

الخلاصة

في هذا العمل، نقدم دراسة نظرية مقارنة للخصائص الكهربائية والحرارية لتراكيب مختلفة من المونومر، والدايمر، والترايمر للفيروسين. توضح نتائجنا أن تأثيرات نوع الرابطة بين وحدات الفيروسين في الدايمر والترايمر هي اسباب رئيسية في التحكم في التداخل الكمي (QI) وتحسين الخصائص الحرارية الكهربائية لهذه الوصلات الجزيئية. تم تحقيق أعلى قيمة حرارية كهربائية في بنية ثلاثي الفيروسين T2. في جميع الأوليغوفيروسين التي درسناها، كانت أعلى قيمة لـ ZT التي حصلنا عليها هي 16 في بنية ثلاثي الفيروسين T4. مما يجعل هذه الهياكل مرشحة جيدة جدًا للعمل كمعزلات حرارية كهربائية ومواد مناسبة للعديد من التطبيقات الحرارية الكهربائية.