بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد مرودشت

دانشکده علوم پایه

گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد «M.Sc»

گرایش شیمی فیزیک

عنوان:

تاثیر چرخش درونی بر رسانش نانوپلیمرهای هادی دارای حلقه ی بنزن

استاد راهنما:

دکتر سید محمد اعظمی

استاد مشاور

دکتر نیما کراچی

نگارش:

آمنه عسکری

معاونت پژوهش و فن آوري
به نام خدا
منشور اخلاق پژوهش

با ياري از خداوند سبحان و اعتقاد به اين كه عالم محضر خداست و همواره ناظر بر اعمال انسان و به منظور پاس داشت مقام بلند دانش و پژوهش و نظر به اهميت جايگاه دانشگاه در اعتلاي فرهنگ و تمدن بشري، ما دانشجويان و اعضاء هيئت علمي واحدهاي دانشگاه آزاد اسلامي متعهد مي گرديم اصول زير را در انجام فعاليت هاي پژوهشي مد نظر قرار داده و از آن تخطي نكنيم:

١- اصل برائت: التزام به برائت جويي از هرگونه رفتار غيرحرفه اي و اعلام موضع نسبت به كساني كه حوزه علم و پژوهش را به شائبه هاي غيرعلمي مي‌آلايند.

٢- اصل رعايت انصاف و امانت: تعهد به اجتناب از هرگونه جانب داري غير علمي و حفاظت از اموال، تجهيزات و منابع در اختيار.

٣- اصل ترويج: تعهد به رواج دانش و اشاعه نتايج تحقيقات و انتقال آن به همكاران علمي و دانشجويان به غير از مواردي كه منع قانوني دارد.

٤- اصل احترام: تعهد به رعايت حريم ها و حرمت ها در انجام تحقيقات و رعايت جانب نقد و خودداري از هرگونه حرمت شكني.

٥- اصل رعايت حقوق: التزام به رعايت كامل حقوق پژوهشگران و پژوهيدگان (انسن،حيوان ونبات) و ساير صاحبان حق.

٦- اصل رازداري: تعهد به صيانت از اسرار و اطلاعات محرمانه افراد، سازمان ها و كشور و كليه افراد و نهادهاي مرتبط با تحقيق.

٧- اصل حقيقت جويي: تلاش در راستاي پي جويي حقيقت و وفاداري به آن و دوري از هرگونه پنهان سازي حقيقت.

٨- اصل مالكيت مادي و معنوي: تعهد به رعايت كامل حقوق مادي و معنوي دانشگاه و كليه همكاران پژوهش.

٩- اصل منافع ملي: تعهد به رعايت مصالح ملي و در نظر داشتن پيشبرد و توسعه كشور در كليه مراحل پژوهش.

تعهدنامه اصالت رساله یا پایان نامه

اینجانب **آمنه عسکری** دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد در رشته **شیمی فیزیک** که در تاریخ **۱۳۹۳/۶/۳۱** از پایان نامه خود تحت عنوان **" تاثیر چرخش درونی بر رسانش نانوپلیمرهای هادی دارای حلقه ی بنزن"** با کسب نمره دفاع نموده ام بدینوسیله متعهد می شوم:

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 نموده ام, مطابق ضوابط و رویه موجود, نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آنرا در فهرست مربوطه ذکر و درج کرده ام.

۲) این پایان نامه قبلاً برای هیچ مدرک تحصیلی(هم سطح, پایین تر یا بالاتر) در سایر دانشگاه ها و موسسسات آموزش عالی ارائه نشده است.

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

۴) چنانچه در هر مقطع زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود, عواقب ناشی از آن را می پذیرم و دانشگاه آزاد اسلامی واحد مرودشت مجاز است با اینجانب مطابق ضوابط و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت.

نام و نام خانوادگی: آمنه عسکری

تاریخ و امضاء

تابستان ۱۳۹۳

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد (M.Sc)

نام و نام خانوادگی دانشجو: آمنه عسکری در تاریخ ۱۳۹۳/۶/۳۱ رشته:شیمی فیزیک از پایان نامه خود با عنوان : تاثیر چرخش درونی بر رسانش نانوپلیمرهای هادی دارای حلقه ی بنزن

با درجه ونمره دفاع نموده است.

