بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران مرکزی

دانشکده فنی مهندسی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد (M.A)

گرایش: الکترونیک

عنوان :

طراحی یک سلول تمام جمع کننده با استفاده از حلقه های بنزنی و تابع اکثریت

استاد راهنما :

دکتر کیوان ناوی

استاد مشاور :

دکتر رضا صباغی

پژوهشگر:

سید جابر حسینی

بهار۱۳۹۱

تقدیم به :

با سپاس فراوان به درگاه خداوند متعال که در مراحل زندگی یاور و پشتیبان من بود و با تلاش های مداوم پدر و مادر عزیزم و همچنین همسر مهربانم این رساله که حاصل تلاش یک ساله خودم بود را به این عزیزان تقدیم می کنم که در این یک ساله یاور من بوده اند و کمک زیادی چه از لحاظ مادی چه معنوی به اینجانی ارائه داده اند و باعث دلگرمی اینجانب در مراحل سخت طراحی و جمع آوری پایان نامه از من داشته اند .

با تشکر

تشکر و قدر دانی :

با تشکر از دوست عزیز و همکلاسی محترم جناب آقای مهندس شروین نصیری فر که در ابتدا تصویب پایان نامه تا طراحی و شبیه سازی ها و تا جمع آوری پایان نامه کمک زیادی به اینجانب کرده اند و همچنین با تشکر از استاد راهنما دکتر کیوان ناوی و همچنین استاد مشاور دکتر رضا صباغی که پیگیر مستمر کار پایان نامه بوده اند و کمک زیادی در مواجه با مشکلات پیش روی آمده در مراحل انجام شبیه سازی ها کرده اند قدر دانم و تمامی دوستان عزیز که در این راه حداقل کمک کرده اند متشکرم .

تعهد نامه اصالت پایان نامه کارشناسي ارشد

اینجانب ....سید جابر حسینی.. دانش اموخته مقطع کارشناسی ارشد ناپیوسته به شماره دانشجویي.....۸۸۰۸۳۸٤٤٦۰۰.....در رشته ...برق - الکترونیک.....که در تاریخ .....۱۳۹۱.۰۳.۱۷..... .

از پایان نامه خود تحت عنوان: ...طراحی یک سلول تمام جمع کننده جدید با استفاده از حلقه های بنزنی و تابع اکثریت...

با کسب نمره .....۱۷.۷۵..... ودرجه .....خوب..... دفاع نموده ام بدینوسیله متعهد می شوم :

۱- این پایان نامه حاصل تحقیق وپژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده ودر مواردی که از دستاوردهای علمی وپژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه ، کتاب ، مقاله و...) استفاده نموده ام، مطابق ضوابط و رویه های موجود ،نام منبع مورد استفاده وسایر مشخصات آن را در فهرست ذکر ودرج کرده ام .

۲-این پایان نامه قبلا برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح ، پایین تر یا بالاتر) درسایر دانشگاهها و موسسات آموزش عالی ارائه نشده است .

۳-چنانچه بعد از فراغت از تحصیل ، قصد استفاده وهرگونه بهره برداری اعم از چاپ کتاب ، ثبت اختراع و ....از این پایان نامه داشته باشم ، از حوزه معاونت پژوهشی واحد مجوزهای مربوطه را اخذ نمایم .

٤-چنانچه در هر مقطع زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود ، عواقب ناشی از آن را بپذیرم و واحد دانشگاهی مجاز است با اینجانب مطابق ضوابط ومقررات رفتار نموده ودر صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت .

نام ونام خانوادگی :

بسمه تعالي

درتاريخ :
دانشجو كارشناسي ارشد آقاي سيد جابر حسينی
از پايان نامه خود دفاع نموده وبا نمره
۱۷.۷۵ بحروف هفده و
هفتاد و پنج با درجه خوب
مورد تصويب قرار گرفت .

