

عنوان مقاله:

بررسی خواص الکترونی ترکیبات $Au/1$ و $Au/4$ دی تیول مولکول Au ، مولکول = بنزن، فنول، دی فنول

محل انتشار:

دومین همایش سراسری کاربردهای دفاعی علوم نانو (سال: 1390)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

اعظم پردل - دانشگاه پیام نور مشهد

محمد گرجی - دانشگاه جامع امام حسین ع

محمدرضا بنام - دانشگاه پیام نور مشهد

ناصر شاه طهماسبی - دانشگاه فردوسی مشهد

خلاصه مقاله:

محققان به تازگی توانستند با استفاده از مولکول بنزن ترانزیستور درست کنند ترانزیستور مولکولی که در نتیجه اتصال یک مولکول بنزن به دو گروه تیول و متصل شده به فلز است در این تحقیق به جای استفاده از مولکول بنزن از فنول که عنصری غیر سرطانزا است و خطرات آن از بنزن کمتر است استفاده شده است این روش مبتنی بر نظریه تابعی چگالی است که از کدنویسی Siesta استفاده شده است نتایج نشان میدهد که تغییرات انرژی گاف اندک است یعنی فنول رامیتوان جانشین بنزن در ساخت ترانزیستور نمود

کلمات کلیدی:

ترانزیستور مولکولی، چگالی حالتها، نظریه تابعی چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/229583>

