بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران مرکزی

دانشکده علوم پایه گروه فیزیک

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

گرایش حالت جامد

عنوان : ترابرد الکترون در اتصالات مولکولی و ابزارهای الکترونیک مولکولی

استاد راهنما:

دکتر ضرغام باقری

استاد مشاور:

دکتر جواد بهشتیان

پژوهشگر:

علی حلاج جهانی

زمستان ۱۳۹۱

بسمه تعالی

تعهدنامه اصالت پایان‌نامه کارشناسی‌ارشد

اینجانب علی‌حلاج جهانی دانش آموخته مقطع کارشناسی‌ارشد ناپیوسته به شماره دانشجویی ۸۸۰۸۳۸۲۵۵۰۰ در رشته فیزیک حالت جامد که در تاریخ ۱۳۹۱/۱۱/۲۸ از پایان نامه خود تحت عنوان: ترابرد الکترون در اتصالات مولکولی و ابزارهای الکترونیک مولکولی، با کسب نمره بیست با درجه عالی دفاع نموده‌ام بدینوسیله متعهد می‌شوم:

۱- این پایان نامه حاصل تحقیق و پژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده و در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه،کتاب،مقاله و...) استفاده نموده‌ام، مطابق ضوابط و رویه‌های موجود، نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در فهرست ذکر و درج کرده‌ام.

۲- این پایان‌نامه قبلاً برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح ،پایین تر یا بالاتر)در سایر دانشگاهها و موسسات آموزش عالی ارائه نشده است.

۳- چنانچه بعد از فراغت ازتحصیل، قصد استفاده و هر گونه بهره‌برداری 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 و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی‌ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت.

نام و نام خانوادگی: علی حلاج جهانی

تاریخ و امضاء

بسمه تعالی

در تاریخ : ۹۱/۱۱/۲۸

دانشجوی کارشناسی ارشد آقای علی حلاج جهانی از پایان نامه خود دفاع نموده و با نمره ۲۰ بحروف بیست با درجه عالی مورد تصویب قرار گرفت.

امضاء استاد راهنما :

معاونت پژوهش و فناوری

به نام خدا

منشور اخلاق پژوهش

با یاری از خداوند سبحان و اعتقاد به اینکه عالم محضر خداست و همواره ناظر بر اعمال انسان و به منظور پاس داشت مقام بلند دانش و پژوهش و نظر به اهمیت جایگاه دانشگاه در اعتلای فرهنگ و تمدن بشری، ما دانشجویان و اعضاء هیأت علمی واحدهای دانشگاه آزاد اسلامی متعهد می‌گردیم، اصول زیر را در انجام فعالیت‌های پژوهشی مدنظر قرار داده و از آن تخطی نکنیم:

۱- **اصل برائت :** التزام به برائت جویی از هر گونه رفتار غیر حرفه ای و اعلام موضع نسبت به کسانی که حوزه علم و پژوهش را به شائبه‌های غیر علمی می‌آلایند .

۲- **اصل رعایت انصاف و امانت :** تعهد به اجتناب از هر گونه جانب داری غیر علمی و حفاظت از اموال ، تجهیزات و منابع در اختیار .

۳- **اصل ترویج :** تعهد به رواج دانش و اشاعه نتایج تحقیقات و انتقال آن به همکاران علمی و دانشجویان به غیر از مواردی که منع قانونی دارد.

٤- **اصل احترام :** تعهد به رعایت حریم ها و حرمت ها در انجام تحقیقات و رعایت جانب نقد و خودداری از هر گونه حرمت شکنی .

٥- **اصل رعایت حقوق :** التزام به رعایت کامل حقوق پژوهشگران و پژوهیدگان (انسان، حیوان و نبات و سایر صاحبان حق.

٦- **اصل رازداری :** تعهد به صیانت از اسرار و اطلاعات محرمانه افراد، سازمان ها و کشورها و کلیه افراد و نهادهای مرتبط با تحقیق.

۷- **اصل حقیقت جویی :** تلاش در راستای پی جویی حقیقت و وفاداری به آن و دوری از هر گونه پنهان سازی حقیقت

۸- **اصل مالکیت مادی و معنوی :** تعهد به رعایت کامل حقوق مادی ومعنوی دانشگاه وکلیه همکاران پژوهش .

۹- **اصل منافع ملی:** تعهد به رعایت مصالح ملی و در نظرداشتن پیشبرد و توسعه کشور در کلیه مراحل پژوهش.

