arXiv:2602.00406v1 [physics.app-ph] 30 Jan 2026

超灵敏通用单离子纳米探测器

Namita Narendra* 和Tillmann Kubis*

埃尔莫尔家族电气与计算机工程学院，普渡大学，西拉法叶，印第安纳州*47907*，美国

电子邮箱：nnarendr@purdue.edu；tkubis@purdue.edu

摘要

本文提出了一种基于碳纳米管（碳纳米管）的单离子探测器，并采用原子级量子输运模型对其性能进行了评估。该传感器无需分子特异性功能化即可检测任意离子类型，并可实现连续的实时离子监测。单个离子会暂时将该传感器的碳纳米管场效应晶体管的工作原理转变为共振隧穿二极管。本文给出的具体器件实例表明，单个离子可使源漏电流增大5个数量级。

单离子传感对于多种应用至关重要，例如检测皮摩尔浓度的生物标志物，[1–3] 检测痕量重金属离子，[4,5] 或用于纳米尺度量子应用。[6,7] 将离子传感器缩小至与分子相当的尺寸，提高了灵敏度，使单离子传感成为可能。[8–11] 最先进的离子纳米传感器，例如纳米孔[12–14]和纳米线晶体管，[15,16] 凭借其无标记实时传感能力而备受关注。然而，这些纳米传感器大多需要针对特定离子类型进行功能化。[17–19] 迄今仍未开发出灵敏度足以检测单个离子的通用离子传感器。

本文提出了一种基于碳纳米管场效应晶体管（碳纳米管场效应晶体管）的超灵敏单离子探测器概念。碳纳米管传统上被提

出作为化学传感器，通过表面反应和吸附来检测电导率的变化。[20–22] 与此不同，我们将碳纳米管用作离子通道，将离子传播限制在一维碳纳米管内部，但允许离子持续传播，而不会在碳纳米管表面发生物理吸附或化学吸附。因此，碳纳米管离子传感器可实现非破坏性离子传感。由于无需离子特异性功能化，任何进入碳纳米管的离子都会被检测到。该碳纳米管传感器能够检测两种极性的离子，并与纳米器件典型的信号增强电子器件兼容。[23]

