

عنوان مقاله:

مطالعه خواص الکترونی در اتصالات مولکولی طلا/گوگرد-متالوسن-گوگرد/طلا با استفاده از نظریه تابعی چگالی

محل انتشار:

اولین همایش بین المللی علوم و فناوری نانو (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

رقیه فرزادی - دانش آموخته گروه فیزیک دانشگاه مازندران، بابلسر

حسین میلانی مقدم - عضو هیات علمی گروه فیزیک دانشگاه مازندران، بابلسر

خلاصه مقاله:

در این پژوهش با استفاده از نظریه تابعی چگالی به بررسی ویژگیهای الکترونی وابسته به اسپین سیستمهای متالوسنی بر پایه فروسن با گروه عاملی گوگرد که به دو طریق به الکترودهای طلا متصل شده است می پردازیم. نتایج حاکی از آن میباشد که با آلایش مولکول فروسن با اتم کبالت سیستم پایداری شکل گرفته که باعث قطبش اسپینی بسیار خوبی در اطراف تراز فرمی شده است. به طوری که سیستم به حالت نیم فلز نزدیک شده است. همچنین تغییر جایگاه گروه عاملی گوگرد در اتصالات مولکول/الکتروود باعث افزایش چگالی حالتها در کانال اسپینی شده که میتواند بیانگر ترابرد بهتر الکترون در این قطعات باشد.

کلمات کلیدی:

خواص الکترونی، فروسن، قطبش اسپینی، گروه عاملی، نظریه تابعی چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1140959>

