

Влияние адсорбированной макромолекулы на подвижность носителей в однослойном графене: модель оборванных связей

© С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

Поступила в Редакцию 2 мая 2023 г.

В окончательной редакции 15 июня 2023 г.

Принята к публикации 14 июля 2023 г.

В рамках ранее предложенной модели оборванных связей, в которой взаимодействие макромолекулы с однослойным графеном осуществляется шивками оборванных связей макромолекулы с атомами углерода, изучено влияние этих шивок на подвижность носителей в графене. Показано, что короткодействующее рассеяние носителей на шивках макромолекула-однослойный графен превалирует над кулоновским рассеянием. Установлено также, что влиянием на подвижность деформации, вызванной шивками, можно пренебречь по сравнению с короткодействующим рассеянием. Рассмотрены случаи свободного и эпитаксиального графена. Обсуждается использование структуры макромолекула-однослойный графен-подложка как основы биосенсора.

Ключевые слова: кулоновское и короткодействующее рассеяние носителей, деформация и рассеяние, подложка, биосенсор.

DOI: 10.21883/FTP.2023.05.56210.4958

1. Введение

Уникальная способность графена детектировать адсорбцию одной единственной молекулы [1] предопределила его использование в различных сенсорах, в том числе в биосенсорах [2–10]. В работе [11] для описания адсорбции органической макромолекулы (ММ) на однослойном графене (SLG) была предложена модель оборванных связей, или DBM (dangling bonds model). В этой модели для оценки энергии взаимодействия оборванной связи i примыкающего к SLG молекулярного фрагмента ММ с атомом углерода (или энергии адсорбции E_i^{ads}) использовалась простая теоретическая схема, позволяющая получить аналитические результаты. В качестве фрагментов ММ рассматривались молекулы O_2 , NO , NH , CH_2 , NH_2 , CH_3 , а в качестве оборванных связей — связи атомов C , N и O . Энергия адсорбции всей ММ, или энергия адгезии E_{adh} , определялась суммой слагаемых $E_i^{\text{ads}}N_i$, где N_i — концентрация оборванных связей. В работе [11] были определены переход заряда между ММ и SLG и оценены значения E_{adh} для ряда молекулярных фрагментов ММ. В настоящей работе мы рассмотрим влияние ММ на подвижность носителей заряда в графене.

Уникально высокая подвижность носителей в графене с самого начала графеновой тематики по праву считалась главной особенностью SLG и вызвала большой интерес [12,13], до сих пор не угасший [14,15]. В настоящей работе в качестве первого эффекта, влияющего на подвижность носителей в графене, будет рассмотрено рассеяние на так называемых шивках оборванных связей ММ с ближайшими к ним атомами SLG (шивки ММ-SLG). Эти связи можно рассматривать

как адсорбированные на графене частицы (адчастицы) и воспользоваться результатами многочисленных работ по рассеянию носителей заряженными примесями и нейтральными дефектами в графене [12–22].

В последние годы заметно вырос интерес к влиянию наведенных (каким-нибудь внешним фактором) деформационных полей на физические свойства 2D материалов и приборов на их основе. Эта область исследований получила название стрейнтроники [23,24]. Среди всех 2D материалов графен представляет особый интерес, так как обладает модулем Юнга ~ 1 ТПа, способен выдерживать обратимую упругую деформацию при растяжении до 25% [23] и перспективен для развития гибкой электроники [24]. Деформация влияет на фононную и электронную подсистемы, так что ее воздействие изменяет практически все характеристики графена, что позволяет ставить вопрос о деформационной инженерии. В настоящей работе деформация, вызванная шивками ММ-SLG, будет рассмотрена в качестве второго механизма рассеяния носителей.

2. Рассеяние носителей на шивках ММ-SLG

Далее будет рассматриваться ситуация, когда проводимость SLG σ описывается квазиклассической теорией Больцмана в приближении времени релаксации и, в соответствии с теорией Друде, $\sigma = en\mu$, где e — элементарный заряд. Такое описание справедливо при высокой концентрации свободных носителей в графене. Будем считать, что справедливо условие $n \gg n_{\text{imp}}, n_{\text{def}}$, где n_{imp} и n_{def} — концентрации заряженных примесей

