

Doktorandenstelle in Elektronentransporttheorie angewandt auf Biosensoren auf Graphenbasis

Es werden Kandidaten für eine Doktorandenstelle für einen Zeitraum von drei Jahren ab 1. September 2019 in der Gruppe von Dr. Robert Stadler am Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Wien gesucht (<http://smt.tuwien.ac.at/robert/robert.html>). Obwohl die Stelle erst im September beginnt, beginnt der Auswahlprozess bereits jetzt.

Der erfolgreiche Kandidat wird an der Anwendung und Entwicklung von auf der Dichtefunktionaltheorie basierenden Berechnungsmethoden zur Beschreibung des Elektronentransports durch Graphenschichten mit darauf adsorbierten Molekülen arbeiten, bei dem destruktive Interferenzeffekte eine wichtige Rolle spielen. Die Anwendung dieser Forschung liegt in der Biosensorik, wobei eine enge Zusammenarbeit mit Experimentatoren von der Biosensor Technology Unit des Austrian Institute of Technology (AIT) in Tulln für das Projekt von entscheidender Bedeutung ist. Weitere Einzelheiten entnehmen Sie bitte der nachstehenden Zusammenfassung.

Notwendige Voraussetzungen für die ausgeschriebene Stelle sind ein Master/Magister/Dipl.Ing. Titel in Chemie, Physik, Materialwissenschaften oder Elektrotechnik, gute Englischkenntnisse in Wort und Schrift und Interesse an komputativer/theoretischer Forschung. Gute Kenntnisse der Festkörpertheorie und/oder Quantenchemie wären von grossem Vorteil.

Die Stelle wird durch das FWF Projekt P31631 "Destruktive Quanteninterferenz (DQI) im Elektronentransport durch Graphennanobaender" finanziert und entspricht einem Brutto-Monatsgehalt von 2162,40 Euro bei einer Arbeitszeit von 30 Stunden/Woche. Interessenten sollten Dr. Robert Stadler direkt per Email (robert.stadler@tuwien.ac.at) mit einem Bewerbungsschreiben und einem detaillierten Lebenslauf kontaktieren.

PhD position in electron transport theory applied to graphene based bio sensors

We are looking for candidates for a three-years position starting on September 1st 2019 in the group of Dr. Robert Stadler at the Institute of Theoretical Physics at the Vienna University of Technology (<http://smt.tuwien.ac.at/robert/robert.html>). Although the position only starts in September, the selection processes starts now and candidates are encouraged to apply already.

The successful candidate will work on the application and development of computational methods based on density functional theory for the description of electron transport through graphene sheets with adsorbed molecules, where destructive interference effects play an important role. The application of this research lies in biosensing, where a strong interaction with experimentalists at the Biosensor Technology Unit of the Austrian Institute of Technology (AIT) in Tulln is crucial for the project. For further details please see the abstract below.

The mandatory requirement for the position is a master degree in chemistry, physics, materials science or electrical engineering, as well as a good command of spoken and written English and a personal interest in computational/theoretical research. Good knowledge of solid state theory and/or quantum chemistry would also be highly desirable.

The project is linked to the grant P31631 "Destructive Quantum Interference (DQI) in electron transport through graphene nanoribbons", where the gross payment of 2162,40 Euro/per month is offered for 30 working hours per week. Interested candidates should email Dr. Robert Stadler (robert.stadler@tuwien.ac.at) with a letter of application and a detailed CV.

