

分子电子学器件研究进展一瞥

陈 灏[†]

(复旦大学物理系 上海 200433)

摘 要 文章综述了作为硅半导体 CMOS 器件的下一代电子学器件——分子电子学器件的研究进展. 介绍了分子电子学器件的原理, 分子电子学器件的理论与实验分歧的解决情况, 分子电子学器件涉及的诸多量子力学效应, 以及在分子晶体管研究上实验和理论的最新成果.

关键词 分子晶体管, 扫描隧道显微镜, 自组装技术, 密度泛函理论, 非平衡态 Green 函数方法

A brief survey of molecular electronic devices

CHEN Hao[†]

(Physics Department, Fudan University, Shanghai 200433, P. R. of China)

Abstract A brief review is presented of the development of molecular electronic devices, the next-generation devices after silicon CMOS. We describe the basic principles, the elucidation of discrepancies between theoretical and experimental results, the underlying quantum mechanics phenomena, and recent theoretical and experimental advances in the area of molecular transistors.

Keywords molecular transistor, scanning tunneling microscope, self-assembly technique, density functional theory, non-equilibrium Green's function methods

1 引言

最近几十年来, 硅基半导体器件几乎是沿着 Moore 定律飞速发展, 每 18 个月芯片集成度就增长一倍, 成为现代科技的一项奇观. 器件工程师们还在继续努力, 使新技术成就不断涌现. IBM 公司实现了 3 维芯片堆叠技术, 与 2 维芯片相比, 增加百倍的信息通道. 他们最新研制的 Power6 芯片采用自组装技术, 用真空间隙在 32nm 芯片上隔离导线, 使芯片性能提高 10%—15%. Intel 公司 45nm 芯片已经面市, 其生产的相变内存芯片可能取代传统内存. 尽管上述技术创新不断扩展着硅基半导体器件的寿命, 但是大家都知道, 由量子力学原理, 电子波长就大约有 10nm, 再加上芯片功耗和新工艺的经济成本等因素, 最终将制约硅半导体的集成度, 使之有个不可逾越的发展极限. 因而从下向上构建新一代器件成为当前学术研究的一个热点, 比如 DNA 生物器件, 碳纳米管器件和分子电子学器件等都在竞相发展. 此外量子计算则从另一方面寻求突破. 2007 年 8 月底, IBM 公司在 Science 期刊上同时发表两篇研究论

文, 介绍了他们在单原子自旋器件和单分子开关器件研究上的最新进展. 如果分子器件的设想得以实现, 人们将在原子和分子层次上传递数据、作计算, 那么笔记本电脑将可具有现今顶级超级计算机的功能, 手机一类便携电子器件可以存贮上万部高清电影让人们随时欣赏, 前景十分诱人.

分子电子学器件是一个快速发展的领域, 许多新的理论和实验工作正不断涌现, 给我们带来惊喜. 由于存在大量重要成果, 囿于作者涉猎所限, 难免有所疏漏. 仅希望能对读者走向斑斓多彩的分子器件世界有所助益.

2 分子器件原理

许多含 π 键的有机分子可以用作分子电子器件, 苯分子是一个典型的例子. 苯分子中 6 个碳原子 (C) 构成一个正 6 边形的环, 每个碳原子外接一个

* 国家自然科学基金(批准号: 10574024, 90606024), 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2006 CB921300)资助项目

2007-10-15 收到

[†] Email: haochen@fudan.edu.cn

氢原子(H)、碳原子环构成共轭 π 键具有良好的导电性能.苯分子线度(两个最远的氢原子间距)约为0.5nm.化学家可以把这两个在一直条线上的氢原子用硫原子(S)取代,以便与金(Au)导线相连接.用量子力学原理可以计算得到孤立的苯硫醇分子的电子能级是一系列分立能级:电子从低能级往上占据,最高被占据分子轨道的能级称为 E_{HOMO} ,它上面就是最低未占据分子轨道的能级 E_{LUMO} .把苯分子通过金导线接在直流电源上形成回路,如果 E_{HOMO} 或 E_{LUMO} 落在左右金导线的电子费米能级 $\mu_1 = E_{\text{F}} + \frac{1}{2}eV$ 和 $\mu_2 = E_{\text{F}} - \frac{1}{2}eV$ 之间,就会有电流流过分子,同时分子能级会发生移动和显著展宽.这种展宽描述了分子与导线的耦合. E_{LUMO} 导电,属于电子导电,而 E_{HOMO} 导电,则属于空穴导电.有机分子就是借助这些分子能级进行导电.通常可用外加光、电场调控分子的部分结构,或用横向门电压来改变分子能级位置,进而达到控制分子电流的目的.

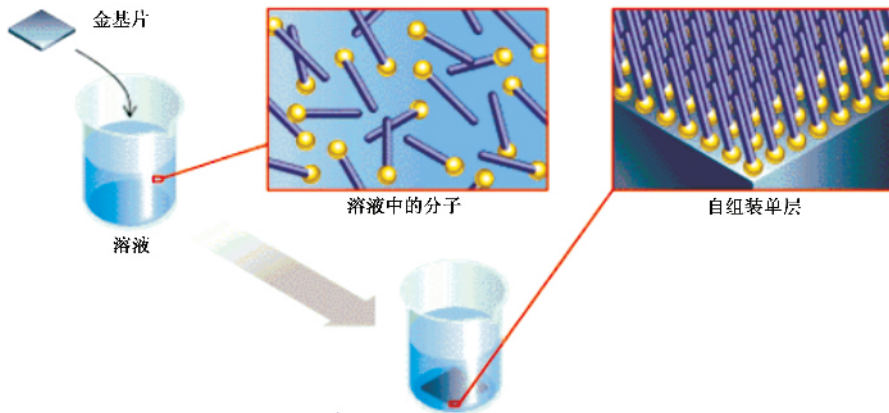


图1 苯硫醇分子在金基片上构成自组装单层^[2]

测得0—5V电压范围内的苯硫醇分子的伏安曲线(类似半导体的势垒曲线)和微分电导曲线,证明了有机分子具有导电性,揭示出分子器件巨大的潜在应用前景(图2).由于分子器件的尺度仅为光波的千分之一,现代显微镜也无法观察实验的细节,只能用STM、非弹性电子隧道谱仪(IETS)等进行间接观测.而且,测量仪器也可能对分子器件的行为产生干扰.为了弥补实验测量的不足,也为了证明和解释实验上测得的分子电导行为,分子电导的第一性原理计算就成为重要的理论手段.第一个第一性原理的计算结果发表于2000年.美国Ventra M D等人用平面波表象解量子力学Lippman-Schwinger方程,自洽地计算得到苯硫醇分子的伏安和微分电导曲线,其形状与实验结果类似(图3)^[4].但是计算得到的电