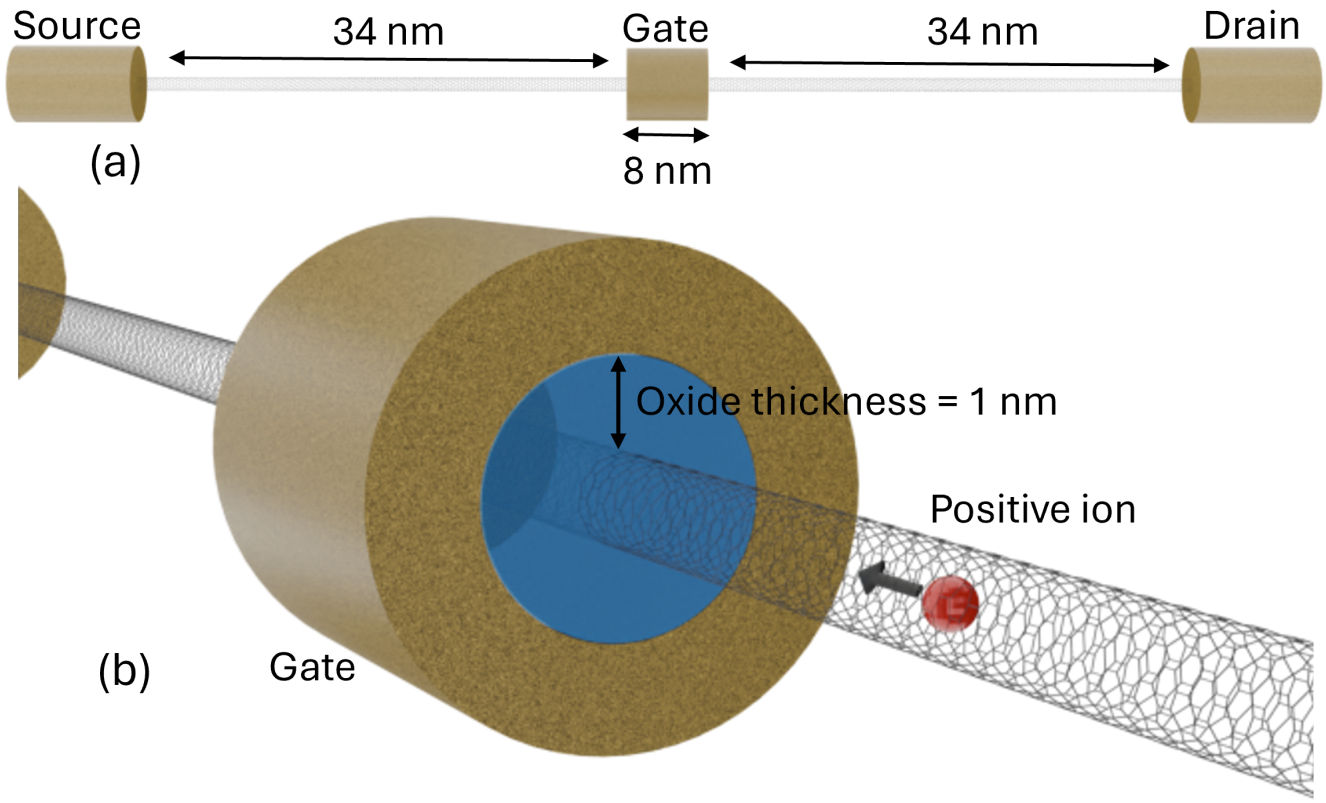

图1：基于碳纳米管的单离子探测器示意图：(a)中的侧视图显示了正文所述特定碳纳米管场效应晶体管结构的尺寸。如(b)所示，当碳纳米管沟道内的离子进入栅极区域时，即可被探测到。

所提出器件的核心是图1中的半导体碳纳米管场效应晶体管结构[24,25]，用于检测穿过碳纳米管沟道的离子。当离子足够接近栅极区域时，它会使碳纳米管场效应晶体管转变为共振隧穿二极管（RTD）：[26]离子的吸引电荷会在碳纳米管中形成离散的量子点态。电子或

空穴在穿越栅极区域的势垒时，可以利用这些量子点态实现共振隧穿。将栅极电压调至使共振隧穿达到最大值时，这一过程会使碳纳米管器件的源漏电流（I_{ds}）改变数个数量级。对于正离子（负离子），碳纳米管场效应晶体管将配置为 n 型（p 型）工作模式。沟道栅电极采用全环绕栅电极[24]，以实现最高的离子灵敏度。背栅电极[27] 用于控制有效掺杂密度和掺杂类型。如有需要，碳纳米管入口处的电场可将离子引导至碳纳米管沟道[28] 中。

本文呈现的所有电子输运结果，均通过纳米器件仿真工具 NEMO5 中的非平衡格林函数（NEGF）实现求解。[29]电子按照文献 30 中的原子表示进行离散化。Dyson 方程和 Keldysh 方程中的电子能量采用自适应方式离散化，以可靠地解析离子诱导电子共振以及碳纳米管场效应晶体管的带边。[31] 通过迭代求解 NEGF 方程与非线性泊松方程，确保电荷自洽性。[32] 泊松方程在 libMesh 的有限元网格上求解，[33] 该网格针对碳纳米管和离子的原子几何结构，在三个维度上进行了相应调整。源极和漏极接触按欧姆接触处理，而栅极接触则作为狄利克雷边界条件，并围绕碳纳米管呈圆柱对称。根据文献 34 中的 NEGF 方法，显式求解所有电子的电荷分布，包括深能级价带电子和部分填充导带中的电子。由此，对于每种电压和离子位置，均显式考虑不参与输运的价带电子所产生的静电屏蔽。这样便无需定义碳纳米管表面内外具有高度各向异性的介电屏蔽常数。因此，泊松方程中的介电常数设为真空的介电常数。在泊松方程中，离子表示为点电荷，仅通过静电作用与碳纳米管电子相互作用。

以n型半导体（11,0）碳纳米管场效应晶体管（直径为8.