и нейтральных дефектов соответственно. Согласно различным теоретическим моделям, в настоящее время общепринято, что $\mu \propto n_{\text{imp}}^{-1} n_{\text{def}}^{-1}$ [13,22]. В теории рассеяния рассматривают два предельных случая: кулоновский и короткодействующий центры рассеяния [12,13], которым соответствуют подвижности носителей вида

$$\mu_C = \frac{e (\hbar v_F)^2}{\hbar n_{sc} u_C^2}, \quad \mu_{SR} = \frac{e (\hbar v_F)^2}{4\hbar n n_{sc} u_{SR}^2}. \quad (1)$$

Здесь \hbar — приведенная постоянная Планка, n — концентрация носителей в графене, n_{sc} — концентрация рассеивающих центров, $u_C = Z_C e^2 / \epsilon_{st}$ ($Z_C e$ — заряд кулоновского центра, ϵ_{st} — статическая диэлектрическая проницаемость графена), u_{SR} — определяется выражением для короткодействующего потенциала $U_{SR}(\mathbf{r}) = u_{SR} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ (\mathbf{r}_0 — двумерный радиус-вектор, определяющий положение точечного дефекта) [12,13].

Переходя к адсорбции ММ на SLG, для сшивки i -й оборванной связи с атомом графена введем эффективный рассеивающий потенциал вида

$$u_i = |Z_i| u_C + (1 - |Z_i|) (2u_{SR}) \quad (2)$$

и заменим n_{sc} на N_i . Тогда вклад i -й сшивки μ_i и суммарная подвижность есть

$$\mu_i = \frac{e (\hbar v_F)^2}{\hbar N_i u_i^2}, \quad \frac{1}{\mu_{sc}} = \sum_i \frac{N_i}{\mu_i}. \quad (3)$$

Перейдем к численным оценкам, положив $Z_C = 1$, так как считаем, что до взаимодействия с графеном оборванные связи содержали один электрон. Значения Z_i приведены в таблице работы [11]. Статическая диэлектрическая проницаемость $\epsilon_{st} = 3$ [25,26]. Тогда $u_C \approx 5 \cdot 10^{-8}$ эВ·см. Если положить, как в [13], $u_{SR} = 10$ эВ·нм² (или даже на порядок меньше), имеем $2u_{SR} \gg u_C$ (здесь учтено, что $|Z_i| \sim (1 - |Z_i|)$ — см. таблицу и [11]), так что $u_i \approx 2(1 - |Z_i|)u_{SR}$. Таким образом, $\mu_i \propto N_i^{-1} (1 - |Z_i|)^{-2}$. Так как $v_F \approx 10^8$ см/с, при $N_i = 4 \cdot 10^9$ см⁻² [13] и $u_{SR} = 10$ эВ·нм² получаем $\mu_i \approx 2700 / (1 - |Z_i|)^2$ см²/В·с. То же значение подвижности получим, естественно, при $N_i = 4 \cdot 10^{11}$ см⁻² и $u_{SR} = 1$ эВ·нм². Отметим, что в настоящее время доступны образцы графена с $\mu > 10^4$ см²/В·с [22].

Суммарный заряд, переходящий с ММ на SLG, равен $Z = -\sum_i Z_i$ [11]. Если в отсутствие ММ концентрация носителей в SLG была равна n_0 , то теперь имеем концентрацию $n = n_0 + \Delta n$, где $\Delta n = -Z|/S$, $S_{uc} = 3\sqrt{3}a^2/2$ — площадь элементарной ячейки графена, $a = 1.42$ Å — расстояние между ближайшими соседями в графене. Изменение подвижности $\Delta\mu = \mu_{sc} - \mu_0$. Если $(\mu_0 - \mu_{sc})/\mu_0 \ll 1$, то изменение проводимости из-за взаимодействия SLG с ММ можно представить в виде $\Delta\sigma \approx e(n_0 \Delta\mu + \mu_0 \Delta n)$, где учтено, что $|\Delta n| \ll n_0$ [11].

3. Влияние наведенной сшивками ММ-SLG деформации графена на подвижность носителей

Будем считать, что сшивке i соответствует центральная сила $F_i(r - r_i) = F_{iz} \delta(r - r_i)$, где $\mathbf{r} = (x, y)$, действующая на атом углерода графена с координатой $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$. Считая для простоты SLG упругоизотропным листом, получим для смещений $u_{ir} = \sqrt{u_{ix}^2 + u_{iy}^2}$ в плоскости графена следующие выражения:

$$u_{ir} = -AF_i / (r - r_i), \quad A = \frac{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}{2\pi(Y_{2D}/h)}, \quad (4)$$

