



دانشگاه شاهرود

دانشکده فیزیک

گرایش حالت جامد

پایان نامه کارشناسی ارشد

عنوان

**مطالعه خواص تراپردی الیگو تیوفن‌ها به کمک محاسبات اولیه**

نگارش

**فرشید عنایتی سنگسرکی**

استاد راهنما

**دکتر طیبه مولاروی**

استاد مشاور

**دکتر راحله پیلهور شهری**

شهریور ۱۳۹۴


دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده: فیزیک

گروه: حالت جامد

پایان نامه کارشناسی ارشد آقای فرشید عنایتی سنگسری  
تحت عنوان: مطالعه خواص تراپردی الیگو تیوفن ها به کمک محاسبات اولیه

در تاریخ ۱۳۹۴/۶/۳۰ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد مورد ارزیابی و با درجه بسیار مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی : دکتر راحله پيله ور شهری		نام و نام خانوادگی : دکتر طيبه مولاروی
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی : دکتر سمیه مهربان		نام و نام خانوادگی : دکتر سعید حسامی بیلرود
			نام و نام خانوادگی :
			دکتر رشید ولی
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :

حاصل این تلاش را با گرم ترین و صمیمی ترین سپاس ها تقدیم می کنم به

مادر مهربانم؛

که شاهکار طبیعت است و تار و پودش را با مهربانی بافته اند، هرچه دارم از  
وجود نازنین او دارم و همیشه مدیون زحمات بی دریغش هستم.

پدر فداکارم؛

که گوهر وجودش را اگر یمانه برای بهتر بودن و ماندنم عطا نمود و چون کوهی  
استوار حامی من در تمام زندگیست.

## شکر و قدردانی

سپاس فراوان خدای را که مرا یاری داد که تا میاموزم آنچه را که نمی دانم و می دانم که یاریم خواهد داد تا میاموزم آنچه را که آموخته ام. اکنون که این پژوهش به یاری ایزدمنان به سرانجام رسیده است بر خود می دانم، از استاد راهنمای گرانقدرم سرکار خانم دکتر طیبه مولروی به پاس جایت ها، راهنمایی ها و زحمت بی شائبه شان در طی انجام این پایان نامه، سپاس گذاری نمایم و شایسته است که مراتب قدردانی ام را به استاد مشاورم سرکار خانم دکتر راحله پهلور شهری که در طی این تحقیق از مشورت های با ارزش ایشان بهره ی فراوانی بردم، تقدیم کنم. همچنین از اساتید ارجمند؛ آقایان دکتر سعید حسامی پهلور و دکتر رشید ولی از دانشگاه دامغان، که زحمت مطالعه و داوری این پایان نامه را پذیرفته اند، سپاسگزارم.

از کلیه اساتید گروه فیزیک حالت جامد دانشگاه شاهرود که افتخار شاگردی در محضرشان را داشته ام و دارم، از آقایان پروفور عشقی، دکتر حرانی زاده، دکتر قاضی، دکتر حسامی پهلور و دکتر ایزدی فر، تقدیر و شکر فراوان را دارم و همچنین از ریاست و مسئول دقت رئیس دانشکده فیزیک، آقایان دکتر مهدی مومنی و سید مهدی آقایان شکر و سپاس فراوان دارم.

لازم می دانم از دوستان عزیزم، آقای مصطفی شعبانی و خانم زکریا جلیلی ایزدی به خاطر همکاری و همراهی و راهنمایی های مفیدشان در طول انجام این پایان نامه کمال شکر و قدردانی را دارم و از دوستان خوبم آقایان محمد افشاری، علی ملا ابراهیمی، علی حیدری، رضاشاهی، احمد کاوه، مجید مرادی، صادق سلطانی، احسان قصابی و محمد رضا رضایی زمان و خانم بهاره صادقی، به خاطر کمک ها و تمام سخاوت خوبی که باهم داشتیم، شکر می کنم. و در پایان، از همه عزیزانی که به نحوی در انجام و پیشرفت این تحقیق نقش بسزایی داشته و ذکر نام آن ها در اینجا مقدور نبوده، کمال شکر و قدردانی را دارم.

فرشید عنایتی سلسرکی (شهریور ۱۳۹۴)

## تعهد نامه

اینجانب فرشید عنایتی سنگسرکی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه مطالعه خواص تراپردی الیگو تیوفن ها به کمک محاسبات اولیه تحت راهنمایی دکتر طیبه مولاروی متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده ( یا بافتهای آنها ) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

تاریخ ۹۵/۴/۳۰

امضای دانشجو

### مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است ) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

\* متن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه های تکثیر شده پایان نامه وجود داشته باشد .