3 分子器件研究进展和我们的工作

3.1 分子电导的第一性原理计算,理论与实验分歧的解决

尽管分子二极管整流器的理论构想早在1974年就由Aviram A和Ratner M提出来了^[1],但是直到上世纪末,由于扫描隧道显微镜(STM)和自组装(SAM)技术、劈裂结(break junctions)技术的发展,才使分子器件的实验和理论研究得到迅速的发展.自组装技术(self-assembly)如图1所示^[2].把一片金基片放入苯硫醇溶液中,苯硫醇分子会自发地通过硫原子以一定的角度化学吸附在金基片上,构成自组装单层.美国耶鲁大学Reed M A等人于1997年首先实现了对苯硫醇分子的电学测量^[3].他们把苯硫醇分子一端用自组装的办法化学吸附在金基片上,另一端与STM相接触,构成电流回路.上述实验

流值比实验大2个数量级.2001年,加拿大McGill大学Guo H研究组首先用密度泛函理论(DFT,以西班牙Siesta开放软件为基础)计算分子的电子结构,然后用非平衡态Green函数(NEGF)方法把宏观导线作为自能计入分子的哈密顿量,计算碳纳米管的电导曲线^[5].DFT和NEGF结合的方案基本上奠定了分子纳米器件量子输运的第一性原理计算框架,为学术界广泛采用.此后,2002年美国Purdue大学Datta S研究组^[6]、2003年美国西北大学Y. Xue和Ratner M A^[7]把DFT方法(以商业软件Gaussian为基础)和NEGF方法相结合,重新计算了苯分子伏安和微分电导曲线(图4).尽管他们的方法采用局域的Gauss基函数,比较适合处理含有分子-电极界面的问题,而且对金属导线考虑了spd波,比前人用

平面波方法又仅考虑 s 波和胶体模型有所改进. 但是得到的结果仍然未能解决理论电流比实验结果大 2 个数量级的问题.

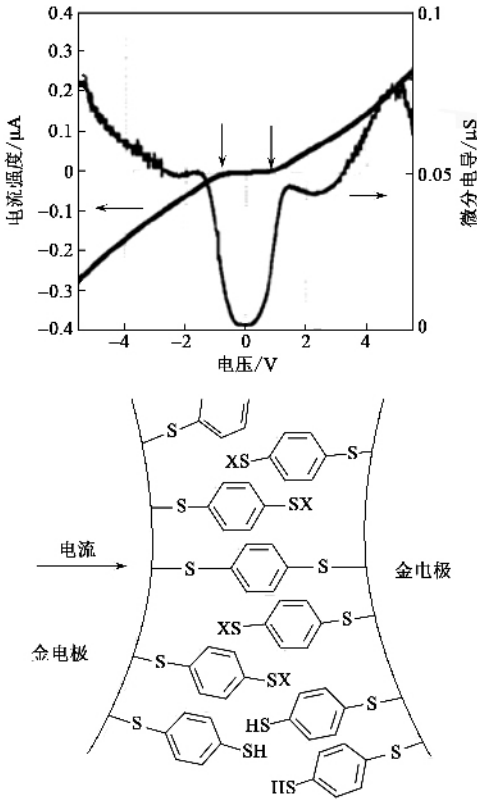


图 2 Reed 等人测得苯硫醇分子的伏安和微分电导曲线^[3](图中 HS(氢硫)和 SH(硫氢)都表示硫连接苯环中的碳原子,然后硫原子接氢. SX, XS 与 SH, HS 类似,不过这里是 X(某种有机分子团)代替氢)

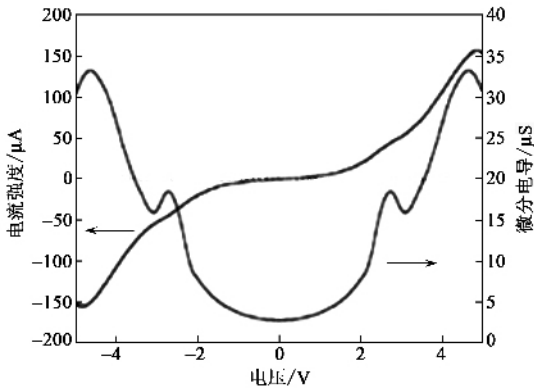


图 3 Ventra 等人计算的苯硫醇分子的伏安和微分电导曲线^[4]

DFT 理论作为单电子近似的近代理论,是分子和固体电子结构和总能量计算的重要工具. 但是, DFT 理论主要适用于多粒子体系的基态,对于涉及激发态(LUMO 以上的空态)的量子输运问题是不够好的. 一般研究认为,分子电流曲线和微分电导曲线的形状反映了分子的电子结构,理论与实验达成

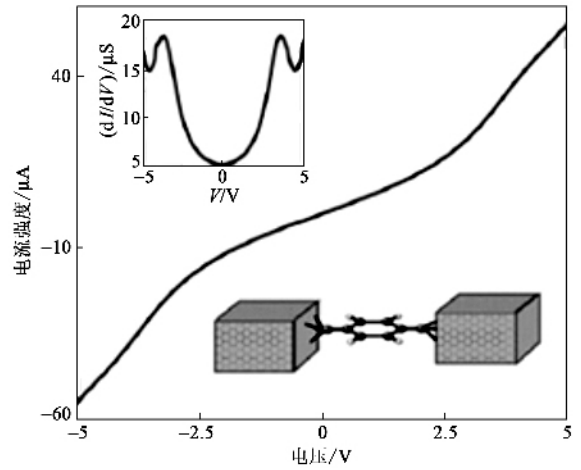


图 4 Datta 研究组用密度泛函理论(DFT)+非平衡态格林函数(NEGF)方法计算的苯硫醇分子的伏安和微分电导曲线^[6]

了一致. 而微观分子与和宏观导线之间的耦合是理论处理的难点,尽管 Datta 等人的工作把 DFT 与紧束缚近似的叠代法相结合,较严格地得到了导线的表面 Green 函数和自能,但理论结果仍未能得到实验足够的佐证.

