristic transmission and current-voltage curves (we considered positives and negatives polarization voltages: between -2 and 2 V).

This work was divided into six chapters: i) introduction, ii) theoretical concepts, iii) description of the modeled systems, iv) Results and discussion about the amino acids absorbed, v) Effects in the electronic transport of the graphene sheet due to the amino acid adsorption and, vi) conclusions.