

分子修飾トランジスタガスセンサにおける 修飾分子と標的ガス分子との相互作用の研究

Interaction between target gas and functionalized molecules on molecular functionalized
transistor gas sensors

東大マテ °田中 貴久, 矢嶋 起彬, 内田 建

The Univ. of Tokyo, °Takahisa Tanaka, Takeaki Yajima, Ken Uchida

E-mail: tanaka@ssn.t.u-tokyo.ac.jp

現在、呼吸診断や爆発物検知など様々な用途で省エネルギーかつ微細化された電子デバイスによるガスセンシングが注目を集めている。ナノワイヤトランジスタ表面に分子修飾を施したガスセンサは、修飾分子によるガス選択性とトランジスタの高感度な電荷への応答性を両立できるため、多くの実験がなされてきた [1]。しかし、センシングメカニズムについては、一様に修飾された分子と単一の標的ガスとの相互作用に基づく単純なモデルしか構築されておらず [2]、分子修飾の欠陥の効果は十分に理解されていない。本研究では、分子動力学法(MD)から得られた電荷の位置に基づき、半導体内のキャリア濃度を計算することでセンシングメカニズムについて考察した。

まず、MD シミュレータ LAMMPS によりトランジスタ上の修飾分子と標的分子の運動を計算した [3] (Fig. 1(a)). 修飾分子として $C_6H_{13}SiCl_3$ と $C_{12}H_{25}SiCl_3$ 、標的ガスとして H_2O を考慮した。 SiO_2 への修飾を模擬するため、修飾分子のクロロ基をヒドロキシ基に置換して、固定された SiO_2 原子層上に結合させた。欠陥の影響の評価は、隣接する修飾分子 3 個を取り除くことで行った。MD 計算における各時間の原子位置と各原子の電荷の値を用いて、Poisson 方程式と 3 次元の半導体層のキャリア濃度を自己無撞着に解いた (Fig. 1(b)). 得られたキャリア濃度のゲート電圧依存性からトランジスタ閾値の時間変化を計算した。

欠陥が存在しない場合は、 $C_6H_{13}SiCl_3$ と $C_{12}H_{25}SiCl_3$ のどちらの場合でも修飾分子層への H_2O の透過は発生せず、顕著な閾値シフトは発生しなかった。一方、欠陥のある $C_6H_{13}SiCl_3$ 修飾トランジスタでは、0.3 ns 程度で水分子が分子修飾の欠陥に侵入し、負方向の閾値シフトが発生した (Fig. 2)。 $C_{12}H_{25}SiCl_3$ 修飾トランジスタでは欠陥が存在する場合でも水分子の透過は発生せず、顕著な閾値シフトは発生しなかった。これらの結果は、欠陥の有無と修飾分子の鎖長によってセンサの選択性が発現している可能性を示唆している。本研究の一部は科研費 19K15050, 18H05243 および JST-CREST JPMJCR19I2 の助成を受けて行われた。

[1] S. Clavaguera, *et al.*, *Angewandte* **49**, 4063 (2010).

[2] B. Wang and H. Haick, *ACS Appl. Mater. Int.* **5**, 2289 (2013).

[3] S. Plimpton, *J. Comput. Phys.* **117**, 1 (1995).

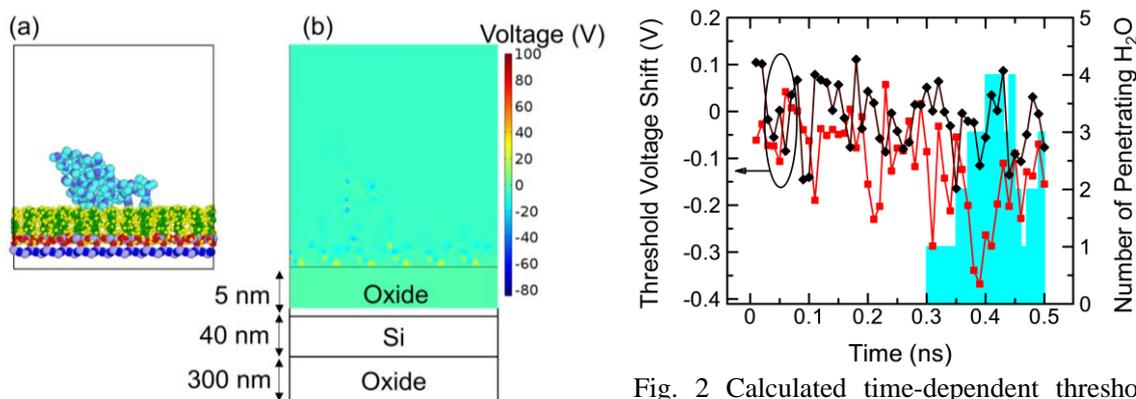


Fig. 1 (a) Snapshot of MD calculation for H_2O molecules and functionalized molecules on fixed SiO_2 . (b) Schematic of calculated structure and calculated potential from atomic position of Fig. 1(a).

Fig. 2 Calculated time-dependent threshold voltage. Red and black lines with symbols represent threshold voltage for $C_6H_{13}SiCl_3$ and $C_{12}H_{25}SiCl_3$ functionalized transistors, respectively. Histogram represent number of penetrating water molecules in $C_6H_{13}SiCl_3$.