这个困扰学术界多年的理论与实验结果相差 2 个数量级的问题,被 Reichert J 等人在 2002 年解决了^[8]. 他们改进了实验中分子-电极的耦合,使得图 5 中有机分子 1,4-Bis(2-O-para-mercaptophenyl)-ethynyl-2-acetyl-amino-5-nitro-benzene(中间苯分子两侧分别接着施主、受主分子功能团)与电极的耦合也几乎达到化学吸附的水平. 上述分子含 3 个苯分子串联,其电流应该比单苯分子器件的电流小得多,但是他们测得电流在 1V 的偏压下,达到 0.1 μA,竟然比过去实验测量得到的单苯分子的相应电流大得多(图 5). 我们研究组采用与 Datta 类似的计算方案,先计算了单苯硫醇分子的伏安曲线和微分电导曲线(图 6)^[9],所得结果与 Datta 类似,验证了程序的正确性. 然后我们计算了 Reichert 实验中有有机分子的伏安曲线,与实验符合,说明第一性原理计算基本正确,2 个数量级差别问题得到解决^[10].

测量所得的分子 I-V 曲线在 0 电压附近有一个不小的零电流区,称为电导隙(conductance gap),但是计算结果中相应区域的 I-V 曲线斜率大了一些,显示某种金属性,与实验不符. 这是因为通常 DFT 理论的交换关联相互作用中把电子本身的贡献也计入了,扣除这部分贡献就较好地解决了这个问题,这称为自相互作用修正(SIC)^[11].

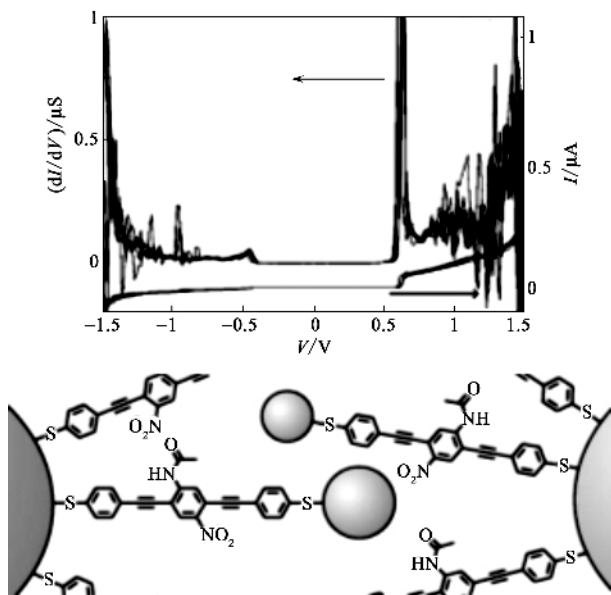


图5 改进 S - Au 耦合后,测得 30K 低温下分子电流^[8]

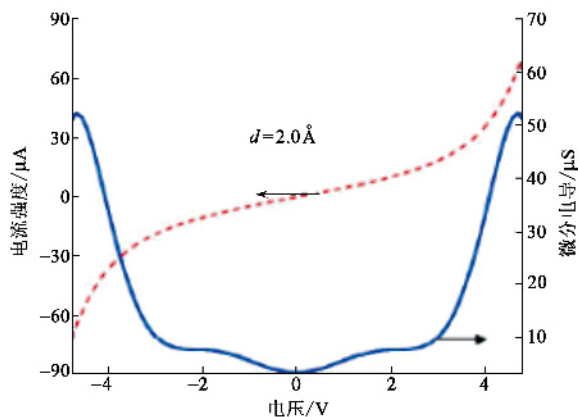


图6 本研究组用 DFT + NEGF 方法计算的苯硫醇分子的伏安和微分电导曲线^[9](图中 d 为硫原子 S 与金表面的距离)

3.2 分子电子学器件的量子效应

人们对分子电子学器件的浓厚兴趣不仅在于其具有的应用潜力,而且在于可能通过研究分子器件加深对基本物理化学原理的理解,特别是分子所展示的纳米器件的各种量子行为.分子作为一个更小的量子点,可以在比半导体量子点更高的温度下展现多体效应和介观效应.

1964 年,日本人近藤发现的 Kondo 谐振,揭示了稀磁合金中电阻极小的反常现象^[12].这种多电子现象由磁性杂质的局域 d 电子自旋和电极中导带 s 电子自旋间交换相互作用产生.当杂质中电子自旋向上时,只有自旋向下的传导电子可以进入量子点,使费米能级处态密度产生尖锐的共振峰,导致电阻、磁化率、比热容等物理量发生反常.Kondo 效应涉及多体电子关联,是广为关注的量子力学问题.为了减

少传导电子的屏蔽作用,在半导体量子点中要在 1K 以下温度才能观察到 Kondo 效应,使用分子则可以提高到 20—30K.图 7 是哈佛大学 Liang 等人对含双钒有机分子测量得到的 Kondo 峰^[13].图中最高峰对应 0.3K,最低峰对应 20K.分子电子学器件为更深入地研究 Kondo 效应提供了新机会.含重金属的有机分子把电子运输、电子关联、电子自旋和杂质态等结合在一起,是很有发展前途的分子器件.

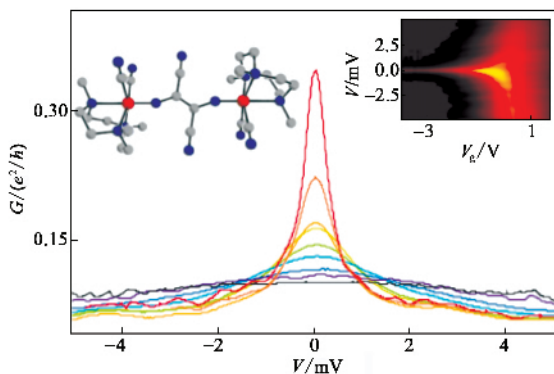


图7 含双钒(红点)有机分子 Kondo 峰高度随温度降低^[13](图中 G 为电导, V_g 为门电压)

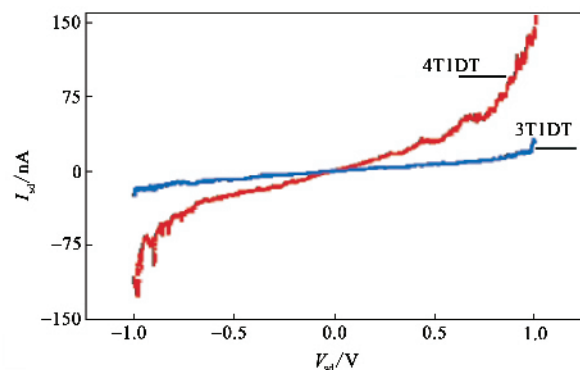


图8 噻吩分子链反常电导行为^[14](其中 I_{sd} 为源漏电流强度, V_{sd} 为源漏电压)