نام و نام خانوادگی اعضاء هیات داوری	**سمت**	**امضاء اعضای هیات داوری**
۱ – دکتر سید محمد اعظمی	استاد راهنما	
۲ – دکتر نیما کراچی	استادمشاور	
۳ – دکتر مهدی خیرمند	استاد داور	

مراتب فوق مورد تایید است .

مدیر/معاونت پژوهشی

مهر و امضاء

تقدیم به:

و تو ای مادر، ای شوق زیبایی نفس کشیدن

ای روح مهربان هستی ام

تو رنگ شادی هایم شدی و لحظه ها را با تمام وجود از من دور کردی و

عمری خستگی ها را به جان خریدی تا اکنون توانستی طعم خوش

پیروزی را به من بچشانی

تقدیم به:

دختر دلبندم ..... که به زندگی ام معنای دوباره بخشید

سپاسگزاری

اکنون که این رساله به پایان رسیده است بر خود لازم می‌دانم که از استاد ارجمند و بزرگوارم جناب آقای دکتر **سید محمد اعظمی** که با راهنمایی‌های ارزنده خود مرا در پیشبرد این پایان‌نامه صمیمانه یاری رساندند، تشکر و قدردانی نمایم.

همچنین از اساتید ارجمند دکتر **نیما کراچی** و جناب آقای دکتر **مهدی خیرمند** که زحمت مشاوره و داوری این رساله را بر عهده گرفتند و در این راه مرا یاری دادند، تشکر ویژه دارم.

از پدر و مادر عزیزم که در طول زندگی همیشه بهترین دوست و پشتیبان من بوده‌اند با کمال احترام قدردانی و تشکر می‌نمایم.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

چکیده..... ۱

فصل اول: نانو تکنولوژی

۱-۱- مقدمه..... ۳
۱-۲- تاریخچه ی نانو در طول تاریخ بشر..... ۴
۱-۳- فناوری نانو..... ۵
۱-۴- نانوتکنولوژی..... ۶
۱-۵- پلیمرهای رسانای جریان الکتریسته..... ۷
۱-۶- گرافین..... ۱۰
۱-۷- روش های ساخت گرافین..... ۱۲
۱-۸- ساختار اتمی گرافین..... ۱۳
۱-۹- خواص الکترونیکی گرافین..... ۱۴
۱-۱۰- ترابرد الکترونی گرافین..... ۱۵
۱-۱۱- خواص اپتیکی گرافین..... ۱۶

فصل دوم: شیمی محاسباتی و مبانی نظری

۲-۱- محاسبات شیمی کوانتومی..... ۱۸

۲-۲- معادله شرودینگر ۱۸
۲-۲-۱- معادله وابسته به زمان شرودینگر(عمومی) ۱۹
۲-۲-۲- معادله وابسته به زمان شرودینگر(برای تک ذره) ۱۹

عنوان **صفحه**

۲-۲-۳- معادله مستقل از زمان شرودینگر(عمومی) ۲۰
۲-۲-۴- معادله مستقل از زمان شرودینگر(یک ذره غیر نسبیتی) ۲۰
۲-۳- پایستگی انرژی ۲۱
۲-۴- روش هارتری – فاک ۲۲
۲-۵- تئوری تابعی چگالی(DFT) ۲۳
۲-۶- اصل عدم قطعیت ۲۴
۲-۷- برنامه کامپیوتری گوسین۰۹ ..... ۲۵

فصل سوم: بحث ونتیجه گیری

۳ـ۱ـ مقدمه ۲۹
۳ـ۲ـ محاسبهٔ گاف انرژی(ΔHLG) ۲۹
۳-۳- محاسبه اختلاف بار الکتریکی اتم های کربن موجود در نانو پلیمرهای هادی
دارای حلقه بنزن ۴۷
۳-۴- محاسبه اختلاف مقادیر لاپلاسین و چگالی ۷۰