امضاء استاد راهنما

عناوین **صفحه**

فصل اول : کلیات طرح

۱-۱ تعریفی از پروژه ۱

فصل دوم : الکترونیک مولکولی و کاربردها

۲-۱ مقدمه از الکترونیک مولکولی ۴

۲-۲ پس زمینه ۶

۲-۳ دستگاههای مبتنی بر پلی فنیلن با مقیاس مولکولی ۶

۲-۴ رسانا ها یا سیم های _ پیوند آروماتیک مولکول های ارگانیک ۷

۲-۵ عایق کننده _ مولکول ارگانیک آلیفاتیک ۱۴

۲-۶ سوئیچ های دیود _ مولکول های آروماتیک جانشینی ۱۵

۲-۷ دیود های یکسو کننده مولکولی ۱۶

۲-۸ نتیجه گیری فصل دوم ۲۰

فصل سوم : طراحی گیت NOT مولکولی با استفاده از دیود RTD

۳-۱ دیود های تونل زنی تشدید مولکولی RTD ۲۱

۳-۲ عملکرد مولکولی RTD ۲۳

۳-۳ رفتار جریان در مقابل ولتاژ مولکولی RTD ۲۵

۳-۴ طراحی گیت NOT با استفاده از خواص مولکولی حلقه های بنزنی ۲۷

۳-۵ نتیجه گیری فصل سوم ۳۲

فصل چهارم : طراحی یک تمام جمع کننده با تابع اکثریت

۴-۱ مقدمه از تمام جمع کننده ها ۳۳

۴-۲ تمام جمع کننده معمولی ۳۴
۴-۳ تمام جمع کننده CPL ۳۵
۴-۴ تمام جمع کننده TGA و TFA ۳۹
۴-۵ سلول تمام جمع کننده پیشنهادی ۴۴
۴-۶ شبیه سازی تمام جمع کننده با استفاده از گیت اکثریت (غیر اکثریت) ۵۰
۴-۷ نتیجه گیری فصل چهارم ۵۳
فصل پنجم : طراحی یک تمام جمع کننده (Full Adder) با تابع اکثریت با حلقه بنزنی
۵-۱ مقدمه با حلقه بنزنی ۵۴
۵-۲ مکانیزم های حمل و نقل ۵۶
۵-۳ تونل زنی ۵۷
۵-۴ حمل و نقل فعال شده ۵۹
۵-۵ توصیف حلقه بنزنی و ساختار شیمیایی آن ۶۰
۵-۶ دیود یکسو کننده ۶۰
۵-۷ طرز کار و طراحی یک دیود مولکولی راستگرد ۶۲
۵-۸ طراحی گیت منطقی AND و OR با استفاده از دیود مولکولی پلی فنیلن ۶۴
۵-۹ طراحی گیت منطقی XOR با استفتده از دیود مولکولی ۶۵
۵-۱۰ طراحی یک نیم جمع کننده (Half Adder) با استفاده از حلقه بنزنی ۶۶
۵-۱۱ طراحی تمام جمع کننده معمولی با استفاده از حلقه های بنزنی ۶۸

۵-۱۲ طراحی تمام جمع کننده با تابع اکثریت و حلقه های بنزنی ۶۹

فصل ششم : نتایج و پیشنهادات ۷۳

منابع و ماخذ ۸۱
پیوستها و ضمائم ۸۳

چکیده انگلیسی ۸۷

فصل اول

تعریف پروژه

مقدمه :

جهت ساخت سیستم های مولکولی به خصوص دستگاههای الکترونیک مولکولی، ما نیاز داریم تا یک شناخت عمیق از اینکه مولکول ها توانایی محاسبه چه چیزی را دارند، داشته باشیم. مدل های استفاده شده برای محاسبات مولکولی و نتایج آن از طریق قدرت محاسباتی مدل ها مانند قابل محاسبه بودن و پیچیدگی آنالیز می شوند. مولکول ها دارای خصوصیت های خود هیبریدی و خود منتاژی دارند که مرتبط با محاسبات کوانتوم مولکولی می باشند. خصوصیات خاص که نتیجه نهایی را می دهند از اثر مواد ارگانیک، اثر پیوند، اثر ذره ای، اثر اندازه، اثر سطح، و اثر ساختار ثبت شده و رسانایی شیمیایی مشتق می شوند. ما این خصوصیات را از ساختار و یا ترکیب مولکولی تعریف می کنیم .