где ν и Y_{2D} — коэффициент Пуассона и модуль Юнга [27], $h = 3.35$ Å,¹ индекс z у силы F_{iz} опущен. При $Y_{2D} = 340$ Н/м, $\nu = 0.165$ [28] и $Y_{2D} = 342$ Н/м, $\nu = 0.19$ [29] получаем $A \sim 0.1$ (ТПа)⁻¹. Соответствующая смещению (4) деформация равна $u_{irr} = \partial u_{ir} / \partial r = -AF_i / (r - r_i)^2$. Если среднее расстояние между оборванными связями принять равным $2R$, то среднее значение деформации $\bar{u}_{irr} \approx -AF_i / Ra$. Согласно оценкам [11], для атомов С, N и O средняя длина оборванных связей (вытянутых вдоль оси z) равна $d_i \sim 2.5$ Å. Для σ -связи оборванной p -орбитали ММ с p_z -орбиталью SLG имеем $V_i = V_{pp\sigma} = 2.22(h^2/m_0 d_i^2)$ [30–32], что для среднего значения $d \sim 2.5$ Å дает $V_i \sim 3$ эВ.² Тогда $F = F_i = \partial V_i / \partial d = -2V_i / d \sim -2.4$ эВ/Å, откуда находим

$$\bar{u}_{rr} = \sum_i \bar{u}_{irr} \approx 2AVM / dRa, \quad (5)$$

где $M = \sum_i m_i$ — полное число i -связей, приходящихся на элементарную ячейку графена. Тогда получаем $\bar{u}_{rr} \sim 3 \cdot 10^{-3} M/R$, где R измеряется в нм. Так как [11] имеем $M < 0.01 - 0.1$ [11], то $R \sim \sqrt{S_{uc}} / 2M \sim (2 - 20)$ нм. Таким образом, $(\bar{u}_{rr})_{\text{max}} \sim 10^{-4}$.

Используя низкоэнергетическое приближение [12], представим плотность состояний свободного графена (на один атом графена) в виде

$$\rho_{SLG}(\omega) = (2|\omega|/\xi^2) \Theta(\xi - |\omega|), \quad (6)$$

где ω — энергия, отсчитываемая от точки Дирака $\epsilon_D = 0$, $\xi = t\sqrt{2\pi\sqrt{3}} \sim 3t$ — энергия обрезания [33], $t \sim 3$ эВ — энергия перескока электрона между ближайшими атомами графена, $\Theta(\dots)$ — функция Хевисайда. Тогда при нулевой температуре энергия электронного подсистемы графена $E(\epsilon_F) = 2(\xi^3 + \epsilon_F^3)/3\xi^2$, где ϵ_F — уровень Ферми, а концентрации свободных

¹ Множитель h введен из соображений размерности, так как в 3D случае модуль Юнга измеряется в Н/м², тогда как в 2D случае — в Н/м. Отметим, что $h = 3.35$ Å соответствует межслойному расстоянию в графите и иногда именуется толщиной графена. Введение этого множителя позволяет пользоваться результатами стандартной теории упругости, например, [27].

² Как и в работе [11], мы выбрали для оценок матричного элемента V_i связь p_z -орбиталей, характеризуемую множителем 2.22. Для связей p_z -орбиталей с sp , sp^2 и sp^3 множители равны соответственно 2.57, 2.63 и 2.63 [31], что не меняет сколь-либо значимо сделанных оценок.

электронов (при $\varepsilon_F > 0$) и дырок (при $\varepsilon_F < 0$) равны $2(\varepsilon_F/\xi^2)/S_{uc}$. Так как число электронов в элементарной ячейке графена при деформации не изменяется, легко получить соотношение $\delta\varepsilon_F = -2\varepsilon_F\bar{u}_{rr}$. Тогда имеем $\delta E(\varepsilon_F) = -2\varepsilon_F^3/\xi^2\bar{u}_{rr}$, так что потенциал деформации $w_{dp} = -2\varepsilon_F^3/\xi^2$. Для оценки времени релаксации за счет деформации графена τ_{deform} воспользуемся соотношением (золотое правило Ферми):

$$\tau_{\text{deform}}^{-1} = (2\pi/\hbar)|w_{dp}\bar{u}_{rr}|^2\rho_{SLG}(\varepsilon_F), \quad (7)$$

откуда получаем $\tau_{\text{deform}}^{-1} \sim 7 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$. С другой стороны, время релаксации на короткодействующих центрах τ_{SR} , определяемое формулой

$$\frac{1}{\tau_{SR}} = \frac{N_{SR}u_{SR}^2}{4(\hbar\nu_F)^2}(\varepsilon_F/\hbar) \quad (8)$$

(см. [13]), при $N_i = 4 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$ дает $\tau_{SR}^{-1} \sim 3 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$. Таким образом, рассеянием носителей заряда, вызванным деформацией листа графена его сшивками с ММ, по сравнению с рассеянием на самих этих сшивках можно пренебречь.