7 Å）的传感器概念为例，在室温下进行说明。采用非平衡格林函数（NEGF）对碳纳米管场效应晶体管中的76 nm部分进行显式求解，其余均匀碳纳米管则采用开放边界条件。长度为8 nm的圆柱形栅极以长度为8 nm的本征碳纳米管区段为中心，该区段两侧分别为长度为34 nm的源极区和漏极区，掺杂浓度为1.5×10^{19}cm^{-3}的n型。这一掺杂浓度对应的电子密度为0.16 e^{-}/nm，处于实验测量范围内。[35] 漏源电压（V_{ds}）设为0.05 V。

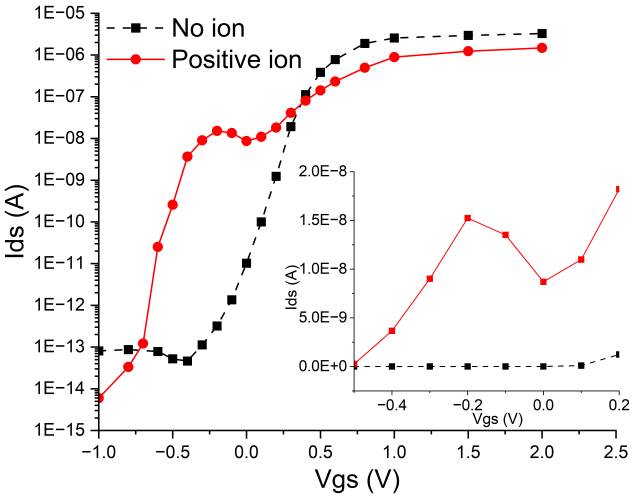

图2：图1所示单离子探测器在栅极下方碳纳米管沟道中有（红色实线）和无（黑色虚线）正离子时的漏源电流密度。栅极下方电荷为1 e的离子将器件性能从标准场效应晶体管特性切换为共振隧穿二极管特性。二极管的负微分电阻在线性刻度插图中予以突出显示。在所考虑的器件中，传感器的最高灵敏度出现在栅极偏压为-0.2 V时二极管电流密度峰值附近。

图2展示了在两种器件情形下，漏极电流 I_{ds} 随栅极电压（V_{gs}）的变化：碳纳米管场效应晶体管中无离子（黑色虚线），以及栅极区域中心存在正离子（红色实线）。电流-电压特性的对比表明，碳纳米管沟道中的正离子可有效地将碳纳米管场效应晶体管转变为碳纳米管基共振隧穿二极管：含离子的碳纳米管场效应晶体管，其电流-电压特性在栅极电压为 -0.2 V 时的电流最大值之后立即呈现明显的负微分电阻（图2插图中突出显示）。正离子会形成一个具有共振能级的量子阱，如图所示