ما در فصل اول درباره مزایای الکترونیک مولکولی و تاثیر آن بر مدارات مجتمع عظیم صحبت می کنیم، که شامل مولکول های شیمیایی می باشد و اینکه چه تاثیری بر رسانایی و انتقال الکترون دارند را مورد بحث قرار می دهیم. در این فصل نحوه ارتباط مولکولی و سیم های مولکولی ساخته شده با استفاده از حلقه های بنزنی و سدهایی که باعث جلوگیری از حرکت انتقال الکترون و جریان که در طراحی مقاومت مولکولی تاثیر دارند را مورد مطالعه قرار داده ایم. و همچنین اوربیتال های مرکزی و بالاترین سطح اوربیتال های اشغال شده (HOMO) و پایین ترین اوربیتال اشغال نشده (LUMO) را اندازه گیری کرده و تاثیر مولکول روی انتقال را توضیح خواهیم داد. مهمترین خاصیت الکترونیک مولکولی در اندازه نانومتری

آن می باشد. مزیت های دیگر در فصل دوم توضیح داده می شوند.

در فصل سوم یک دیود RTD را طراحی می کنیم. که رفتار های دیود RTD و مدار های ولتاژ و جریان مربوط به دیود تونل زنی را مورد بحث قرار خواهیم داد. از خواص هایی که یک دیود RTD دارد با استفاده از یک ترانزیستور nmos در ساخت گیت NOT ایجاد میشود، و با استفاده از آن یک گیت NOT را طراحی کرده ایم، اینست که با دادن ورودی " ۰ " خروجی " ۱ " را به ما می دهد و یا برعکس. بعد از این طراحی آن را با مولکول بنزن و خواص آلیفاتیکی مولکول یک گیت NOT مولکولی را طراحی کرده ایم که باعث کوچک شدن گیت NOT از نظر مولکولی می شود. بحث کلی و کاربرد ها و مزئیت های دیود RTD را در فصل مربوط به خودش به طور کامل توضیح خواهیم داد.

در فصل چهارم یک تمام جمع کننده با استفاده از تابع اکثریت را طراحی می کنیم که این تمام جمع کننده به علت استفاده شدن از ترانزیستور های کمتر، دارای کمترین حجم می باشد و سرعت مدار را بالا می برد. این تمام جمع کننده را با استفاده از مقاومت های ورودی و گیت NOT ساخته شده با استفاده از خواص دیود تونل زنی که در فصل قبل توضیح داده شد را می سازیم. این تمام جمع کننده از تکنولوژی Cmos طراحی می شود. این تکنولوژی را فقط با استفاده از ترانزیستور های Nmos وبا شبیه ساز Hspice طراحی کرده ایم.

در فصل پنجم که پروژه با شبیه سازی و مدل سازی مولکولی انجام می شود کار تحقیق به پایان می رسد. با استفاده از طراحی های مولکولی RTD در فصل سوم و تمام جمع کننده با تابع اکثریت که در فصل چهارم توضیح داده خواهد شد، آن را به صورت مولکولی ارائه می دهیم. مولکول هایی که در فصل اول در قسمت الکترونیک مولکولی که خواص رسانایی و هدایت الکترون را دارند را در این مدار جاگذاری می کنیم. مهمترین کار در این فصل ساختن مقاومت های ورودی که در فصل قبل در تمام جمع کننده آورده ایم میباشد، که با استفاده از مدل سازی و شبیه سازی انجام شده، مقاومت را طراحی می کنیم و گیت NOT که در این مدار وجود دارد را با استفاده

از طراحی انجام شده با دیود RTD جاگذاری میکنیم و یک تمام جمع کننده با تابع اکثریت و با قابلیت مولکولی که با استفاده از حلقه های بنزنی تشکیل می شود را طراحی می کنیم، که کاربرد زیادی در تکنولوژی نانومتری در مدارات دارد و به کوچک سازی و سرعت بخشیدن کمک می کند.

در فصل آخر نتایج ها و پیشنهاد ها و فعالیت های آینده که می تواند در بهبودی مدارات کمک کند، و همچنین طرح هایی را که برای محاسبات الکترونیکی آینده می تواند کاربرد فراوانی داشته باشد، را ارائه میدهیم.