在分子电子学器件等纳米结构中,电子的输运性质服从量子力学的薛定谔方程,不再遵循经典的欧姆定律.2005 年,美国 Arizona 州立大学 Tao N J 研究组测量发现噻吩分子链((n)T1DT)在 0—1V 电压下,电导反常,违背欧姆定律.4 个噻吩环组成的分子链的电导比 3 噻吩链电导大(图 8)^[14].我们组对 2—5 个噻吩分子链作了第一性原理计算,结果证实了噻吩链在 0—1.2V 低电压下,电导反常;在 1.2—3.0V 电压区间,电流大小随噻吩链长度呈振荡行为;当电压大于 3V 时,噻吩链电导趋于经典结果,短噻吩链具较大电流.我们还发现另外两种有机分子链具有与噻吩链不同的电导行为.PPh(n)DT

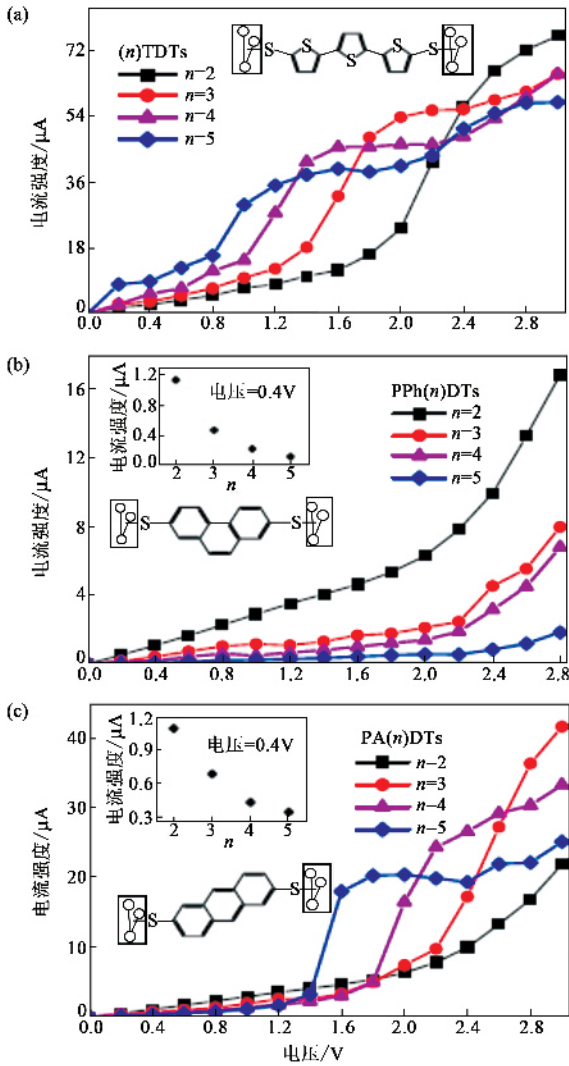


图9 3种分子链不同的电导行为^[15] (图(a)中的 (n) 噻吩分子数,图(b)和(c)中的 (n) 为DT分子数)

分子链电流类似于经典结果,而PA(n)DT则与噻吩分子链相反,0—1.2V低电压下,呈经典行为,2.6V以上呈反常电导,中间区域仍为振荡行为.不同分子链的分子能级分布不同,因而具有不同的电导行为.实际上,所有这些电导都是服从量子力学规律的,差别仅在于与欧姆定律的差别大小而已(图9)^[15].

复旦大学物理系杨中芹副教授与Di Venira合作,用第一性原理方法计算了分子晶体管态密度(图10)和表面原子吸附对运输的影响等问题^[16].

有机分子导电状态下,分子晶格振动与导电电子的相互作用,即电声子相互作用,也是一个需要关注的问题.通常可用非弹性电子隧穿谱(IETS)测定.通过同时产生调制和锁相参考信号,IETS可以直接测得一次谐波信号 dI/dV 和二次谐波信号

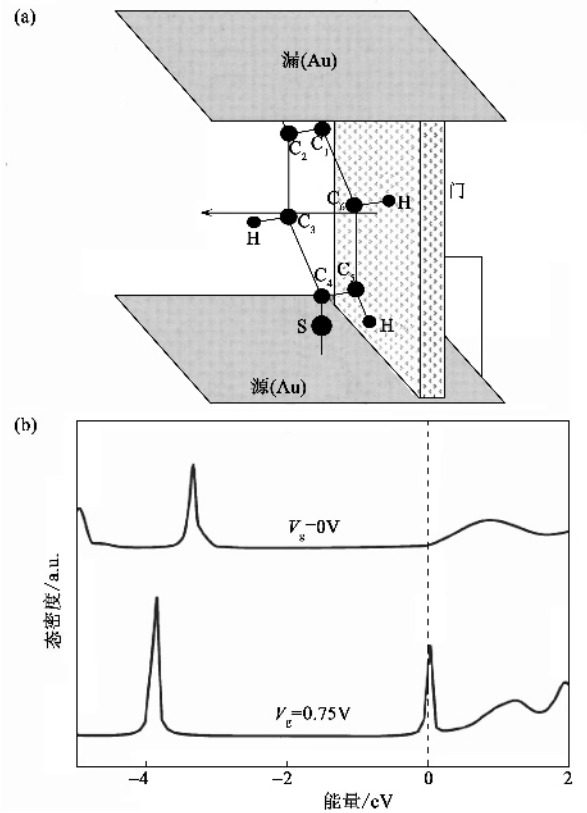


图10 门电压调控苯分子晶体管态密度曲线(虚线为左费米能级)^[16]

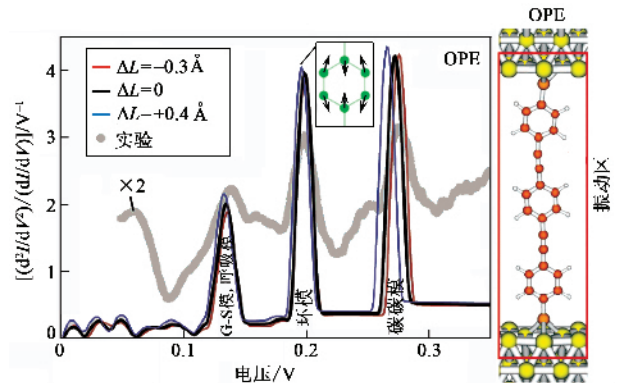


图11 OPE分子IETS谱,实验曲线($\times 2$,灰色)与理论曲线对比^[17]

d^2I/dV^2 . 这比从 $I-V$ 曲线通过数值模拟所得结果可靠得多.有关的第一性原理计算的理论工作也纷纷出现.这方面的研究已形成一个热点,图11给出了实验和理论结果的比较,其中3条理论曲线中, $\Delta L=0$ 对应能量极小,另外2条曲线是电极位置据此做微调后的测量结果^[17].