امضاء پژوهشگر :

با تشکر و قدردانی از استاد ارجمند

جناب آقای دکتر باقری

تقدیم به:

مادرعزیزم

دانشکده علوم پایه

«این چکیده به منظور چاپ در پژوهش‌نامه دانشگاه تهیه شده است»

نام واحد دانشگاهی: تهران مرکزی **کد واحد:**	**کد شناسایی پایان‌نامه: ۱۰۱۳۰۲۱۱۹۰۲۰۰۶**
عنوان پایان‌نامه: ترابرد الکترون در اتصالات مولکولی و ابزارهای الکترونیک مولکولی	
نام و نام خانوادگی دانشجو: علی حلاج جهانی **شماره دانشجوئی:** ۸۸۰۸۳۸۲۵۵۰۰ **رشته تحصیلی:** فیزیک حالت جامد	**تاریخ شروع پایان‌نامه:** نیمسال دوم ۹۱-۹۰ **تاریخ اتمام پایان‌نامه:** نیمسال اول ۹۲-۹۱
استاد راهنما: آقای دکتر ضرغام باقری **استاد مشاور:** آقای دکتر جواد بهشتیان	

چکیده پایان نامه (شامل خلاصه، اهداف، روش های اجرا و نتایج به دست آمده):

هدف از انجام این پژوهش، مطالعه، بررسی و محاسبه خواص الکترونیکی سه مولکول از خانواده آروماتیک ها، -di thiol 3,3' Bipyridyl، di thiol Stilbene و di thiol Imidazole ، به خصوص بررسی طیف های گذار در حالت اعمال بایاس و در حالت بایاس صفر و نیز چگالی حالت ها با در نظر گرفتن اربیتال های مختلف اتم های مولکول میانی و نیز با در نظر گرفتن تمامی اربیتال ها برای تمامی اتم های موجود در سیستم مولکولی، تعیین ویژه مقادیر گذار و نهایتاً بررسی ویژگی های منحنی جریان – ولتاژ میباشد.

با بررسی طیف چگالی حالت های هر سه سیستم مولکولی مشاهده کردیم که قله های مختلفی در طیف نمایان میشوند که هریک مقدار خاصی را برای چگالی حالت های سیستم نشان میدهند. در هریک از این طیف ها، در بازه ای از انرژی پر شدت ترین قله ها وجود دارند که بسته به این که کدام نوع از اربیتال ها لحاظ شده، در بالای سطح فرمی با در پایین سطح فرمی واقع شده اند. به این صورت که اگر میانگین اربیتال اتم های در نظر گرفته شده در هر سیستم مولکولی، خالی باشد این قله در پایین سطح فرمی واقع میشوند و اگر میانگین اربیتال ها پر باشد در بالای سطح فرمی واقع خواهند شد.در بررسی طیف گذار نیز قله های متعددی را در انرژی‌های مختلف مشاهده کردیم. همچنین در حالت بایاس صفر، رفتار طیف با حالت اعمال بایاس متفاوت است. به این صورت که با اعمال بایاس به سیستم مولکولی، مکان قله های مشاهده شده در حالت بایاس صفر به سمت انرژی های کمتر پیش میرود. ضمن اینکه از شدت آن ها نیز کاسته می‌شود. با رسم نمودار جریان – ولتاژ، میزان جریان عبوری از سیستم های مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. در هر سه مورد مشاهده نمودیم که نمودار جریان بر حسب ولتاژ به فرم نموداری از درجه سه می‌باشد. با بررسی طیف گذار با اعمال شرایط نقطه k ، وابستگی طیف گذار را به k مورد بررسی قرار دادیم. در هرسه مورد مطالعه شده، با اعمال شرایط نمونه گیری نقطه ای، مقدار گذار پرشدت ترین قله، افزایش می یابد.علاوه بر این، مقادیر هومو (بالاترین اربیتال پرشده مولکولی) و لومو(پایین ترین اربیتال پر نشده مولکولی) در هر سیستم مولکولی و نیز میزان کل انرژی در هریک مورد مطالعه قرار گرفت و به صورت عددی در طی فصل ۳، گزارش شده است. درمطالعه تمام خواص مذکور،از نرم افزار اتمیستکس بهره گرفته شد.

نظر استاد راهنما برای چاپ در پژوهش‌نامه دانشگاه ☐ **مناسب است** ☐ **مناسب نیست** **تاریخ و امضاء:**