4. Макромолекула на эпитаксиальном графене

Диффузионную проводимость свободного графена можно представить в форме

$$\sigma(\varepsilon_F) = e^2\rho_{SLG}(\varepsilon_F)\nu_F^2\tau(\varepsilon_F)/2A_{uc}, \quad (9)$$

вытекающей из соотношения Эйнштейна $\sigma(\varepsilon_F) = e^2\rho_{SLG}(\varepsilon_F)D(\varepsilon_F)$, где коэффициент диффузии $D(\varepsilon_F) = \nu_F^2\tau(\varepsilon_F)/2A_{uc}$ [13]. Исходя из золотого правила Ферми выражение (9) для эпитаксиального графена (эпиграфена) можно переписать в виде

$$\tilde{\sigma}(\varepsilon_F) = e^2\hbar\nu_F^2/4\pi A_{uc}V_{\text{sub}}^2, \quad (10)$$

где $V_{\text{sub}}^2 = \langle |V_{ak}|^2 \rangle_{BZ}$ — усредненный по состояниям $|\mathbf{k}\rangle$ субстрата квадрат матричного элемента взаимодействия атома графена с электронным спектром подложки (здесь и далее тильда относится к эпиграфену). Как показано в [34,35], влияние полупроводниковой подложки на скорость Ферми в SLG определяется выражением

$$\tilde{\nu}_F/\nu_F = \eta(\varepsilon_F), \quad \eta(\varepsilon_F) = \left(1 - \left(\frac{d\Lambda_{\text{sub}}(\omega)}{d\omega}\right)_{\varepsilon_F}\right)^{-1}, \quad (11)$$

где

$$\Lambda_{\text{sub}}(\omega) = V_{\text{sub}}^2 P \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\text{sub}}(\omega')(\omega - \omega')^{-1} d\omega'$$

— функция сдвига электронных состояний графена за счет взаимодействия с подложкой, P — символ главного значения интеграла, $\rho_{\text{sub}}(\omega)$ — плотность состояний подложки. Полагая $\rho_{\text{sub}}(\Omega) = \rho_s\Theta(|\Omega| - E_g/2)$, где

$\Omega = \omega - \omega_0$, ω_0 — центр запрещенной шириной E_g , $\rho_s = \text{const}$, получим

$$\Lambda_{\text{sub}}(\omega) = \rho_s V_{\text{sub}}^2 \ln |\Omega - E_g/2| / (\Omega + E_g/2)$$

(модель Халдейна–Андерсона [36]). Тогда при $|\varepsilon_F - \omega_0| < E_g/2$ получаем

$$\eta(\varepsilon_F) = \left(1 + \frac{V_{\text{sub}}^2(E_g/2)}{(E_g/2)^2 - (\varepsilon_F - \omega_0)^2}\right)^{-1}, \quad (12)$$

так что $\tilde{\nu}_F/\nu_F < 1$. С учетом этого эффекта вместо формул (1) получаем

$$\tilde{\mu}_C = \mu_C\eta^2(\varepsilon_F), \quad \tilde{\mu}_{SR} = \mu_{SR}\eta^2(\varepsilon_F), \quad (13)$$

т.е. $\tilde{\mu}_C/\tilde{\mu}_{SR} = \mu_C/\mu_{SR}$.

Теперь следует учесть изменение зарядов оборванных связей Z_i , входящих в выражение (2). Во-первых, учтем, что при наличии подложки вместо выражения (6) следует записать $\tilde{\rho}_{SLG}(\tilde{\omega}) = (2|\tilde{\omega}|/\xi^2)\Theta(\xi - |\tilde{\omega}|)$, где $\tilde{\omega} - \Lambda_{\text{sub}}(\omega)$. Воспользовавшись результатами работы [11], функция сдвига $\tilde{\Lambda}_i(\tilde{\omega})$ энергий оборванных связей ММ принимает вид

$$\tilde{\Lambda}_i(\tilde{\omega}) = (V_i^2\tilde{\omega}/\xi^2) \ln |\tilde{\omega}^2/(\xi^2 - \tilde{\omega}^2)|.$$

В режимах слабого взаимодействия SLG с подложкой (т.е. при $V^2/t^2 \ll 1$) и оборванных связей с графеном (см. [11]) отличим $\tilde{\omega}$ от ω в выражении для $\tilde{\Lambda}_i(\tilde{\omega})$ можно пренебречь³. Таким образом, мы по-прежнему можем использовать значения Z_i , вычисленные в [11]. Отсюда следует, что наличие подложки не меняет вывода о превалировании короткодействующего рассеяния над кулоновским, сделанного в разд. 2.

