

عنوان مقاله:

بررسی کمیت های شیمی محاسباتی در سیستم نانوسیم سیلیکونی خالص و دارای نقص جهت استفاده به عنوان بیوسنسور

محل انتشار:

ششمین کنفرانس بین المللی مطالعات میان رشته ای در نانو فناوری (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

راحله معصومی فرد - بخش شیمی دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

محسن افتاده - بخش شیمی دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

علی کریمیان فرد - بخش شیمی دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

ادغام فناوری نانو با روش های مولکولی فرصت های زیادی را برای طراحی و ایجاد انواع جدیدی از دستگاه هایسنسوری فراهم می کند. در این کار، هدایت نانوسیم های سیلیکونی خالص و دارای نقص به واسطه ترابرد الکترونی (transport electronic) که مسئله چالش برانگیزی در سال های اخیر می باشد با در نظر گرفتن ویژگی های ترابردالکترونی با استفاده از نظریه GS-DFT و کد محاسباتی Quantum Espresso بررسی شد. نتایج نشان می دهد کهشکاف انرژی برای نانوسیم سیلیکونی خالص غیر مستقیم است. در ناحیه هدایت، نوارهای انرژی با پهنای باند حدود $2/2$ تا 3 eV و پراکندگی زیاد دیده می شود. هیچ رسانایی کوانتومی در محدوده انرژی شکاف باند وجود ندارد. نوارهای رساناییکوانتومی در جایی اتفاق می افتند که باندهای انرژی دارای پراکندگی بالایی هستند. شکاف نواری نانوسیم سیلیکونی داراینقص و آلایندهی مستقیم است که این تغییرات تاثیر ب سزایی در هدایت کوانتومی دارد و از آن می توان در بیوسنسورهایمحیط زیستی استفاده کرد.

کلمات کلیدی:

نانوسیم سیلیکونی، نانوفناوری، شیمی محاسباتی، کوانتوم اسپرسو، بیوسنسور، ترابرد الکترونی، هدایت

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1719251>