فهرست منابع

منابع فارسی ۹۰
منابع غیر فارسی ۹۱

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول ۳-۱مقادیر ΔHLG ۴۵
جدول۳-۲،مقادیراختلاف بارالکتریکی اتم هاازمولکول۱-۰تا۱-۲ ..... ۵۵
جدول۳-۳،مقادیراختلاف بارالکتریکی اتم هاازمولکول۲-۲تا۲-۳ ..... ۵۶
جدول۳-۴،مقادیراختلاف بارالکتریکی اتم هاازمولکول۳-۳تا۲-۴ ..... ۵۷
جدول۳-۵،مقادیراختلاف بارالکتریکی ازمولکول۳-۴تا۱-۵ ..... ۵۸
جدول۳-۶،مقادیراختلاف بارالکتریکی ازمولکول۲-۵تا۵-۵ ..... ۵۹
جدول۳-۷،مقادیراختلاف بارالکتریکی ازمولکول۶-۵تا۳-۶ ..... ۶۰
جدول۳-۸مقادیراختلاف بارالکتریکی ازمولکول۴-۶تا۷-۶ ..... ۶۱
جدول۳-۹، مقادیر اختلاف بارالکتریکی ار مولکول ۱-۷تا۴-۷ ..... ۶۲
جدول ۳-۱۰مقادیر اختلاف بار الکتریکی ازمولکول ۵-۷تا۸-۷ ..... ۶۳
جدول۳-۱۱،مقادیراختلاف بارالکتریکی ازمولکول۱-۸تا۴-۸ ..... ۶۴
جدول۳-۱۲، مقادیراختلاف بارالکتریکی ازمولکول۵-۸تا۸-۸ ..... ۶۵
جدول۳-۱۳،مقادیراختلاف بارالکترکی ازمولکول۹-۸تا۳-۹ ..... ۶۶
جدول ۳-۱۴،مقادیراختلاف بارالکتریکی ازمولکول۴-۹تا۷-۹ ..... ۶۷
جدول۳-۱۵،مقادیراختلاف بارالکتریکی ازمولکول۸-۹تا۱۰-۹ ..... ۶۸
جدول ۳-۱۶مقادیر اختلاف لاپلاسین و چگالی ازمولکول۱-۰تا۱-۳ ..... ۸۰
جدول۳-۱۷،مقادیراختلاف لاپلاسین وچگالی ازمولکول۲-۳تا۳-۴ ..... ۸۱

جدول ۳-۱۸،مقادیراختلاف لاپلاسین وچگالی ازمولکول۴-۴تا۴-۵..... ۸۲
جدول۳-۱۹،مقادیراختلاف لاپلاسین وچگالی ازمولکول۵-۵تا۴-۶..... ۸۳
جدول ۳-۲۰مقادیراختلاف لاپلاسین وچگالی ازمولکول۵-۶تا۳-۷..... ۸۴

عنوان **صفحه**

جدول ۳-۲۱مقادیر اختلاف لاپلاسین وچگالی ازمولکول ۴-۷تا۱-۸..... ۸۵
جدول۳-۲۲،مقادیراختلاف لاپلاسین وچگالی ازمولکول۲-۸تا۷-۸..... ۸۶
جدول۳-۲۳،مقادیراختلاف لاپلاسین وچگالی ازمولکول۸-۸تا۴-۹..... ۸۷
جدول۳-۲۴،مقادیراختلاف لاپلاسین وچگالی ازمولکول۵-۹تا۱۰-۹..... ۸۸