فصل دوم

الکترونیک مولکولی و کاربرد ها

مقدمه :

اخیرا پیشرفت های چشم گیری در تولید و ارائه ی سیم های الکترونیک مولکولی و دیودهای الکترونیک مولکولی و سوئیچ های الکتریکی دو ترمینالـه ی شاخته شده از تک مولکول ها به وجود آمده است. همچنین پیشرفت هایی در زمینه تکنیک های مربوط به ساخت اتصال های قابل اتکای الکتریکی با چنین مولکول های رسانای الکتریکی شکل گرفته است. این پیشرفت های نوید بخش در زمینه ی نانو الکترونیک پیشنهاد می کند که شاید بتوان برخی ساختارهای الکترونیک مولکولی پیچیده تر را تولید کرد که شامل دو یا سه دیود الکترونیک خواهد بود و به عنوان مدارهای منطقی دیجیتال عمل می کند. هدف این طرح فراهم کردن و شرح دادن طراحی هایی بدیع برای چندین مدار منطقی دیجیتال الکترونیک مولکولی ساده است: یک مجموعه ی کامل از سه گیت منطقی پایه ای (AND, OR, XOR) به علاوه یک تابع تمام جمع کننده و یک تمام جمع کننده با تابع اکثریت ساخته شده است که از گیت هایی که از طریق اصول شناخته شده منطق ترکیبی می باشد به دست آمده است. در راستای طراحی این گیت های منطقی الکترونیک مولکولی، همچنین طراحی هایی را برای سوئیچ های ساده تر دیود یکسوکننده ی الکترونیکی مولکولی مبتنی بر پلی فنیلن پیشنهاد دادیم که قراردادن آنها در مدارهای منطقی به همراه دیگر سیم ها و دستگاههای مبتنی بر پلی فنیلین مولکولی باید آسان باشد. طراحی های مربوط به سوئیچ های دیود مولکولی یکسو کننده در اینجا استخراج شده اند تا

همخوانی بیشتری با سیم های ارائه شده از طریق معرفی گروه های بین مولکولی که به طور شیمیایی به سیم های مولکولی تغییر داده شده، پیوند خورده اند، داشته باشند. یک ایده ی کلی مربوط به این تحقیق این است که پیاده سازی گیت های منطقی الکترونیک مولکولی ابتدایی و توابع محاسباتی الکترونیکی مولکولی ابتدایی لزوما نیاز به استفاده از ترانزیستورهای مقیاس مولکولی سه ترمیناله ندارند. تنها چند سویئچ دیود مولکولی دو ترمیناله برای اجرای مدارهای منطقی کامپیوتری الکترونیکی مولکولی ضروری هستند. علاوه بر این، چنین سوئیچ های دیود مولکولی ارائه شده اند و تنها ضروری است تا دو یا سه تا از آنها مونتاژ شوند، چه به صورت مکانیکی و چه شیمیایی، و سپس اتصال مناسبی برقرار کنند تا منطق الکترونیک مولکولی را تست کرده و نشان دهند. ساختارهای منطقی الکترونیکی مولکولی پیشنهاد شده در اینجا ناحیه ای تا یک میلیون بار کمتر را در مقایسه با ساختارهای منطقی آنالوگی که در حال حاضر در مدارهای مجتمع نیمه رسانا حالت جامد با مقیاس میکرون وجود دارند، را اشغال می کند.

