National Congress on
Chemistry and nano-chemistry,
from research to national development

کنگره ملی
شیمی و نانو شیمی، از پژوهش تا توسعه ملی

نمایه سازی پروسدینگ مقالات برتر در پایگاه Thomson Reuters
چاپ ۳۰ مقاله برتر کنگره تحت book chapters در پایگاه Springer

محل برگزاری
۳ شهریور ۱۳۹۶

حضور و مشارکت ۵۰ دانشگاه ،انجمن و رسانه فعال علمی در بزرگترین رویداد داخلی حوزه شیمی و نانو شیمی کشور

Selected papers will be peer-reviewed as accepted book chapters from various themes in one edited volume to be published in one of our Springer Book Series

شماره مجوز ISC
۹۶۱۷۰-۶۰۳۰۱

ارزیابی اثر فاصله بین اتمی در رسانش الکترونی نانوسیم‌های سیلیکونی

سید محمد اعظمی [۱،۱]، سیده زینب موسوی محمره[۲].

۱- دانشگاه یاسوج گروه شیمی

Email: azami_sm@yahoo.com

۲- دانشگاه یاسوج گروه شیمی

Email: z.mousavi319@gmail.com

خلاصه

محاسبات Abintio در سطح محاسباتی HF و با مجموعه پایه 6-31G* برای ارزیابی فاصله بین اتمی در رسانش الکترونی نانوسیم‌های سیلیکونی به کار گرفته شده است. نانوساختارهای سیلیکونی با فاصله‌های بین اتمی متفاوت در سیستم‌های یک بعدی مورد بررسی قرار گرفتند. این نانوساختارها دارای تقارن‌های متفاوتی هستند و بسته به نوع تقارن، فواصل بین اتمی نیز متفاوت خواهند بود. هدف از این مطالعه، بدست آوردن فاصله‌ی مناسب، بین اتم‌های سیلیکون است که درآن فاصله بیشترین رسانش سیستم ملاحظه می‌شود.

کلمات کلیدی: رسانش الکترونی، نانوساختار، سیلیکون، HLG

مقدمه

نانوسیم یک سیم به ابعاد یک نانومتر (۱۰-۹ متر) است. در این مقیاس اثرات مکانیکی کوانتومی مهم هستند، از این رو این سیم‌ها به عنوان "سیم‌های کوانتومی" شناخته می‌شوند. انواع مختلفی از نانوسیم‌ها وجود دارد، از جمله فلز (به عنوان مثال، نیکل، Pt، Au) نیمه هادی (به عنوان مثال InP ، Si، GaN، و غیره) و عایق (به عنوان مثال، SiO2، TiO2) نانوسیم‌های مولکولی از تکرار واحدهای مولکولی یا ارگانیک (به عنوان مثال DNA) یا غیر معدنی (به عنوان مثال Mo6S9-xIx) تشکیل