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱ ..... ۳
شکل۲-۱C_{60} که از جستارهای مهم پژوهش‌های وابسته به فناوری نانو است ۶
شکل ۳-۱ساختارشبکه شش ضلعی گرافین ۱۰
شکل ۴-۱انرژی الکترون‌ها با عدد موج kدر گرافین ۱۴
شکل ۵-۱ساختار نواری انرژی گرافین در جهت گیری 'زیک زاکی' ۱۵
شکل۶-۱ساختار نواری انرژی گرافین در جهت گیری صندلی دسته دار ۱۶
شکل ۳-۱ مولکول۱-۰ ..... ۳۰
شکل ۳-۲مولکول ۱-۱ ..... ۳۰
شکل ۳-۳مولکول ۲-۱ ..... ۳۰
شکل۳-۴مولکول۱-۲ ..... ۳۰
شکل ۳-۵مولکول۲-۲ ..... ۳۱
شکل ۳-۶مولکول ۳-۲ ..... ۳۱
شکل ۳-۷مولکول۱-۳ ..... ۳۱
شکل ۳-۸مولکول ۲-۳ ..... ۳۱
شکل ۳-۹مولکول ۳-۳ ..... ۳۱
شکل ۳-۱۰مولکول ۴-۳ ..... ۳۲
شکل ۳-۱۱مولکول۱-۴ ..... ۳۲

شکل ۳-۱۲ مولکول ۲-۴ ..... ۳۲
شکل۳-۱۳مولکول۳-۴ ..... ۳۲
شکل ۳-۱۴مولکول۴-۴ ..... ۳۲

عنوان **صفحه**

شکل۳-۱۵مولکول۵-۴ ..... ۳۳
شکل ۳-۱۶مولکول۱-۵ ..... ۳۳
شکل۳-۱۷مولکول۲-۵ ..... ۳۳
شکل ۳-۱۸مولکول۳-۵ ..... ۳۳
شکل ۳-۱۹مولکول۴-۵ ..... ۳۴
شکل ۳-۲۰مولکول۵-۵ ..... ۳۴
شکل ۳-۲۱مولکول ۶-۵ ..... ۳۴
شکل۳-۲۲مولکول۱-۶ ..... ۳۴
شکل ۳-۲۳مولکول ۲-۶ ..... ۳۵
شکل ۳-۲۴مولکول ۳-۶ ..... ۳۵
شکل ۲۵-۳مولکول۴-۶ ..... ۳۵
شکل۲۶-۳مولکول ۵-۶ ..... ۳۶
شکل ۳-۲۷مولکول ۶-۶ ..... ۳۶
شکل۳- ۲۸مولکول۷-۶ ..... ۳۶
شکل ۳-۲۹مولکول ۱-۷ ..... ۳۶
شکل ۳-۳۰مولکول۲-۷ ..... ۳۷
شکل۳-۳۱مولکول۳-۷ ..... ۳۷
شکل ۳-۳۲مولکول۴-۷ ..... ۳۷
شکل ۳-۳۳مولکول۵-۷ ..... ۳۷
شکل ۳-۳۴مولکول۶-۷ ..... ۳۸
شکل ۳-۳۵مولکول۷-۷ ..... ۳۸
شکل ۳-۳۶مولکول ۸-۷ ..... ۳۸
شکل ۳-۳۷مولکول ۱-۸ ..... ۳۹
شکل ۳-۳۸مولکول۲-۸ ..... ۳۹

شکل ۳-۳۹مولکول ۳-۸ ..... ۳۹
شکل ۳-۴۰مولکول۴-۸ ..... ۳۹
شکل ۳-۴۱مولکول۵-۸ ..... ۴۰