Zusammenfassung

Graphen wurde als vielversprechendes Material für den Einsatz in hochleistungsfähigen nanoelektronischen Geräten aufgrund ihrer einzigartigen physikalischen Eigenschaften, wie ihrer ausgezeichneten thermischen Stabilität, ihrer hohen Ladungsträgerbeweglichkeit oder ihrer Fähigkeit, atomar präzise Kontakte zu bilden, umfassend untersucht. Aufgrund der sehr großen Änderungen der Leitfähigkeit, die durch Ladungsdotierung von Graphenschichten durch eine Reihe von Adsorbaten zusammen mit ihrem einzigartig hohen Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnis möglich sind, wurde das Material auch als Basis für Gas- oder Bio-Sensoren vorgeschlagen und sogar für eine DNA-Basensequenzanalyse. Es gibt zwei große Herausforderungen für die Weiterentwicklung solcher Sensoren: i) Der Mechanismus, auf dem die Gasmessung basiert, ist nicht sehr gut verstanden und manchmal gibt es mehrere konkurrierende theoretische Erklärungen; ii) Zwar gibt es wenig Zweifel daran, dass dünne Graphenfilme eine große Sensitivität aufweisen, leider sind sie für viele verschiedene Arten von Adsorbaten empfindlich und daher nicht chemisch selektiv. Beide Probleme sind mit der gleichen Ursache verknüpft, nämlich die Abhängigkeit des Sensor Mechanismus von Details der Gerätestruktur, die durch einen bestimmten Herstellungsprozess verursacht werden und bei Geräten aus größeren Graphenschichten nicht ausreichend kontrolliert werden können. Diese Probleme können daher nur durch das Ersetzen solcher ausgedehnten Schichten durch atomar gut definierte Graphen-Nanoribbons (GNRs) überwunden werden, für die dann neue Paradigmen für den Sensor Mechanismus vorgeschlagen werden müssen. In der chemischen Synthese von strukturell klar definierten und flüssigphasenverarbeitbaren Vorgängen wurden vor kurzem enorme Fortschritte erzielt, während destruktive Quanten-Interferenz- (DQI-) Effekte als neues Paradigma für logische Schaltkreise auf der Basis von GNRs mit extrem geringem Leistungsverbrauch vorgeschlagen wurden, aber auch als Werkzeug zur Erhöhung der Selektivität von Graphen-basierten Gassensoren. Ziel dieses Projektes ist es, die Beziehung zwischen der Struktur (oder Topologie) von GNRs, die mit einer Source- und Drain-Elektrode auf mehreren atomaren Kontaktstellen verbunden sind, systematisch zu untersuchen und die resultierende Leitfähigkeit, die entscheidend vom Auftreten oder Fehlen von DQI-Effekten abhängt. Dies ist von grundlegender Bedeutung für die Grundlagenforschung zum Material Graphen, weil die grundlegende Fähigkeit, GNRs von arbiträren Formen und Größen zu synthetisieren, die Frage, welche speziellen Strukturen wissenschaftlich und für potenzielle technologische Anwendungen interessant sind, inspiriert. Da es verschiedene Arten von QI gibt, die auf verschiedenen Längenskalen angetroffen werden, ist es wissenschaftlich von Interesse, ob es irgendeine mögliche Verbindung dieser verschiedenen Arten von QI geben könnte, die aus der Skalierung von Topologien von der molekularen Skala zu einer mesoskopischen Längenskala abgeleitet werden kann. In Bezug auf Anwendungen gehören chemische Sensoren zu den interessantesten Kandidaten, wobei in diesem Projekt Berechnungen auf Basis der Dichtefunktionaltheorie für eine atomistische Beschreibung der Source- und Drain-Elektroden sowie für die Charakterisierung des Ladungstransfers zwischen bestimmten Typen von Adsorbat-Molekülen und GNRs eingesetzt werden.

Abstract

Graphene has been extensively investigated as a promising material for use in high performance nano-electronic devices due to their unique physical properties such as their excellent thermal stability, high charge carrier mobility or their ability to form atomically precise nano-junctions. Due to the very large changes in conductivity that are possible as a result of charge doping of graphene sheets with a number of adsorbates together with its uniquely high surface-to-volume ratio the material has also been proposed for gas sensing, as a bio sensor and even DNA base sequence analysis. There are two major challenges for their further development: i) The mechanism on which the gas sensing is based is not very well understood and sometimes several competing theoretical explanations exist; ii) While there is little doubt that thin graphene films show great sensitivity, unfortunately they are sensitive to many different types of adsorbates and thus not chemically selective. Both problems are linked to the same source, namely the dependence of the sensing mechanism on the detailed device structure caused by any particular fabrication process, which are all beyond control in devices made of larger graphene sheets. These problems can therefore only be overcome by replacing such extended sheets by atomically well defined graphene nanoribbons (GNRs), for which then new paradigms for the detection mechanism need to be proposed. Tremendous progress has been made recently in the chemical synthesis of structurally well-defined and liquid-phase-processable, while destructive quantum interference (DQI) effects have been suggested as a new paradigm for logic devices based on GNRs with extremely low power consumption as well as a tool for increasing the selectivity of graphene-based gas sensors. This project aims to systematically investigate the relationship between the structure (or topology) of GNRs connected to a source and drain electrode on multiple contact sites and the resulting conductance, which crucially depends on the occurrence or absence of DQI effects. This is of fundamental interest in basic research on graphene, where the basic capability to synthesize GNRs of arbitrary shapes and sizes now inspires the question which particular structures would be of interest scientifically and for potential technological applications. Since there are different types of QI encountered at different length scales, it is scientifically of interest if there might be any connection of these different types of QI that can be drawn from scaling up topologies from the molecular scale to a mesoscopic length scale. In terms of applications chemical sensors are amongst the most interesting candidates, where Density Functional Theory based calculations will be employed in this project for an atomistic description of the source and drain electrodes as well as for the characterization of the charge transfer between particular types of adsorbate molecules and GNRs.