طراحی های منطقی مولکولی به دلیل اندازه ی بسیار کوچک شان، حداقل نیاز به بررسی نهایی آخرین مرزهای کوچک سازی مدارهای الکترونیکی کامپیوتری را دارند. علاوه براین، همان طور که در زیر شرح داده شده است، تمام این ساختار های منطقی الکترونیکی مقیاس مولکولی به سادگی از چند سوئیچ دیود مولکولی مشابه با آنچه تاکنون به صورت آزمایشگاهی نشان داده شده است، به طور تئوری بررسی و ساخته شده اند. بنابراین شاید این امکان وجود داشته باشد تا در آینده ای نسبتا نزدیک چنین منطق های دیجیتال الکترونیک مولکولی بسیار کوچک و با تراکم بسیار بالا را بطور تجربی تست کرد. برای شروع به شرح دادن اینکه چرا چنین توسعه های شدید ی را اکنون محتمل هستند، یک چهار چوب کیفیتی را برای معماری های مدار الکتریکی مطرح می کنیم و مسائل معماری مربوط به این روش را تعریف می کنیم. بنابراین، این یک هدف اضافی از تحقیق حاضر است تا راه و مسیری را برای بررسی ها و مطالعات آتی دقیق، سیستماتیک و کمیتی فراهم کند تا دیگران

صحت روش پیشنهادی برای ساخت کامپیوتر های الکترونیکی مولکولی را بررسی کنیم.

پس زمینه:

پیشرفت های اخیر نشان می دهد که محدودیت های فیزیکی برای کوچک تر کردن ترانزیستورهای نیمه رسانای اثر بالا با احتمال زیاد زودتر از آنچه فرض شده بود مشکل ساز خواهند شد. این مسئله مانند الکترونیک های مولکولی باعث می شود تا جستجو برای یک راه حل جایگزین از همیشه مهم تر شود، تا بتوان دستگاههای الکترونیکی را کوچکتر کرد و مدارها را به مقیاس نانومتر رساند. در حال حاضر دو نوع اصلی از مولکول ها وجود دارند که برای به کار رفتن به عنوان پایه ای بالقوه یا ستون فقرات دستگاههای الکترونیک مقیاس مولکولی حمل کننده ی جریان پیشنهاد و ارائه شده اند. این دو نوع از ستون فقرات مولکولی عبارتند از:

الف) زنجیره های مبتنی بر پلی فنیلین

ب) نانو لوله های کربن

علاوه بر این حدس های زیادی در مقالات دیگر در مورد یک نوع سوم از ستون فقرات رسانای شامل بیومولکول ها وجود دارد. برای فراهم کردن یک پایه ی مناسب برای شرح دادن طراحی های مدار مولکولی شرح داده شده در اینجا، مفاهیم اصلی و داده های تجربی مربوط به هر کدام از این سه ستون فقرات مقیاس مولکولی رسانا به طور مجزا در زیر بررسی شده است.

۲-۳) دستگاههای مبتنی بر پلی فنیلن با مقیاس مولکولی

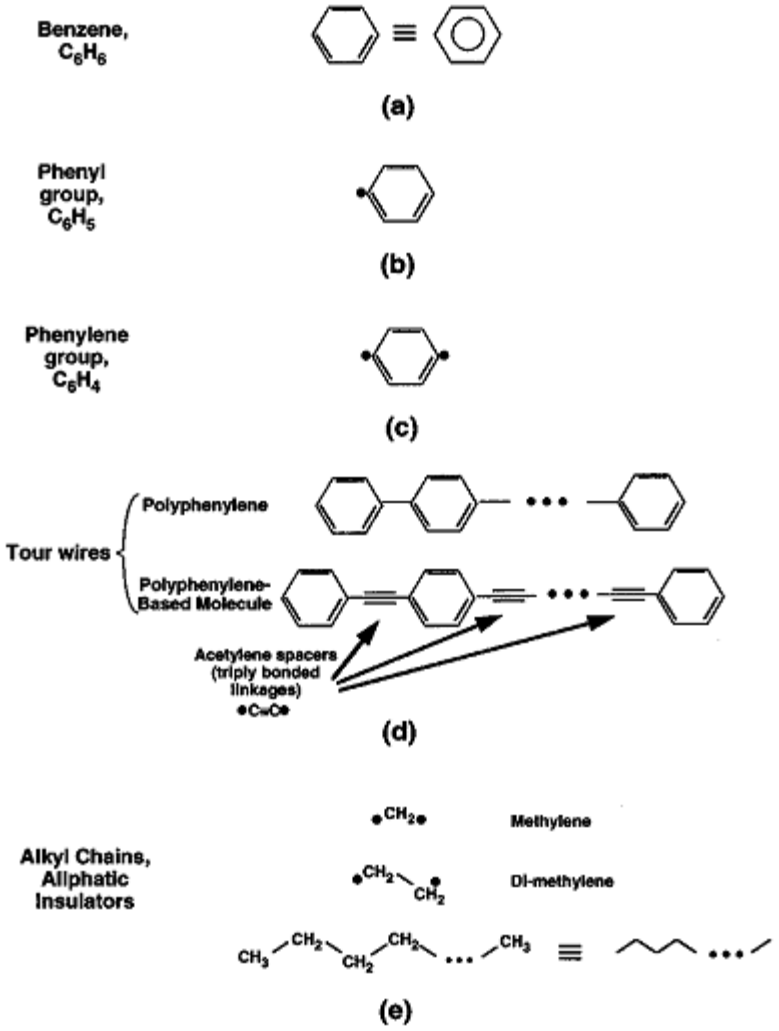
سوئیچ ها و سیم های مولکولی مبتنی بر پلی فنیلین شامل زنجیره های ارگانیک حلقه های بنزن آروماتیک هستند. چنین زنجیره هایی در شکل (۱-۲) نشان داده شده اند. تا مدتی پیش این سوال بود که آیا چنین مولکول های کوچکی به طور منفرد دارای رسانایی قابل کاربرد هستند یا خیر. با این حال در دو سه سال اخیر چندین گروه مختلف از طریق آزمایشگاهی نشان داده اند که مولکول های پلی فنیلین منفرد می توانند جریان های الکتریکی کوچکی را ارسال کنند.