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۴۲مولکول ۶-۸ ..... ۴۰
شکل ۳-۴۳مولکول ۷-۸ ..... ۴۰
شکل ۳-۴۴مولکول ۸-۸ ..... ۴۱
شکل ۳-۴۵مولکول ۹-۸ ..... ۴۱
شکل ۳-۴۶مولکول۱-۹ ..... ۴۱
شکل ۳-۴۷مولکول ۲-۹ ..... ۴۱
شکل ۳-۴۸مولکول ۳-۹ ..... ۴۲
شکل ۳-۴۹مولکول۴-۹ ..... ۴۲
شکل ۳-۵۰مولکول۵-۹ ..... ۴۲
شکل ۳-۵۱مولکول ۶-۹ ..... ۴۲
شکل ۳-۵۲مولکول ۷-۹ ..... ۴۳
شکل ۳-۵۳مولکول ۸-۹ ..... ۴۳
شکل ۳-۵۴مولکول۹-۹ ..... ۴۳
شکل ۳-۵۵مولکول ۱۰-۹ ..... ۴۳
شکل ۳-۵۶مولکول ۱-۰ ..... ۴۸
شکل ۳-۵۷مولکول ۱-۱ ..... ۴۸
شکل ۳-۵۸مولکول ۲-۱ ..... ۴۸
شکل ۳-۵۹مولکول۱-۲ ..... ۴۸
شکل ۳-۶۰مولکول۲-۲ ..... ۴۸
شکل ۳-۶۱مولکول۳-۲ ..... ۴۸
شکل ۳-۶۲مولکول۱-۳ ..... ۴۹
شکل ۳-۶۳مولکول ۲-۳ ..... ۴۹
شکل ۳-۶۴مولکول ۳-۳ ..... ۴۹
شکل۳-۶۵مولکول۴-۳ ..... ۴۹

شکل ۳-۶۶مولکول ۱-۴ ..... ۴۹
شکل ۳-۶۷مولکول ۲-۴ ..... ۴۹
شکل ۳-۶۸مولکول ۳-۴ ..... ۴۹

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۶۹مولکول ۴-۴ ..... ۴۹
شکل ۳-۷۰مولکول ۵-۴ ..... ۵۰
شکل ۳-۷۱مولکول ۱-۵ ..... ۵۰
شکل ۳-۷۲مولکول۲-۵ ..... ۵۰
شکل ۳-۷۳مولکول ۳-۵ ..... ۵۰
شکل ۳-۷۴مولکول ۴-۵ ..... ۵۰
شکل ۳-۷۵مولکول ۵-۵ ..... ۵۰
شکل ۳-۷۶مولکول ۶-۵ ..... ۵۰
شکل ۳-۷۷مولکول۱-۶ ..... ۵۰
شکل ۳-۷۸مولکول۲-۶ ..... ۵۱
شکل ۳-۷۹مولکول ۳-۶ ..... ۵۱
شکل ۳-۸۰مولکول۴-۶ ..... ۵۱
شکل ۳-۸۱مولکول۵-۶ ..... ۵۱
شکل ۳-۸۲مولکول۶-۶ ..... ۵۱
شکل ۳-۸۳مولکول ۷-۶ ..... ۵۱
شکل ۳-۸۴مولکول ۱-۷ ..... ۵۲
شکل ۳-۸۵مولکول۲-۷ ..... ۵۲
شکل ۳-۸۶مولکول ۳-۷ ..... ۵۲
شکل ۳-۸۷مولکول ۴-۷ ..... ۵۲
شکل ۳-۸۸مولکول۵-۷ ..... ۵۲
شکل ۳-۸۹مولکول۶-۷ ..... ۵۲
شکل ۳-۹۰مولکول ۷-۷ ..... ۵۲
شکل ۳-۹۱مولکول۸-۷ ..... ۵۲
شکل ۳-۹۲مولکول ۱-۸ ..... ۵۳

شکل۳-۹۳مولکول۲-۸ ..... ۵۳
شکل ۳-۹۴مولکول ۳-۸ ..... ۵۳
شکل ۳-۹۵مولکول ۴-۸ ..... ۵۳