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: الکترونیک مولکولی

۱-۱ مقدمه.....۱

۱-۲ آشنایی با الکترونیک مولکولی.....۲

۱-۲-۱- مواد مولکولی برای الکترونیک.....۳

۱-۲-۲- الکترونیک در مقیاس مولکولی.....۳

۱-۳- میکرو الکترونیک.....۵

۱-٤- قوانین "مور".....۷

۱-۵- فراتر از قوانین مور.....۱۰

فصل دوم: مبانی نظری

۲-۱- مقدمه.....۱۷

۲-۲- محاسبات ساختار الکتریکی.....۱۷

۲-۳- نظریه تابعی چگالی.....۱۸

۲-٤- معادلات کوهن – شم.....۲۰

۲-٤-۱- روش نیمه تجربی.....۲۳

۲-٤-۲- روش نظری.....۲٤

۲-۵- تقریب چگالی موضعی..... ۲۵
۲-٦- تقریب شبه پتانسیل ۲۷
۲-۷- مجموعه های پایه..... ۲۹
۲-۸- تعیین موقعیت (محلی سازی)..... ۳۰
۲-۹- نمونه گیری نقطه-K..... ۳۱
۲-۱۰ تئوری انتقال کوانتومی..... ۳۳
۲-۱۰-۱- توزیع غیر تعادلی الکترون..... ۳۵
۲-۱۰-۲- فرمولاسیون تابع گرین غیر تعادلی برای ترابرد همدوس..... ۳۷
۲-۱۰-۳- بررسی و شناخت روش..... ۳۸
۲-۱۰-٤- تکنیک تابع گرین غیر تعادلی در سیستم دو الکترودی..... ٤۳

فصل سوم: محاسبات

۳-۱- مقدمه..... ۵۱
۳-۲- عملکرد نرم افزار اتمیستیکس..... ۵۱
۳-۲-۱- نمای کلی فرآیند کاری نرم افزار..... ۵٤
۳-۳- روش خودسازگار ۵٦
۳-٤- چگالی اولیه..... ۵۸
۳-۵- بدست آوردن پتانسیل موثر از چگالی..... ۵۸
۳-٦- ساخت ماتریس هامیلتونی..... ۵۹
۳-۷- حل مسئله ویژه مقداری کوهن - شم ٦۰

۳-۸- محاسبه چگالی جدید..... ٦٠
۳-۹- حصول خودسازگاری..... ٦١
۳-۱۰- بررسی ویژگی‌های الکتریکی سه مولکول ازخانواده حلقه‌های‌آروماتیک‌ها..... ٦١
۳-۱۰-۱- مولکول di thiol 3,3'-Bipyridal..... ٦٢
۳-۱۰-۱-۱- چگالی حالت‌های دستگاه..... ٦٥
۳-۱۰-۱-۲- ویژه حالت‌ها..... ۷۳
۳-۱۰-۱-۳- ویژه مقادیر گذار..... ۷٤
۳-۱۰-۱-٤- بررسی ویژگی های جریان - ولتاژ..... ۸۰
۳-۱۰-۱-٥- بررسی طیف گذار در حالت اعمال بایاس‌های مختلف..... ۸٦
۳-۱۰-۱-٦- توصیف ویزگی‌های جریان- ولتاژ بااستفاده‌از هامیلتونی‌خودسازگار..... ۸۷
۳-۱۰-۱-۷- انرژی کل..... ۹۲
۳-۱۰-۲- مولکول di thiol stilbene..... ۹۳
۳-۱۰-۲-۱- چگالی حالت‌های دستگاه..... ۹۳
۳-۱۰-۲-۲- ویژه حالت‌ها..... ۱۰۱
۳-۱۰-۲-۳- ویژه مقادیر گذار..... ۱۰۲
۳-۱۰-۲-٤- بررسی ویژگی های جریان – ولتاژ..... ۱۰۷
۳-۱۰-۲-٥- بررسی طیف گذار در حالت اعمال بایاس های مختلف..... ۱۱۱
۳-۱۰-۲-٦- توصیف ویزگی‌های جریان- ولتاژ بااستفاده‌ازهامیلتونی‌خودسازگار..... ۱۱٤
۳-۱۰-۲-۷- انرژی کل..... ۱۱۷
۳-۱۰-۳- بررسی مولکول di thiol Imidazole..... ۱۱۸

۳-۱۰-۳-۱- چگالی حالت های دستگاه.....۱۱۹
۳-۱۰-۳-۲- ویژه حالت‌ها.....۱۲٤
۳-۱۰-۳-۳- ویژه مقادیرگذار.....۱۲٦
۳-۱۰-۳-٤- بررسی‌ویژگی‌های جریان- ولتاژ.....۱۳۰
۳-۱۰-۳-۵- بررسی طیف گذاردرحالت اعمال بایاس‌های مختلف.....۱۳۳
۳-۱۰-۳-٦- توصیف ویژگی‌های جریان- ولتاژ بااستفاده‌از هامیلتونی‌خودسازگار.....۱۳۵
۳-۱۰-۳-۷- انرژی کل.....۱۳۷