با انگیزه گرفتن از چنین پیشرفت های آزمایشگاهی، چندین گروه ار تئوریسین ها از جمله Datta و همکارا نش ، Ratner شروع به ساخت روش های محاسباتی و چارچوب مکانیکی کمیتی برای تفسیر دقیق رسانای الکتریکی در مولکول های کوچک ارگانیک کردند. محاسبات انجام شده توسط این دانشمندان و روش های مربوطه تایید کردند که آزمایش ها درست بودند و خصوصیت رسانایی الکتریکی موجود در سیم های پلی فنیلین را نشان دادند. علاوه بر این پلی فنیلین های جایگزین شده و مولکول های ارگانیک مشابه و کوچک، به طور آزمایشی نشان دادند که توانایی سوئیچ کردن جریان های کوچک را دارند.

۱) رسانا ها یا سیم ها - پیوند آروماتیک مولکول های ارگانیک : یک حلقه منفرد بنزن، با فرمول شیمیایی C_6H_6 در شکل (۱ الف) نشان داده شده است. یک حلقه ی بنزن با یک هیدروژن حذف شده از C_6H_5 که می تواند به صورت گروهی به دیگر اجزای مولکولی پیوند بخورد؛ مانند شکل (۱ ب) کشیده می شود. چنین گروه حلقه ای شکل " گروه فنیلین " نام دارد. با حذف کردن ۲ هیدروژن از بنزن، یکی از آنها ساختار C_6H_4 یا فنیلن را بدست می آورد. حلقه ای که دو پیوند آزاد دارد همانطور که در شکل (۱ پ) نشان داده شده است، با پیوند دادن فنیلن ها به یکدیگر در هر دو سمت و حذف کردن ساختارهای شبیه زنجیره به دست آمده با گروههای فنیلن ایجاد شده است.

پلی فنیلن ها مانند ساختار مولکولی در شکل (۱ ت) ممکن است با شکل ها و طول های مختلف ایجاد شوند. علاوه بر این، شاید دیگر انواع گروههای مولکولی (مانند گروههای آلیفاتیک تک پیوندی، اتینل دو پیوندی ،و اتینیل سه پیوندی یا گروههای اکتیلینیک) ایجاد شوند. همچنین ممکن است زنجیر های پلی فنیلن مولکول های مبتنی بر پلی فنیلن ایجاد شود که ساختارهای بسیار مفیدی دارند. مثالی از اینچنین مولکول مبتنی بر پلی فنیلن در شکل (۱ ت) آمده است. مولکول هایی مانند بنزن و پلی فنیلن ها که از ساختار های حلقه ای مشابه با بنزن استفاده می کند، آروماتیک نام دارند. همانطور که در بالا به طور خلاصه بررسی شد، محققین متعددی اخیراً آزمایشات حساسی را اجرا کردند که در آن یک یا چند

مولکول مبتنی بر پلی فنیلن رسانایی الکتریکی را نشان دادند.



