الخلاصة

الجزيئات تعمل كموصلات في الألكترونيات الجزيئية وهي مرتبطة الى أقطاب معدنية التي تعمل كمصدر ومستنزف. النظام المأخوذ بنظر الأعتبار هو جزيئة بايرين مرتبطة الى قطبين معدنيين. تم حساب خواص النقل لجزيئة البايرين المنفردة بأربعة هندسيات أتصال بواسطة أستخدام النموذج النظري ذات الحالة المستقرة. أحتمالة النفاذية حسبت لأربعة هيئات وهي تركيب (1,8) و تركيب (1,7) و تركيب (1,5) وتركيب (1,4) . التيار الكهربائي والخواص الكهروحرارية حسبت تحت تسليط فولتية بوابة على جزيئة البايرين. يتم ضبط الخواص الكهروحرارية وخواص نقل الألكترون بواسطة التداخل الكمي وهندسية الأتصال وفولتية البوابة. يحصل السلوك المتباين وإنشطار الرنينيات في طيف النفاذية نتيجة لتسليط فولتية البوابة على جزيئة البايرين.

خواص نقل الألكترون والخواص الكهروحراية درست تحت تأثير الأزدواج المباشر بين المانح والقابل. يوفر الأزدواج المباشر طريق مباشر لنقل الألكترونات بين المانح والقابل, فضلا عن نقل الألكترونات عبر الجزيئة.

تم فحص نقل الألكترون والخواص الكهروحرارية لجزيئة البايرين المنفردة تحت تأثير التشويب بالكبريت والنتروجين. الخواص الكهروحرارية حسبت تحت تسليط فولتية البوابة على جزيئة البايرين. يمكن ضبط خواص نقل الألكترون والخواص الكهروحرارية بواسطة نوع الشائبة وموقع التشويب. فجوة الطاقة تضيق للأنظمة المدروسة بعد التشويب بالكبريت, كما أنها تضيق بشكل كبير عند التشويب بالنتروجين. الحصول على القيمة العظمى للعامل ZT=0.4 عند التشويب بالكبريت عند الموقع 2 , التي قد تكون جهاز كهروحراي فعال.