فصل چهارم : نتیجه گیری و پیشنهادات

٤-۱- نتیجه گیری ۱۳۸
٤-۲- پیشنهادات.....۱٤۳
مراجع.....۱۵۷

فهرست نمودارها

صفحه

۱-۱ نمودار ۹

۱-۲ نمودار ۱۵

۳-۱ نمودار ٦٥

۳-۲ نمودار ٦٦

۳-۳ نمودار ٦٧

۳-٤نمودار ٦٨

۳-٥ نمودار ٦٨

۳-٦ نمودار ٦٩

۳-۷ نمودار ۷۰

۳-۸ نمودار ۷۱

۳-۹ نمودار ۷۲

۳-۱۰ نمودار ۷۹

۳- ۱۱ نمودار ۸۱

۳-۱۲ نمودار ۸۱

۳-۱۳ نمودار ۸٥

۳-۱٤ نمودار ۸٥

۳-۱٥ نمودار ۸٦

۳-۱٦ نمودار ۹۱

۳-۱۷ نمودار ۹۳

۳-۱۸ نمودار ۹۵
۳-۱۹ نمودار ۹۶
۳-۲۰ نمودار ۹۷
۳-۲۱ نمودار ۹۸
۳-۲۲ نمودار ۱۰۰
۳-۲۳ نمودار ۱۰۱
۳-۲٤ نمودار ۱۰٦
۳-۲۵ نمودار ۱۰۸
۳-۲٦ نمودار ۱۰۸
۳-۲۷ نمودار ۱۰۹
۳-۲۸ نمودار ۱۱۲
۳-۲۹ نمودار ۱۱۳
۳-۳۰ نمودار ۱۱٦
۳-۳۱ نمودار ۱۱۹
۳-۳۲ نمودار ۱۲۰
۳-۳۳ نمودار ۱۲۰
۳-۳٤ نمودار ۱۲۱
۳-۳۵ نمودار ۱۲۲
۳-۳٦ نمودار ۱۲۳
۳-۳۷ نمودار ۱۲٤
۳-۳۸ نمودار ۱۲۹
۳-۳۹ نمودار ۱۳۰

٣-٤٠ نمودار..... ١٣٢
٣-٤١ نمودار..... ١٣٣
٣-٤٢ نمودار..... ١٣٣
٣-٤٣ نمودار..... ١٣٤
٣-٤٤ نمودار..... ١٣٦

فهرست جداول **صفحه**

۱-۱ جدول..... ۱۱

۳-۱ جدول..... ۷۵

۳-۲ جدول..... ۷۶

۳-۳ جدول..... ۷۷

۳-٤ جدول..... ۸۳

۳-۵ جدول..... ۹۲

۳-٦ جدول..... ۱۰۳

۳-۷ جدول..... ۱۰٤

۳-۸ جدول..... ۱۰۵

۳-۹ جدول..... ۱۱۰

۳-۱۰ جدول..... ۱۱۷

۳-۱۱ جدول..... ۱۲٦

۳-۱۲ جدول..... ۱۲۷

۳-۱۳ جدول..... ۱۲۸

۳-۱٤ جدول..... ۱۳۱

۳-۱۵ جدول..... ۱۳۷

فهرست شکل‌ها **صفحه**

۱-۱ شکل..... ٦

۱-۲ شکل..... ۳۵

۲-۲ شکل..... ۳٦

۲-۳ شکل..... ٤۲

۲-٤ شکل..... ٤۳

۲-۵ شکل..... ٤۷

۳-۱ شکل..... ۵٤

۳-۲ شکل..... ۵٦

۳-۳ شکل..... ۵۷

۳-٤ شکل..... ٦۲

۳-۵ شکل..... ٦۳

۳-٦ شکل..... ٦۳

۳-۷ شکل..... ۷۳

۳-۸ شکل..... ۸۸

۳-۹ شکل..... ۸۸

۳-۱۰ شکل..... ۸۸

٣-١١ شكل..... ٨٨

٣-١٢ شكل..... ٨٩

٣-١٣ شكل..... ٨٩

٣-١٤ شكل..... ٨٩

٣-١٥ شكل..... ٨٩

٣-١٦ شكل..... ٩٣

٣-١٧ شكل..... ١٠٢

٣-١٨ شكل..... ١١٤

٣-١٩ شكل..... ١١٤

٣-٢٠ شكل..... ١١٥

٣-٢١ شكل..... ١١٥

٣-٢٢ شكل..... ١١٥

٣-٢٣ شكل..... ١١٥

٣-٢٤ شكل..... ١١٦

٣-٢٥ شكل..... ١١٦

٣-٢٦ شكل..... ١١٨

٣-٢٧ شكل..... ١١٩

٣-٢٨ شكل..... ١٢٥

٣-٢٩ شكل..... ١٣٥

٣-٣٠ شكل..... ١٣٥

٣-٣١ شكل..... ١٣٦

٣-٣٢ شكل..... ١٣٦

فصل اول:

الکترونیک مولکولی