شکل (۱-۲) رسانایی مولکولی آروماتیک و عایق الیفاتیک

نتایج چند تا از آن آزمایشها در جدول (۱) خلاصه شده است. در یک مثال از این آزمایش ها Reed و همکارانش یک جریان الکتریکی را از طریق یک تک لایه ی ساخته شده از تقریبا ۱۰۰۰ سیم مولکولی مبتنی بر پلی فنیلن عبور دادند که در یک میله ی مقیاس نانو متری مرتب شده بود. سیستم با دقت آماده شده بود، برای مثال تمام مولکول های درون نانوی میله از

مولکول های زنجیره ی مبتنی بر پلی فنیلن حلقه ی سه بنزنی بودند. این مولکول های زنجیره ای هر کدام دارای یک شکل مشابه با مولکول های نشان داده شده در شکل (۱ ت) بودند که شامل سه پیوند رسانا، فضاساز، و اکتلینیک پیوند داده شده بین هر جفت از حلقه های بنزن می باشد. جریان کل عبور داده شده از این مونتاژ از مولکول های 30uA اندازه گیری شده که تقریبا برابر 30nA برای جریان عبوری از هر مولکول است.

Table 1
Approximate Current Densities in Electrons Per Second Per Square Nanometer Calculated from Experimental Data for Selected Molecular Electronic and Macroscopic Metal Devices

		<——— Molecular Electronic Device ———>				
Quantity	**Units**	**1,4-Dithiol Benzene**	**3-Ring Poly-phenylene Wire**	**Poly-phenylene RTD (5 rings)**	**Carbon Nanotube**	**Copper Wire**
Applied Voltage	Volts	1	1	1.4 (peak)	1	2×10^{-3} (10 cm wire)
Current Measured In Experiment	Amperes	2×10^{-8}	3.2×10^{-5}	1.4×10^{-11}	1×10^{-7}	1 (approx.)
Current Inferred per Molecule	Amperes Electrons per Sec	2×10^{-8} 1.2×10^{11}	3.2×10^{-8} 2.0×10^{11}	1.4×10^{-14} 8.7×10^{4}	1×10^{-7} 6.2×10^{11}	– –
Estimated Cross-Sectional Area per Molecule	nm^2	~0.05	~0.05	~0.05	~3.1 (Radius ≈ 1 nm)	$\sim 3.1 \times 10^{12}$ (Radius ≈ 1 mm)
Current Density	Electrons per Sec-nm^2	$\sim 2 \times 10^{12}$	$\sim 4 \times 10^{12}$	$\sim 2 \times 10^{6}$	$\sim 2 \times 10^{11}$	$\sim 2 \times 10^{6}$
Reference		[7]	[8]	[5,6]	[4]	

این جریان که در چهارمین ستون جدول (۱) قرار دارد،تقریباً برابر با ۲۰۰ میلیارد الکترون ارسالی در عرض هر سیم مولکولی کوتاه مبتنی بر پلی فنیلن در هر ثانیه است. در تست های مربوط به دستگاههای الکترونیکی مولکولی مانند آنهایی که در جدول (۱) بیان شده اند، طول های کوتاه