详见图3：

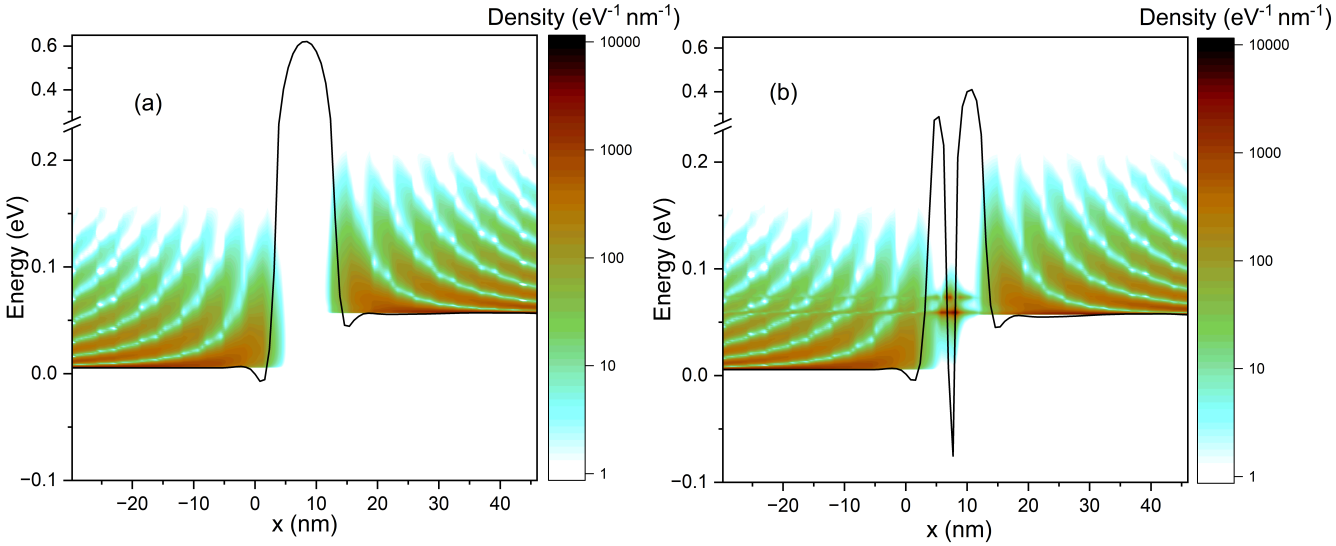

图3：在共振栅极电压为 -0.2 V 时，图1所示碳纳米管表面沿线的导带能量（曲线）以及空间和能量分辨的电子密度等高线图：(a) 碳纳米管中无离子；(b) 一个正离子位于栅极下方、碳纳米管沟道中央的 7.5 nm 处。栅极的范围为 4.2 nm 至 12.2 nm。

图3展示了在栅极电压为 -0.2 V 时，无离子 (a) 和碳纳米管沟道中存在正离子 (b) 两种情况下，位置分辨和能量分辨的电子密度等高线图。两幅图中的实线均表示相应的有效导带边缘随位置的变化。图3(a)中的导带边缘类似于具有本征栅极区域的 n型场效应晶体管的典型势分布。[36] 在给定的 -0.2 V V_{gs} 下，碳纳米管场效应晶体管实际上处于关断状态，电子在栅极势垒处被完全反射。这导致了图3(a)中能量和位置分辨密度的干涉图样。相比之下，正离子会在栅极势垒中部形成一个量子阱，从而产生典型共振隧穿二极管双势垒轮廓。[26] 图3(b)中栅极区域（4.2 nm 至 12.2 nm 之间）谱函数的极大值对应于该诱导量子阱的量子限域态。对于所示的 -0.2 V V_{gs} ，第一个量子限域态与碳纳米管源极侧的导带边缘（50 meV 处）对齐。这种对齐使电子能够共振隧穿通过栅极区域，从而维持比

无离子的碳纳米管场效应晶体管情况。相关量子限域态的线宽决定了共振隧穿二极管电流-电压共振的高度和宽度。[26]

因此，当栅极电压设为碳纳米管共振隧穿二极管的共振电压（此处为 V_gs=-0.2V）时，所提出的单离子传感器具有最高灵敏度：当沟道中没有离子时，传感器处于关闭状态，I_{ds} 消失。当栅极区域内有离子时，传感器转变为处于共振条件下的碳纳米管共振隧穿二极管，即保持较高的I_{ds}。

图4显示了 I_{ds} 随离子沿碳纳米管轴的位置变化的情况。从图中可以看出，只有当离子位于栅极区域内（由垂直线标出）时，离子才会引发源漏电流。

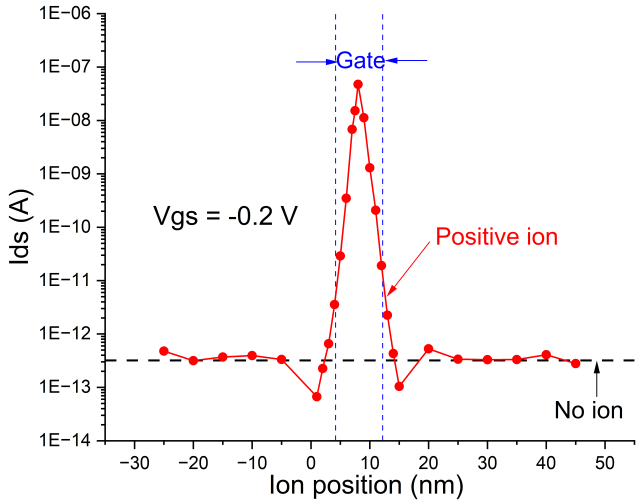

图4：图1所示碳纳米管传感器的电流密度随离子位置的变化。离子位于沟道中央，并沿碳纳米管轴移动；栅极电压为 -0.2 V。实线仅用于引导视线。水平虚线表示沟道中没有离子时的漏极电流。垂直虚线表示栅极区域。