3.3 分子晶体管

最受关注的分子器件当属分子二极管、分子存

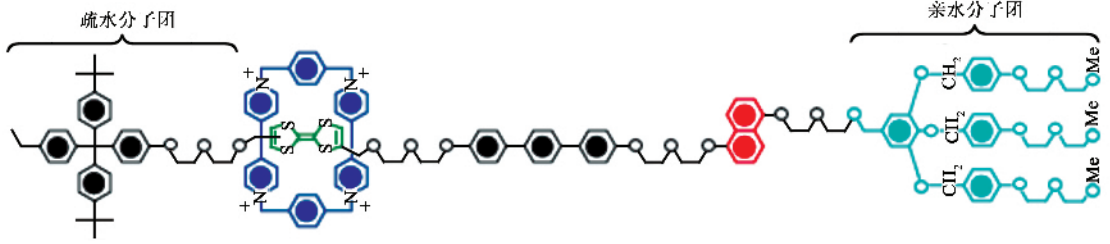


图 12 Crossbar Latch 中的分子开关^[18]

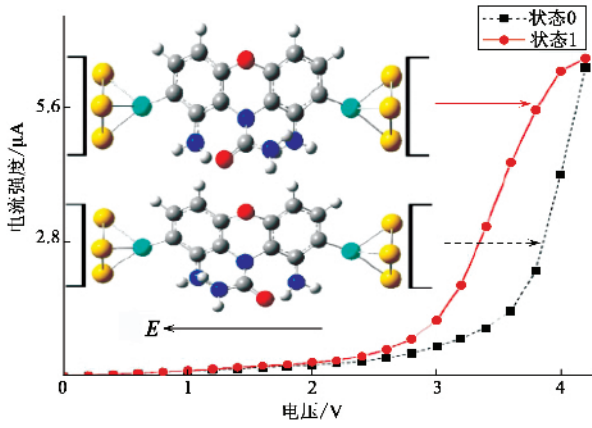


图 13 Phenoxazinyl 分子开关的两种状态^[18]

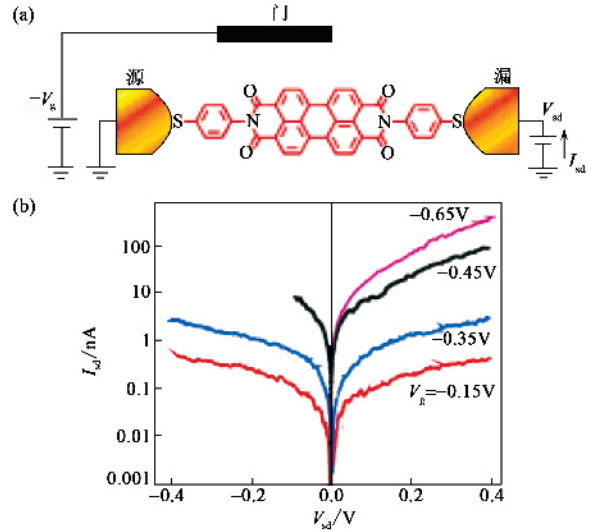


图 15 PTCDI 单分子门控晶体管^[21]

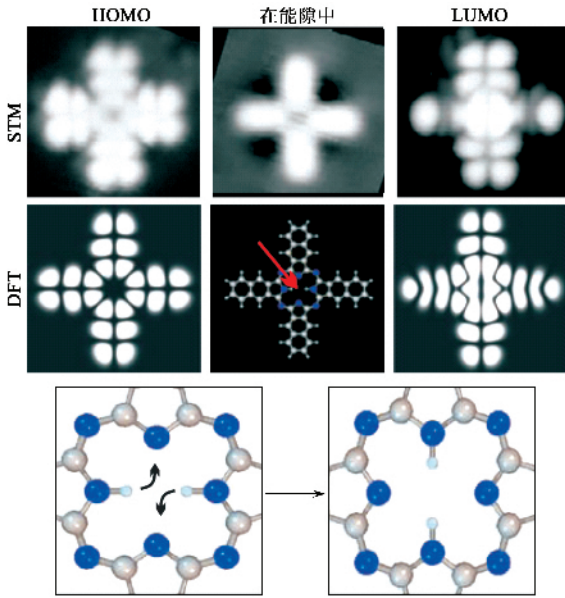


图 14 Naphthalocyanine 单分子双稳态开关^[20]

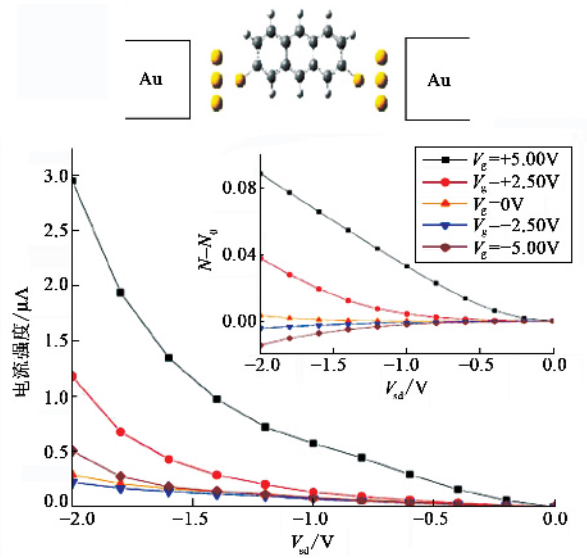


图 16 Anthracene 单分子门控晶体管^[23]

存储器、分子开关和分子晶体管等分子计算机的主要器件。惠普公司(HP)量子科学研究组(QSR)Williams R S 等人与 UCLA 的 Stoddart J F 教授、加州理工学院 Heath J R 教授等合作,近年来致力于研究分子晶体管,开发出一种称为 Crossbar Latch 的器件。他们报道的集成度从 2003 年 64 位发展到 2007 年 160K,相当惊人(图 12)^[18]。图中 6 个苯分子(蓝色)