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۹۶مولکول۵-۸ ..... ۵۳
شکل ۳-۹۷مولکول۶-۸ ..... ۵۳
شکل ۳-۹۸مولکول ۷-۸ ..... ۵۳
شکل ۳-۹۹مولکول۸-۸ ..... ۵۳
شکل ۳-۱۰۰مولکول ۹-۸ ..... ۵۴
شکل۳-۱۰۱مولکول۱-۹ ..... ۵۴
شکل ۳-۱۰۲مولکول ۲-۹ ..... ۵۴
شکل ۳-۱۰۳مولکول۳-۹ ..... ۵۴
شکل ۳-۱۰۴مولکول۴-۹ ..... ۵۴
شکل ۳-۱۰۵مولکول ۵-۹ ..... ۵۴
شکل۳-۱۰۶مولکول۶-۹ ..... ۵۴
شکل ۳-۱۰۷مولکول۷-۹ ..... ۵۴
شکل ۳-۱۰۸مولکول۸-۹ ..... ۵۵
شکل ۳-۱۰۹مولکول ۹-۹ ..... ۵۵
شکل ۳-۱۱۰مولکول۱۰-۹ ..... ۵۵
شکل۳-۱۱۱مولکول ۱-۰ ..... ۷۰
شکل ۳-۱۱۳ مولکول ۲-۱ ..... ۷۱
شکل ۳= ۱۱۲مولکول۱-۱ ..... ۷۱
شکل ۳-۱۱۵مولکول ۲-۲ ..... ۷۱
شکل۳-۱۱۴مولکول۱-۲ ..... ۷۲
شکل ۳-۱۱۷مولکول ۱-۳ ..... ۷۲
شکل ۳-۱۱۶مولکول ۳-۲ ..... ۷۲
شکل۳-۱۱۸مولکول ۲-۳ ..... ۷۲
شکل ۳-۱۱۹مولکول۳-۳ ..... ۷۲

شکل ۳-۱۲۰مولکول ۴-۳ ..... ۷۲
شکل ۳-۱۲۱مولکول ۱-۴ ..... ۷۲
شکل ۳-۱۲۲مولکول ۲-۴ ..... ۷۳

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۱۲۳مولکول ۳-۴ ..... ۷۳
شکل۳-۱۲۴مولکول۴-۴ ..... ۷۳
شکل ۳-۱۲۵مولکول ۵-۴ ..... ۷۳
شکل ۳-۱۲۶مولکول۱-۵ ..... ۷۳
شکل ۳-۱۲۷مولکول۲-۵ ..... ۷۳
شکل ۳-۱۲۸مولکول ۳-۵ ..... ۷۴
شکل ۳-۱۲۹مولکول ۴-۵ ..... ۷۴
شکل۳-۱۳۰مولکول۵-۵ ..... ۷۴
شکل ۳-۱۳۱مولکول ۶-۵ ..... ۷۴
شکل ۳-۱۳۲مولکول ۱-۶ ..... ۷۴
شکل ۳-۱۳۳مولکول ۲-۶ ..... ۷۴
شکل ۳-۱۳۴مولکول ۳-۶ ..... ۷۵
شکل ۳-۱۳۵مولکول ۴-۶ ..... ۷۵
شکل ۳-۱۳۶مولکول ۵-۶ ..... ۷۵
شکل۳-۱۳۷مولکول۶-۶ ..... ۷۵
شکل ۳-۱۳۸مولکول ۷-۶ ..... ۷۵
شکل ۳-۱۳۹مولکول ۱-۷ ..... ۷۵
شکل ۳-۱۴۰مولکول۲-۷ ..... ۷۵
شکل ۳-۱۴۱مولکول۳-۷ ..... ۷۵
شکل ۳-۱۴۲مولکول ۴-۷ ..... ۷۶
شکل ۳-۱۴۳مولکول ۵-۷ ..... ۷۶
شکل ۳-۱۴۴مولکول ۶-۷ ..... ۷۶
شکل ۳-۱۴۵مولکول ۷-۷ ..... ۷۶
شکل ۳-۱۴۵مولکول ۸-۷ ..... ۷۶

شکل ۳-۱۴۶مولکول ۱-۸ ..... ۷۶
شکل ۳-۱۴۷مولکول۲-۸ ..... ۷۶
شکل ۳-۱۴۸مولکول۳-۸ ..... ۷۶