栅极区域中心的离子会诱导出量子限域态，这些态环绕整个碳纳米管周向；如图 5 所示，图中展示了能量为 $E = 0.059$ 电子伏特的第一个量子限域态。

总之，本文介绍并定量评估了一种新型的基于碳纳米管的单离子探测器。与传统的碳纳米管传感器不同，所提出的器件无需功能化，即可用作通用离子探测器。当碳纳米管沟道中没有离子时，该传感器的行为类似于碳纳米管

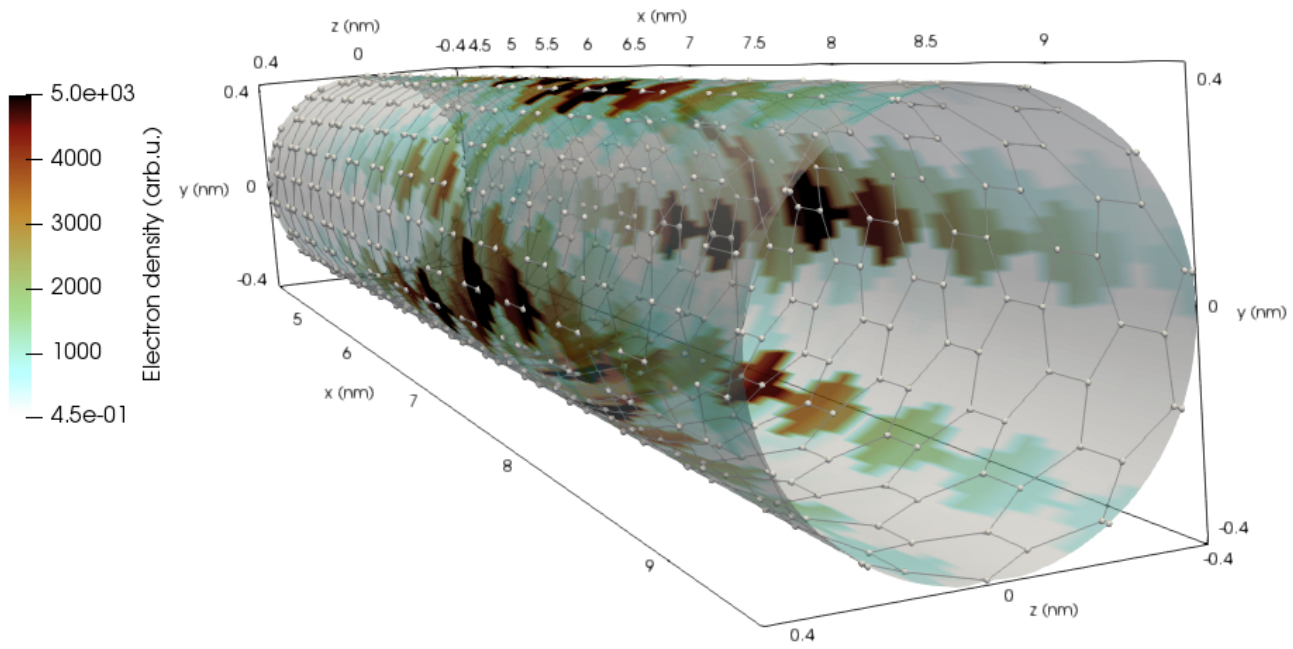

图5：图3(b)中 $E = 0.059\ eV$ 处第一个离子诱导量子限域态的电子密度在碳纳米管表面上的投影等高线图。正离子位于碳纳米管中心轴x=7.5 nm处。

场效应晶体管。当栅极区域下方的碳纳米管沟道中存在单个离子时，其库仑势会使电子器件行为从场效应晶体管转变为共振隧穿二极管。离子离开栅极区域后，传感器便恢复场效应晶体管的行为。本文所举的具体传感器示例预计可实现 5 个数量级的信噪比。这种超灵敏单离子传感器有望推动生物医学、环境和量子应用领域取得突破。

致谢

计算资源由普渡大学的Negishi研究计算集群（RCAC）提供。作者还感谢Manas Pratap协助绘制图表并提升本研究的视觉质量。

参考文献

(1) Visser, E. W.; Yan, J.; van IJzendoorn, L. J.; Prins, M. W. 利用颗粒迁移率传感实现单分子分辨率的连续生物标志物监测。《自然通讯》**2018年**, *9*, 2541。

(2) Raveendran, M.; Lee, A. J.; Sharma, R.; W¨alti, C.; Actis, P. 用于单分子生物传感的DNA纳米结构理性设计。《自然·通讯》**2020年**, *11*, 4384.