构成的分子环可被电信号操控,处于主分子链的不同位置。图中所示为主分子链的导通态。当 6 个苯分子环处于并苯分子(红色)处,则为断开态。他们称 Crossbar Latch 开启了分子计算机的先河。

我们设计了一种 Phenoxazinyl 分子开关(图

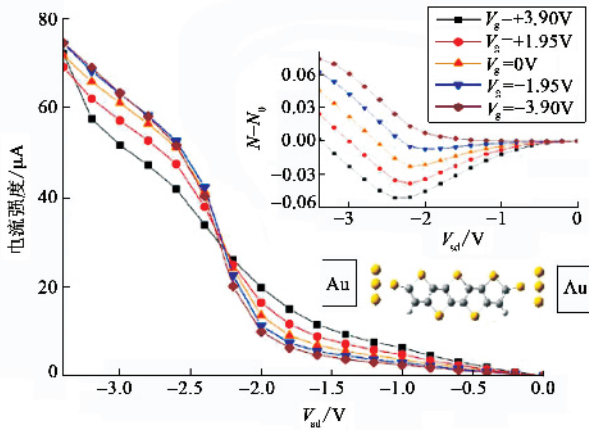


图 17 PTA 分子门调控的 $I-V$ 曲线, 源漏电压 $V_{sd} = -2.2\text{V}$ 处调控特性反转^[23]

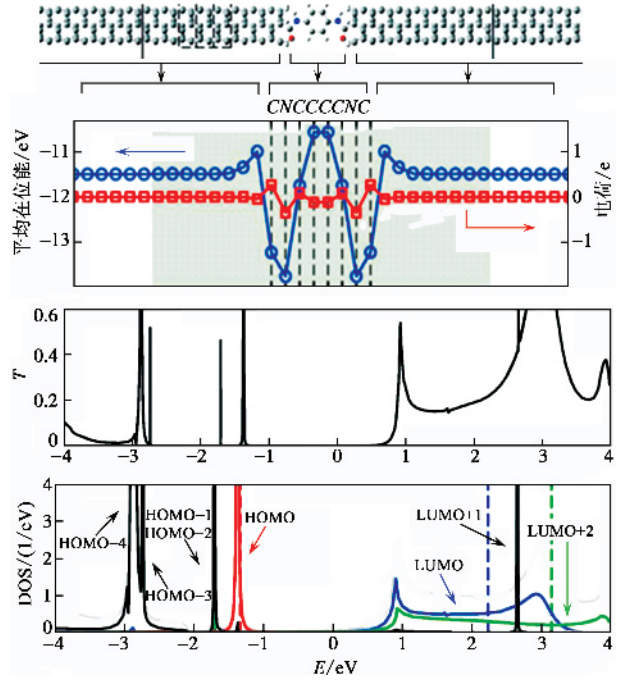


图 19 单层碳纳米管做导线, 分子 DIB 平均在位 (on-site) 能、电荷、透射谱和态密度理论值^[25]

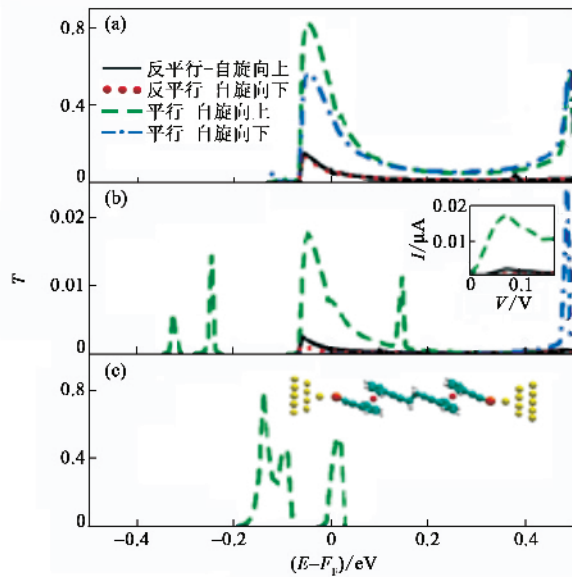
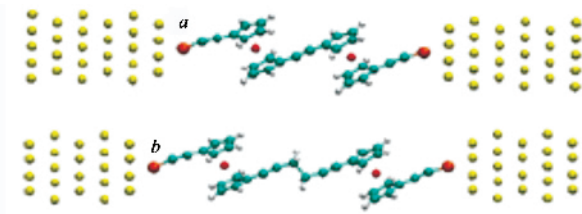


图 18 透射率 T 作为入射电子能量 E 的函数。(a) DiCoC 其中的“反平行-自旋向上”表示二茂钴电子处在反平行自旋态, 同时导电电子自旋向上时所对应的透射率 T ; “反平行-自旋向下”, “平行-自旋向上”; “平行-自旋向下”的说明类推。(b) DiCo-2C (c) DiCo-2C 在 S 原子与金 (001) 导线间多个金原子。图中黄、白、蓝、红和橘色分别代表 Au, H, C, Co, S 原子^[24]

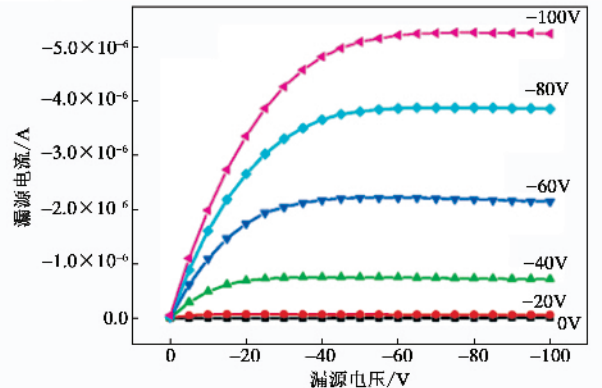
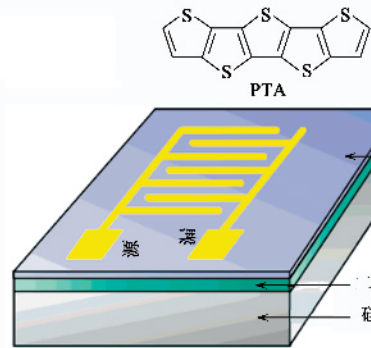


图 20 并五噻吩分子薄膜场效应晶体管 (PTA) 伏安曲线^[26]