В работах [7,8,37] в качестве основы биосенсора рассматривалась система ММ–SLG–SiC-подложка. В качестве ММ выступала биомолекула, именуемая в биосенсорике антителом Ab, или биорецептором. Испытуемую биомолекулу (антиген Ag, или биомаркер) приводят в контакт с Ab и фиксируют изменение тока, текущего в SLG. В работе [37] оценивались переход заряда ΔQ между Ab и эпитаксиальным графеном и изменение ΔQ при наличии Ag. Изменение проводимости в результате контакта Ab с Ag равно $\Delta\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma} - \tilde{\sigma}'$, где $\tilde{\sigma}$ означает проводимость эпиграфена в отсутствии, а $\tilde{\sigma}'$ — в присутствии Ag.

5. Заключение

Итак, в рамках ранее предложенной модели оборванных связей [11] для случая диффузионной проводимости Друде–Лоренца удалось установить следующее:

1) короткодействующее рассеяние на сшивках ММ–SLG превалирует над кулоновским рассеянием;

³ Напомним, что мы рассматриваем ситуацию, когда концентрация носителей в графене высока, так что ε_F и $\tilde{\varepsilon}_F$ лежат в удалении от точки Дирака. Учтено к тому же, что логарифм — слабо меняющаяся функция.

2) влиянием на подвижность деформации, вызванной сшивками, можно пренебречь по сравнению с короткодействующим рассеянием;

3) выводы 1) и 2) справедливы как для свободного, так и для эпитаксиального графена.

В настоящей работе рассматривался бесщелевой графен. При наличии щели для оценки подвижности удобно использовать так называемую формулу Тагаки и др. [37] (см. также [38–40]). При этом эффективную массу можно оценить по формуле (12) работы [41].