(3) Zou, J.; Bai, H.; Zhang, L.; Shen, Y.; Yang, C.; Zhuang, W.; Hu, J.; Yao, Y.; Hu, W. W. 用于生物标志物检测的离子敏感场效应晶体管生物传感器：当前进展与挑战。《材料化学杂志*B*》**2024年**,*12*, 8523–8542.

(4) Shtenberg, G.; Massad-Ivanir, N.; Segal, E. 利用纳米结构多孔硅生物传感器检测水中的痕量重金属离子。《分析家》**2015年**,*140*, 4507–4514.

(5) Si, L.; Wu, Q.; Jin, Y.; Wang, Z. 食品样品中痕量重金属离子检测的研究进展。《化学前沿》**2024年**, *12*,1423666.

(6) Yoo, J.; Kim, H.; Kim, H.; Kim, Y.; Choi, T. 基于囚禁离子的纳米尺度量子传感。《纳米汇聚》**2025年**, *12*, 12.

(7) Bonus, F.; Knapp, C.; Valahu,C.; Mironiuc, M.; Weidt,S.; Hensinger, W. 磁场梯度中的超灵敏单离子电测量。《自然·物理》**2025年**, 1–7.

(8) Nakajima, A. 单电子晶体管在生物分子和离子传感器中的应用。《应用科学》**2016年**,*6*, 94.

(9) Gooding, J. J.; Gaus, K. 单分子传感器：定量分析的挑战与机遇。《应用化学国际版》**2016年**,*55*, 11354–11366.

(10) Baaske, M. D.; Vollmer, F. 在水溶液中与等离激元纳米棒相互作用的单个原子离子的光学观测。《自然·光子学》2016年, 10, 733–739.

(11) Bhardwaj, A.; Radha, B.; Varma, M.; Keerthi, A.; 等。通过切片术制造的二维纳米狭缝可实现单分子生物传感。Nanoscale 2025年, 17, 18605– 18613.

(12) Miles, B. N.; Ivanov, A. P.; Wilson, K. A.; Doˇgan, F.; Japrung, D.; Edel, J. B. 利用固态纳米孔进行单分子传感：新型材料、方法及应用。*Chemical Society Reviews* **2013年**, *42*, 15–28。

(13) Roozbahani, G. M.; Chen, X.; Zhang, Y.; Wang, L.; Guan, X. 金属离子的纳米孔检测：现状与未来方向。*Small Methods* **2020年**, *4*, 2000266。

(14) Graf, M.; Lihter, M.; Altus, D.; Marion, S.; Radenovic, A. 利用二硫化钼纳米孔对DNA进行横向检测。***Nano Letters*** **2019年**, *19*, 9075–9083。

(15) Hu, Q.; Chen, S.; Solomon, P.; Zhang, Z. 利用亚10纳米电双层栅控硅纳米线晶体管实现单电荷分辨率的离子传感。*Science Advances***2021年**, *7*, eabj6711。

(16) Li, J.; He, G.; Ueno, H.; Jia, C.; Noji, H.; Qi, C.; Guo, X. 利用硅纳米线基电路直接实时检测单个蛋白质。*Nanoscale* **2016年**, *8*, 16172–16176。

(17) Ahoulou, S.; Perret, E.; Nedelec, J.-M. 用于传感应用的硅纳米线功能化与表征：综述。*Nanomaterials* **2021年**, *11*, 999。

(18) Ren, R.; Zhang, Y.; Nadappuram, B. P.; Akpinar, B.; Klenerman, D.; Ivanov, A. P.; Edel, J. B.; Korchev, Y. 用于选择性单分子生物传感的纳米孔扩展栅场效应晶体管。《自然·通讯》 **2017年**, *8*, 586。

(19) Yao, X.; Zhang, Y.; Jin, W.; Hu, Y.; Cui, Y. 基于碳纳米管场效应晶体管的化学和生物传感器。*Sensors* **2021年**, *21*, 995。

(20) Schroeder, V.; Savagatrup, S.; He, M.; Lin, S.; Swager, T.M. 碳纳米管化学传感器。*Chemical reviews* **2018年**，*119*，599–663。