13^[19]. 图中有 C 原子 (灰色), O 原子 (红色), N 原子 (蓝色), S 原子 (浅蓝色) 和 H 原子 (白色). 分子开关两端接到金导线 (黄色) 上. 中间的 N 原子通过 C 原子连接 NH_2 和 O 分子团, 构成一个转子. 中间 2 个苯分子通过 O 原子和 N 原子相连, 构成一个定

子. 外加电场 E 可以控制转子在状态 1 和状态 0 两个位置间转动, 得到分开的 $I-V$ 曲线. 中间 2 个苯分子下端的 H 原子被 NH_2 分子功能团取代, 以便使 $I-V$ 曲线分离更为明显, 达到较好的开关效果. 2007 年 8 月, IBM 苏黎世实验室在 Science 上发表

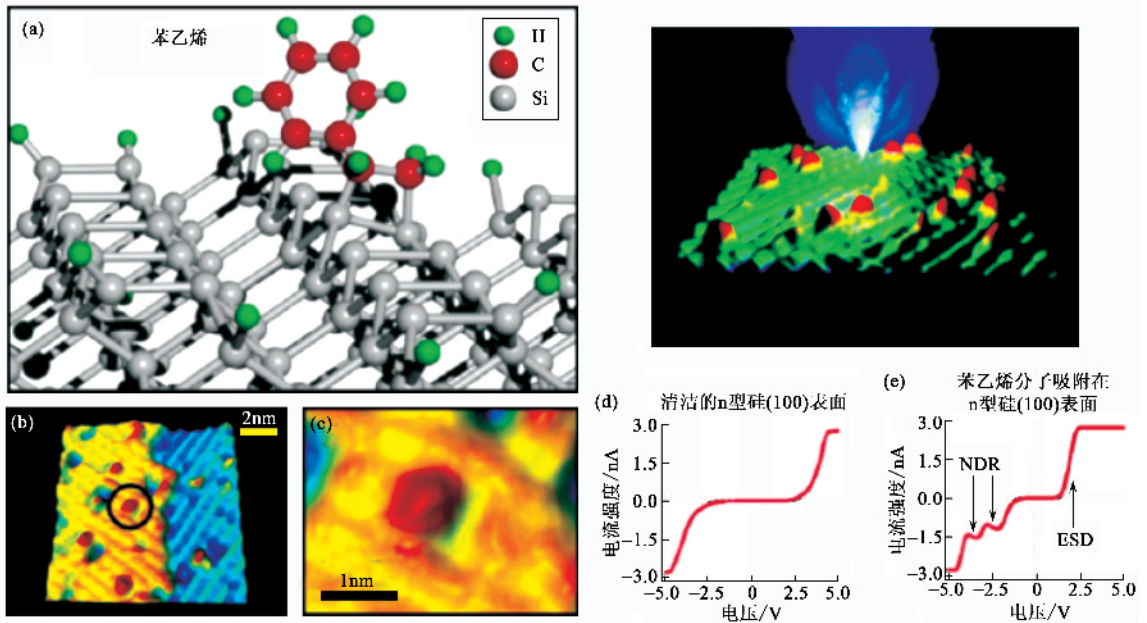
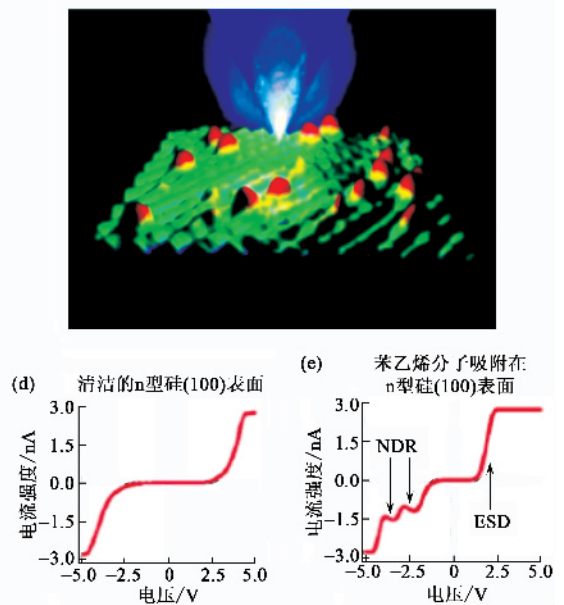


图 21 实验测得吸附在 Si(100) 表面的苯乙烯分子的负微分电阻 (NDR)^[26] (图中 ESD 为电子激励的退吸附作用)

论文展示了他们的最新成果: Naphthalocyanine 单分子开关, 由两个氢原子的不同位置构成双稳态 (图 14 [20]). 上述分子开关都是依赖调控分子结构组态来实现分子“开”与“关”之间的转换. 它们可以用于某些特定用途, 用作分子计算机 CPU 元件, 则工作频率和可靠性都不够理想, 我们更倾向于用门电压调控的分子晶体管.

Tao N J 研究组成功地测量到 PTCDI 有机分子的源漏电流被门电压调控的情况 (图 15)^[21], 这是一个有效的分子晶体管线路, 可望稳定地工作在较高频率下, 与近年来发展的石墨单层 (Graphene) 器件有相通之处.

2003 年, 荷兰 C. Dekker 研究组曾报道过单苯分子横向电压调控的实验结果, 效果不甚明显^[22]. 我们计算了几种并苯分子的情况, 发现可以得到较大的改善. Anthracene 分子正向门电压有相当明显的调控效应, 而且功耗很小 (图 16). Naphthalene 分子功耗大一些, 也有门电压调控效应. 不对称联接的 3 并苯分子也具有良好的正向门电压调控功能. 此外, Pentathienoacene 分子也可用作分子晶体管, 而且当纵向电压大于 2.2 V 时, 门电压调控的效果会反向 (图 17)^[22]. 这些效应都是由有机分子的能级分布决定的. 我们的计算结果还表明 4 苯环分子具有类似于 Si 半导体 CMOS 管的伏安调控曲线. 采用适当构形的分子有望获得具有更高放大倍数的有机分子晶体管.



美国 Duke 大学 Liu R 等人用第一性原理计算研究了二茂钴 (DiCo) 类分子, 展示了它们作为自旋电子学器件的潜力 (见图 18)^[24]. 图中的 DiCo 和 DiCo-2C 分子的二茂钴自旋开关可由磁场调控, 在平行态和反平行态间翻转, 前者具较大透射率. 图 18(b) 的插图表明, DiCo-2C 分子在自旋平行态中, 自旋向上的电流大, 兼有自旋阀功能.