К сожалению, в настоящее время полученные здесь результаты невозможно сопоставить с экспериментальными данными, так как в работах [7,8] рассматривались в основном технологические вопросы создания резистивного биосенсора на основе однослойного графена и систематических измерений тока еще не проводилось.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект 075-15-2021-1349) и гранта Российского научного фонда 22-12-00134.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] F. Schedin, A.K. Geim, S.V. Morozov, E.W. Hill, P. Blake, M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov. *Nature Materials*, **6**, 652 (2007).
- [2] Y. Bai, T. Xu, X. Zhang. *Micromachines*, **11**, 60 (2020).
- [3] M. Coros, S. Pruneanu, R.-I. Stefan-van Staden. *J. Electrochem. Soc.*, **167**, 037528 (2020).
- [4] V. Nanes, N. Lec. *Sensors*, **21**, 1109 (2021).
- [5] S. Shahriari, M. Sastry, S. Panjekar, R.K. Singh Raman. *Nanotechnology, Science and Applications*, **14**, 197 (2021).
- [6] Laxmia, B. Mahapatra, R.V. Krishna, P.K. Patel. *AIP Conf. Proc.*, **2327**, 020011 (2021).
- [7] A.A. Lebedev, S.Yu. Davydov, I.A. Eliseyev, A.D. Roenkov, O. Avdeev, S.P. Lebedev, Y. Makarov, M. Puzyk, S. Klotchenko, A.S. Usikov. *Materials*, **14**, 590 (2021).
- [8] С.В. Воробьев, С.Н. Янишевский, А.Ю. Емелин, А.А. Лебедев, С.П. Лебедев, Ю.Н. Макаров, А.С. Усиков, С.А. Клотченко, А.В. Васин. *Клиническая лабораторная диагностика*, **67** (1), 5 (2022).
- [10] S. Wang, X. Qi, D. Hao, R. Moro, Y. Ma, L. Ma. *J. Electrochem. Soc.*, **169**, 027509 (2022).
- [11] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **64**, 2050 (2022).
- [12] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 109 (2009).
- [13] S. Das Sarma, S. Adam, E.H. Hwang, E. Rossi. *Rev. Mod. Phys.*, **83**, 407 (2011).
- [14] Y.V. Skrypnik, V.M. Loktev. *Low Temp. Phys.*, **45**, 1310 (2019).
- [15] S.H. Mir, V.K. Yadav, J.K. Singh. *ACS Omega*, **5**, 14203 (2020).
- [16] T. Ando. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **75**, 074716 (2006).
- [17] S. Adam, E.H. Hwang, V.M. Galitski, S. Das Sarma. *PNAS*, **104**, 18392 (2007).
- [18] A.H. Castro Neto, V.N. Kotov, J. Nilsson, V.M. Pereira, N.M.R. Peres, B. Uchoa. *Solid State Commun.*, **149**, 1094 (2009).
- [19] T.O. Wehling, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein. *Chem. Phys. Lett.*, **476**, 125 (2009).
- [20] T.O. Wehling, S. Yuan, A.I. Lichtenstein, A.K. Geim, M.I. Katsnelson. *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 056802 (2010).
- [21] L. Chen, F. Ouyang, S. Ma, T.-F. Fang, A.-M. Guo, Q.-F. Sun. *Phys. Rev. B*, **101**, 115417 (2020).
- [22] J.H. Gosling, O. Makarovskiy, F. Wang, N.D. Cottam, M.T. Greenaway, A. Patanè, R.D. Wildman, C.J. Tuck, L. Turyanska, T.M. Fromhold. *Commun. Phys.*, **4**, Article: 30 (2021).
- [23] C. Si, Z. Sun, F. Liu. *Nanoscale*, **8**, 3207 (2016).
- [24] И.В. Антонова. *УФН*, **192**, 609 (2022).
- [25] D.C. Elias, R.V. Gorbachev, A.S. Mayorov, S.V. Morozov, A.A. Zhukov, P. Blake, L.A. Ponomarenko, I.V. Grigorieva, K.S. Novoselov, F. Guinea, A.K. Geim. *Nature Physics*, **7**, 701 (2011).
- [26] E.J.G. Santos, E. Kaxiras. *Nano Lett.*, **13**, 898 (2013).
- [27] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости* (М., Наука, 1987).
- [28] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone. *Science*, **321**, 385 (2008).
- [29] A. Politano, G. Chiarello. *Nano Research*, **8**, 1847 (2015).
- [30] Дж. Займан. *Принципы теории твердого тела* (М., Мир, 1974).
- [31] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B*, **27**, 3592 (1983).
- [32] С.Ю. Давыдов, Г.И. Сабирова. *Письма ЖТФ*, **37** (11), 51 (2011).
- [33] N.M.R. Peres, F. Guinea, A.H. Castro Neto. *Phys. Rev.*, **73**, 125411 (2006).
- [34] З.З. Алисултанов. *Письма ЖТФ*, **39** (13), 32 (2013).
- [35] С.Ю. Давыдов. *Письма ЖТФ*, **45** (13), 14 (2019).
- [36] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. *Элементарное введение в теорию наносистем* (СПб., Лань, 2014).
- [37] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase, H. Tango. *IEEE Trans. Electron Dev.*, **41**, 2357 (1994).
- [38] Y. Li, K.-A.N. Duerloo, E.J. Reed. *Nano Lett.*, **14**, 4299 (2014).
- [39] Z. Ye, H. Geng, X. Zheng. *Nanoscale Res. Lett.*, **13**, 376 (2018).
- [40] S.H. Mir. *Phys. B: Condens. Matter*, **57**, 88 (2019).
- [41] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **58**, 779 (2016).

Редактор Г.А. Оганесян

Effect of adsorbed macromolecule on the carriers mobility in single layer graphene: Dangling bonds model

S.Yu. Davydov, A.A. Lebedev

Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Within the framework of the previously proposed model (S.Yu. Davydov. *Phys. Solid State* **64**, 2018 (2022)), in which the interaction of a macromolecule (MM) with single-layer graphene (SLG) is carried out by stitching of dangling MM bonds with carbon atoms, the effect of these stitching on the mobility of carriers in graphene was studied. It is shown that short-range scattering of MM-SLG stitching prevails over Coulomb scattering. It has also been found that the effect of induced by stitching graphene deformation on mobility can be neglected compared to short-range scattering. The cases of free and epitaxial graphene are considered. The use of the MM-SLG-substrate structure as the basis of a biosensor is discussed.