(21) Norizan, M. N.; Moklis, M. H.; Demon, S. Z. N.; Halim, N. A.; Samsuri, A.; Mohamad, I. S.; Knight, V. F.; Abdullah, N. 碳纳米管：功能化及其在化学传感器中的应用。*RSC Advances* **2020年**，*10*，43704–43732。

(22) Acharya, R.; Patil, T. V.; Dutta, S. D.; Lee, J.; Ganguly, K.; Kim, H.; Rand- ha wa, A.; Lim, K.-T. 基于单壁碳纳米管的光学纳米/生物传感器在生物医学应用中的作用：生物成像、疾病诊断和生物标志物检测。*Advanced Materials Technologies* **2024年**，*9*，2400279。

(23) Shim, J. W.; Gu, L. Q. 含单离子通道模块化芯片上的随机传感。*Analytical Chemistry* **2007**，*79*，2207–2213。

(24) Franklin, A. D.; Koswatta, S. O.; Farmer, D. B.; Smith,J.T.; Gignac,L.; Breslin,C. M.; Han, S.-J.; Tulevski, G. S.; Miyazoe, H.; Haensch, W.; 等人。碳纳米管互补环绕栅极晶体管。*Nano Letters* **2013年**，*13*，2490–2495。

(25) Lin, Y.; Cao, Y.; Ding, S.; Zhang, P.; Xu, L.; Liu, C.; Hu, Q.; Jin, C.; Peng, L.-M.; Zhang, Z. 缩放排列碳纳米管晶体管至亚10纳米节点。《自然电子学》**2023年**，*6*，506–515。

(26) Bowen, R. C.; Klimeck, G.; Lake, R. K.; Frensley, W. R.; Moise, T. 共振隧穿二极管的定量模拟。《应用物理学杂志》**1997**，*81*，3207–3213。

(27) Chiu, H.-Y.; Safron, N.; Passlack, M.; Chao, T.-A.; Su, S.-K.; Mao, P.-S.; Chou, C.-H.; Huang, H.-Y.; Wu, G.-Z.; Chen, C.-W.; 等人克服高度微缩 PMOS 和 NMOS 碳纳米管晶体管中的漏电与接触电阻挑战。*Nano Letters* **2025年**，*25*，3981–3988。

(28) Su, J.; Guo,H. 控制电场中单列水分子在碳纳米管内的单向传输。*ACS Nano* **2011**, *5*, 351–359。

(29) Steiger, S.; Povolotskyi, M.; Park, H.-H.; Kubis, T.; Klimeck, G. NEMO5：一种并行多尺度纳米电子学建模工具。*IEEE* 纳米技术汇刊 **2011**,*10*, 1464–1474.

(30) Neophytou, N.; Ahmed, S.; Klimeck, G. 含空位缺陷的金属碳纳米管的非平衡格林函数（NEGF）模拟。《计算电子学杂志》 **2007**,*6*, 317–320.

(31) Eiseman, P. R. 自适应网格生成。《计算机方法在应用力学与工程中的应用》 **1987**, *64*, 321–376.

(32) Birner, S.; Zibold, T.; Andlauer, T.; Kubis, T.; Sabathil, M.; Trellakis, A.; Vogl, P. Nextnano：通用三维模拟。*IEEE* 电子器件汇刊**2007**,*54*, 2137–2142.

(33) Kirk, B. S.; Peterson, J. W.; Stogner, R. H.; Carey, G. F. libMesh：一个用于并行自适应网格细化/粗化模拟的 C++库。《计算机辅助工程》**2006年**，*22*，237–254。

(34) Chu, Y.; Sarangapani, P.; Charles, J.; Klimeck, G.; Kubis, T. 用于半导体纳米器件的显式屏蔽全能带量子输运模型。《应用物理学杂志》**2018年**，*123*。

(35) Lee, C.-S.; Pop, E.; Franklin, A.; Haensch, W.; Wong, H. 亚 10 纳米尺度下碳纳米管场效应晶体管的紧凑型虚拟源模型——第一部分：本征元件。*IEEE Trans. Electron Devices*

(36) Dang, T.; Anghel, L.; Leveugle, R. 碳纳米管场效应晶体管基础与模拟。国际会议——

纳米技术集成系统设计与测试，2006。DTIS 2006。2006；第28–33页。

目录图

