

噻吩低聚物分子器件电输运特性的理论研究

Theoretical Study on Electronic Transport Properties of Oligothiophene Molecular Devices

摘要点击 310 全文点击 118 投稿时间: 2010-12-30 采用时间: 2011-3-13

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/02/194-198

中文关键词 [分子器件](#) [电输运性质](#) [噻吩低聚物](#)

英文关键词 [Molecular device](#) [Electronic transport property](#) [Oligothiophene molecule junction](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
李宗良	山东大学物理与电子科学学院, 济南250022	lizongliang@sdu.edu.cn

中文摘要

利用从头计算方法和弹性散射格林函数理论, 对不同噻吩低聚物分子的电输运性质进行理论研究. 结果显示, 由于分子几何结构对称性的不同使得末端基团跟金电极的连接方式不同, 导致了分子与电极间耦合常数以及分子轨道的扩展性不同. 出现了同系列的噻吩低聚物分子中较长的分子比较短分子导电性更好的反常现象.

英文摘要

Based on the first-principles computational method and the elastic scattering Green's function theory, we have investigated the electronic transport properties of different oligothiophene molecular junctions theoretically. The numerical results show that the difference of geometric symmetries of the oligothiophene molecules leads to the difference of the contact configurations between the molecule and the electrodes, which results in the difference of the coupling parameters between the molecules and electrodes as well as the delocalization properties of the molecular orbitals. Hence, the series of oligothiophene molecular junctions display unusual conductive properties on the length dependence.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计