大多数分子器件选择与金属导线相连接, 尤以金导线居多. 金的稳定的化学性质以及金与硫原子能通过自组装工艺构成牢固的化学键, 都使金导线广受青睐. 但是, 用有机分子做导线也是很诱人的. 北京大学电子学系侯士敏教授的研究组用 DFT (通过开放软件 Siesta) 结合非平衡态 Green 函数, 计算了 (3,3) 单层碳纳米管做导线时分子 1,4-dithiocyanatobenzene (DIB) 的输运特性, 包括平均在位能、电荷、透射率 (T) 和态密度 (DOS) 等 (图 19)^[25].

由于分子太小, 单分子晶体管的实验很难做. 尚未见到国内这方面实验工作的报道. 中国科学院化学所刘云圻组在有机分子薄膜器件上做了不少出色的工作. 图 20 是他们合成并测试到的并五噻吩分子薄膜场效应晶体管 (PTA) 室温伏安曲线, 具有相当好的晶体管电学性能和稳定性^[26].

目前分子电子学器件尚需要在“裁剪”和构成各种化学键的物理化学手段上有更进一步的突破. 作为从 Si 半导体集成电路到下一代分子电子学器件进程的过渡, 可能需要一个 Si 表面器件与分子器

件的混合器件阶段,以便充分利用现在已经十分成熟的 Si 半导体工艺,并大大促进分子电子学器件的发展.这个方向上,在实验和理论两个方面,都在进行有益的探索(图 21)^[27,28].

因发现整数量子 Hall 效应而获得诺贝尔物理奖的德国物理学家 von Klitzing K 在 2006 年出版的“Introducing Molecular Electronics”一书的序言中写道,一般期望 Si CMOS 器件与分子结构的组合将在 20 年后主宰纳米电子学领域^[29].但是,科学和技术的发展道路有时也是难以完全预料的,下一代电子器件发展之路究竟如何,我们将拭目以待.

致谢 作者感谢研究生蒋峰博士、周永西、梁云焯同学对本课题的贡献,感谢日本东北大学金属材料研究所合作者 Mr. Note R, Prof. Mizuseki H, Prof. Kawazoe Y 对本文的贡献和日本东北大学金属材料研究所超级计算机 SR8000 的支持.

参考文献

[1] Aviram A, Ratner M A. Chem. Phys. Lett., 1974, 29 :277
 [2] Reed M A, Tour J M. Sci. Am., 2000, 282 :68
 [3] Reed M A et al. Science, 1997, 278 :252
 [4] Di Ventra M et al. Phys. Rev. Lett., 2000, 84 :979
 [5] Taylor J et al. Phys. Rev. B, 2001, 63 :245407
 [6] Damle P et al. Chem. Phys., 2002, 281 :171
 [7] Xue Y, Ratner M A. Phys. Rev. B, 2005, 68 :115406
 [8] Reichert J et al. Phys. Rev. Lett., 2002, 88 :176804; Appl. Phys. Lett., 2003, 82 :4137
 [9] Jiang F et al. Phys. Rev. B, 2005, 72 :155408
 [10] Liang Y Y et al. unpublished
 [11] Toher C et al. Phys. Rev. Lett., 2005, 95 :146402

[12] Kondo J. Prog. Theoret. Phys., 1964, 32 :37
 [13] Liang W et al. Nature, 2002, 417 :725
 [14] Xu B Q et al. Nano Lett., 2005, 5 :1491
 [15] Zhou Y X et al. Phys. Rev. B, 2007, 75 :245407
 [16] Yang Z Q et al. Appl. Phys. Lett., 2003, 82 :1938
 [17] Paulsson M et al. Nano Lett., 2006, 6 :258
 [18] Chen Y et al. Nanotechnology, 2003, 14 :462; Kuekes P J et al. J. Appl. Phys., 2005, 97 :034301; Green J E et al. Nature, 2007, 445 :414
 [19] Liang Y Y et al. J. Chem. Phys., 2007, 127 :084107
 [20] Liljeroth P et al. Science, 2007, 317 :1203
 [21] Xu B et al. J. Am. Chem. Soc., 2005, 127 :2386
 [22] Lee J-O et al. Nano Lett., 2003, 3 :113
 [23] Jiang F et al. J. Chem. Phys., 2006, 125 :084710
 [24] Liu R et al. Nano Lett., 2005, 5 :1959
 [25] Qian Z et al. J. Chem. Phys., 2007, 126 :084705
 [26] Xiao K et al. J. Am. Chem. Soc., 2005, 127 :13286
 [27] Hersam M C et al. Nano Lett., 2004, 4 :55
 [28] Rakshit T et al. Phys. Rev. B, 2005, 72 :125305
 [29] Cuniberti G et al. (Ed.). Introducing Molecular Electronics. Berlin :Springer, 2006



作者简介 陈灏博士 复旦大学物理系教授,博士生导师.研究方向为纳电子学理论和第一性原理的分子电子学理论.和研究生一起构建了密度泛函理论(基于商业软件 Gaussian/开放程序 Gamess)和非平衡态 Green 函数方法相结合的(并行)程序,计算分子器件的电流、微分电导等输运性质,设计和研究分子晶体管性能.



北京欧普特科技有限公司

光学元件库—欧普特科技

欢迎访问:

www.goldway.com.cn

北京欧普特科技有限公司严格参照国际通常规格及技术指标,备有完整系列的精密光学零部件(备有产品样本供参考)供国内各大专院校、科研机构、试验室随时选用,我公司同时可为您的应用提供技术咨询.我公司可以提供美国及欧洲产的优质红外光学材料,如硒化锌,硫化锌,多光谱硫化锌等.



- 光学透镜:平凸、双凸、平凹、双凹、消色差胶合透镜等.
- 光学棱镜:各种规格直角棱镜,及其他常用棱镜.
- 光学反射镜:各种尺寸规格的镀铝,镀银,镀金,及介质反射镜.直径 5mm - 200mm.
- 光学窗口:各种尺寸规格,材料的光学平面窗口,平晶.直径 5mm - 200mm.
- 各种有色玻璃滤光片:规格为直径 5mm - 200mm.(紫外,可见,红外)及窄带干涉滤片.
- 紫外石英光纤:进口紫外石英光纤, SMA 接口光纤探头,紫外石英聚焦探头.

地址 北京市海淀区知春路 49 号希格玛大厦 B 座#306 室

电话 010 - 88096218/88096217 传真 010 - 88096216 网址 www.goldway.com.cn

联系人 陈镛先生 施楠小姐 曾安小姐

E-mail kevinchen@goldway.com.cn shinan@goldway.com.cn zengan@goldway.com.cn