سیم مولکولی بین مرزهای پتانسیل نوع Schottky پیچیده شده اند، که مولکول ها در آنجا متصل می شوند، اما به طورنیمه کامل به اتصال های فلزی متصل می باشد. در نتیجه تونل زدن می تواند در میان چنین مرزهایی رخ دهد. جریانی که می تواند از مولکول عبور کند به شدت کاهش داده می شود و مرزهای Schottky اثر شدیدی بر روی کل سیستم اکترونیک مولکولی میگذارند. با این حال می توان انتظار داشت که تحقیقات بیشتر، باعث ایجاد یک مولکول رسانای بزرگ شود که سیم های مولکولی و سوئیچ های مولکولی را بکار می برد و همه را در یک مدار الکترونیکی مولکولی تکی جمع می کند. در عملیات مدار الکترونیک مولکولی بزرگتر، هر مرز Schottky بسیار دورتر خواهد بود (یعنی حداقل ۱۰ مرتبه)، و حرکت جریان بین دستگاهها درون مولکول توسط مرزهای Schotttky نسبتاً کمتراثر می پذیرد. بنابراین، جریان یا سیگنال می تواند از میان تمام دستگاههای یک مدار الکترونیک مولکولی با امپدانس کمتر از آنچه در جدول (۱) در مورد سیم ها و سوئیچ های مبتنی بر پلی فنیلن نشان داده، عبور کند.

ما به یک مولکول نسبتاً بزرگتر اشاره می کنیم. یک نانو لوله ی کربنی مورد اندازه گیری واقعه شده است که جریانی را بین ۱۰ تا ۱۰۰ برابر بزرگتر از آنچه برای زنجیره مبتنی بر پلی فنیلین اندازه گیری شده بود را ارسال می کرد. اندازه گیری هایی که در جدول یک نشان داده شده اند به جریانی تقریبا ۲۰ تا ۵۰۰ نانو آمپر مربوط هستند، یا تقریبا ۱۲۰ میلیارد تا ۳ تریلیون الکترون به ازای هر ثانیه می باشند، در حالی که سیم های مولکولی مبتنی بر پلی فنیلین مانند آنهایی که در شکل (۱ ت) نشان داده شده است، به اندازه نانو تیوب های کربن جریان حمل نمی کنند، پلی فنیلن ها و مشتقاتشان مولکول های بسیار کوچکتر هستند. در نتیجه به دلیل مناطق موجور در بین بخش بسیار کوچک شان، آنها دارای چگالی بسیار بالایی هستند. این مسئله در جدول شماره (۱) دیده شده است که در آن تراکم های مولکولی انتخاب شده برای چندین دستگاه الکترونیک مولکولی و همچنین برای یک سیم ماکروسکوپی معمولی محاسبه شده اند.

مشاهده شد که چگالی جریان برای یک سیم مولکولی مبتنی بر پلی فنیلن تقریبا مشابهه با مقدار مربوط به یک نانو لوله کربنی و به مقدار نیم میلیون بار بیشتر از سیم مسی می باشد. همچنین مولکول های مبتنی بر پلی فنیلین دارای مزئیت مهم یک ترکیب شیمیایی خوب بوده و انعطاف پذیری ترکیبی بسیار خوبی هم دارند. اخیرا Tour تکنیک های ترکیبی را برای زنجیره های مبتنی بر پلی فنیلین رسانا بهبود داد تا تعداد زیادی از این مولکول ها را ایجاد کند (تقریبا" 10^{23}) که هرکدام از آنها دقیقا ساختار و طول مشابهی را دارند. بنابراین، چنین سیم های مولکولی مبتنی بر پلی فنیلین با ساختار های شیمیایی نشان داده شده در شکل (۱ ت) با نام سیم های تور (Tour) شناخته می شوند. منبع رسانایی برای یک سیم مبتنی بر پلی فنیلن مجموعه ای است از اوربیتال های مولکولی نوع π که در بالا و پایین صفحه ی مولکولی قرار دارند، وقتی که در یک وضعیت صفحه ای یا نزدیک صفحه ای قرار گرفته باشند.

یک مثال از یک اوربیتال π در شکل ۲ نشان داده شده است. در یک وضعیت صفحه ای، اوربیتال های π مربوط به هر اتم منفرد در ترکیب های مختلفی هم پوشانی یا مزدوج می شوند تا دسته ای از اوربیتال های π را ایجاد کنند که در طول مولکول وجود دارند. این مسئله به این دلیل رخ می دهد که یک برتری انرژیتیک چشم گیر از والانس الکترون های جابجا شده، وجود دارد. البته در اوربیتال هایی که تقریبا در تمام طول مولکول وجود دارند، با پایین ترین انرژی در مولکول در شکل (۲ ت) نشان داده شده است .