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۱۴۹مولکول ۴-۸ ..... ۷۷
شکل ۳-۱۵۰مولکول ۵-۸ ..... ۷۷
شکل ۳-۱۵۱مولکول ۶-۸ ..... ۷۷
شکل ۳-۱۵۲مولکول ۷-۸ ..... ۷۷
شکل ۳-۱۵۳مولکول ۸-۸ ..... ۷۷
شکل ۳-۱۵۴مولکول ۹-۸ ..... ۷۸
شکل ۳-۱۵۵مولکول ۱-۹ ..... ۷۸
شکل ۳-۱۵۶مولکول ۲-۹ ..... ۷۸
شکل ۳-۱۵۷مولکول ۳-۹ ..... ۷۸
شکل ۳-۱۵۸مولکول ۴-۹ ..... ۷۸
شکل ۳-۱۵۹مولکول۵-۹ ..... ۷۸
شکل ۳-۱۶۰مولکول ۶-۹ ..... ۷۹
شکل۳-۱۶۱مولکول ۷-۹ ..... ۷۹
شکل۳-۱۶۲مولکول ۸-۹ ..... ۷۹
شکل ۳-۱۶۳مولکول ۹-۹ ..... ۷۹
شکل ۳-۱۶۴مولکول ۱۰-۹ ..... ۷۹

چکیده

هدف از انجام این تحقیق مطالعه ی کنترل رسانش در ساختارهای نیمه رسانا می باشد. رسانش در ساختارهای نیمه رسانا را می توان با استفاده از نیمه رساناها و ترانزیستورها کنترل کرد. این پژوهش در سه بخش مورد بررسی قرار می گیرد که در این سه بخش تاثیر چرخش درونی بر رسانش نانوپلیمرهای هادی دارای حلقهٔ بنزن اعمال می شود .در بخش اول به محاسبهٔ گاف انرژی می پردازیم .در بخش دوم به محاسبهٔ اختلاف بار الکتریکی اتم های موجود در نانو پلیمری هادی دارای حلقهٔ بنزن می پردازیم ودر بخش سوم محاسبهٔ اختلاف مقادیر لاپلاسین و چگالی بررسی خواهند شد . نتیجه گیری ازبخش اول: چرخش درونی در نانو پلیمرهای هادی دارای حلقه بترن باعث افزایش HLG می‌شود. پس می‌توان با میزان چرخش ،رسانش را کنترل کرد.اثر چرخش درونی بر نانو پلیمرهای هادی دارای حلقه بترن باعث کاهش انرژی هومو می‌شود. اثر چرخش درونی برنانو پلیمرهای هادی دارای حلقه بترن باعث افزایش انرژی لومو می‌شود. بزرگترین مقدارΔHLGشامل کوچکترین مولکول میشودولی کوچکترین مقدارآن شامل بزرگترین مولکول نیست.مقادیرΔHLG همواره مثبت اند. نتیجه گیری ازبخش دوم:به طور کلی می‌توان به این نتیجه رسید که به هر میزانی که اختلاف بارالکتریکی در اتم های کربن بیشتر باشد تاثیر چرخش در مولکول مورد نظر بیشتر بوده است و به هر میزانی که اختلاف بارالکتریکی در اتم های کربن کمتر باشد تاثیر چرخش در مولکول کمتر است. تعداد مقادیر منفی اختلاف بارالکتریکی مولکول ها بیشتر از مقادیر مثبت اختلاف بارالکتریکی است و دلیل برآن دارد که مقدار بارالکتریکی اتم بعد از چرخش کمتر از مقدار بارالکتریکی اتم قبل از چرخش می‌باشد. نتیجه گیری ازبخش سوم: به طور کلی می‌توان به این نتیجه رسید که در تمام مولکول ها که مقدار اختلاف لاپلاسین آن ها در اتمی که با حلقه بترن تشکیل پیوند داده منفی است و تمام مولکول ها در اثر چرخش ، درپیوندی که اتم با حلقه بترن ایجاد کرده دارای افزایش خصلت کووالانسی شده اند.

نتیجه گیری کل: می توانیم نانورساناهایی باقابلیت رسانش قابل کنترل تهیه کنیم. با استفاده ازچرخش درونی میتوان خواص الکترونی راتغییرداد.

کلمات کلیدی:چرخش درونی،رسانش،نانوپلیمر،حلقه بنزن

فصل اول

نانو تکنولوژی