## چکیده

در حال حاضر تحقیقات وسیعی روی استفاده از مولکول‌های آلی به عنوان قطعات الکترونیکی و اسپینترونیک مولکولی در حال انجام است. در اسپنترونیک مولکولی از مولکول‌های آلی به خاطر ساختار قابل کنترلشان، ارزان بودن، انعطاف پذیر بودن و همچنین طول همدوسی اسپینی بزرگی که نسبت به فلزات و نیم رسانا های رایج دارند، به عنوان کانال مولکولی مورد استفاده قرار می‌گیرد. در میان پلیمرهای رسانای الکتریکی، پلی تیوفن و مشتقات آنها به دلیل دارا بودن خواص خوب نوری، الکتروشیمیایی و مغناطیسی از جایگاه بسیار مهمی برخوردار بوده و گستره‌ی کاربردی زیادی دارند.

در این پژوهش ابتدا، خواص ساختاری و الکترونی الیگو تیوفن‌های  $n$  ( $n=1$  الی  $n=10$ ) خالص و متصل به سولفور، با استفاده از رهیافت نظریه تابع چگالی (DFT) و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) توسط کد محاسباتی SIESTA بررسی شده است. نتایج بررسی به ما نشان می‌دهد که اندازه گاف انرژی (HOMO – LUMO) با افزایش طول الیگوتیوفن‌ها، به طور نمایی کاهش می‌یابد و همچنین در الیگوتیوفن‌های خالص خاصیت مغناطیسی دیده نشده است، اما در الیگوتیوفن‌های متصل به سولفور، از پنتاتیوفن به بعد خاصیت مغناطیسی مشاهده شده است.

سپس، با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی (NEGF)، فرمول بندی لاندائور-بوتیکر و کد محاسباتی TRANSIESTA، خواص ترابرد الکترونی سیم‌های مولکولی، الکتروود طلا / الیگو تیوفن‌های  $n$  / الکتروود طلا را برای صفحات (100) و (111) طلا، در دو زاویه صفر و 90 درجه مورد بررسی قرار داده‌ایم. نتایج حاصله از محاسبات بیانگر این است که با افزایش ولتاژ اعمالی در هر الیگوتیوفن، جریان افزایش می‌یابد و با افزایش تعداد حلقه‌ها مولکول تیوفن در ولتاژ مشخص، جریان کاهش می‌یابد. همچنین در بعضی از الیگوتیوفن‌ها، پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) مشاهده شده است.

در مرحله بعد، خواص ترابرد وابسته به اسپین الیگوتیوفن‌ها در پیوندگاه تونلی، الکتروود آهن / الیگوتیوفن‌ها- $n$  / الکتروود آهن برای صفحات (100) و (111) آهن بررسی شده است. نتایجی که از محاسبات مقاومت

مغناطیسی تونلی (TMR) بدست آمده نشان می‌دهد بیشترین درصد مقاومت مغناطیسی تونلی برابر با ۱۷۳۰٪ می‌باشد. نتایجی که از محاسبات اثر فیلترینگ اسپینی (SFE) بدست آمده نشان می‌دهد که بیشترین مقدار در حدود ۹۹/۶۶٪ می‌باشد. با توجه به نتایج حاصله از این پژوهش، الیگوتیوفن‌ها به‌عنوان کاندیدای مناسب جهت کاربرد در قطعات اسپینترونیک مولکولی، سلول‌های حافظه‌های مغناطیسی و کلید زنی پیشنهاد می‌شود.

**کلمات کلیدی:** الیگوتیوفن، نظریه تابع چگالی، کد SIESTA و TRANSIESTA، تابع گرین غیرتعادلی (NEGF)، مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR)، اسپینترونیک مولکولی، مقاومت مغناطیسی تونلی (TMR)، اثر فیلترینگ اسپینی (SFE).



## لیست مقالات مستخرج از پایان نامه:

1- F. Enayati , T. Movlarooy, R. Pilevarshahri, (2014). "Ab initio study of electronic properties of n-thiophene molecules", proceedings of 17th Iranian Physical Chemistry Conference, 21-23 October, K. N. Toosi University of Technology Tehran, Iran, Page: 876-878.

2- F. Enayati , T. Movlarooy, R. Pilevarshahri, (2014). "Electronic transport properties of oligothiophenes.", proceedings of 17th Iranian Physical Chemistry Conference, 21-23 October, K. N. Toosi University of Technology Tehran, Iran, Page: 879-880.

۳- عنایتی ، فرشید ؛ مولاروی، طیبه؛ پیله ورشهری، راحله، (۱۳۹۳)، "خواص الکترونی و ترابرد الکترونی سیم مولکولی طلا/ الیگوتیوفن/ طلا تحت میدان الکتریکی"، دوازدهمین کنفرانس فیزیک ماده چگال، ۸ و ۹ بهمن ماه ۱۳۹۳، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان.

# فهرست مطالب

پیشگفتار..... ۱

## فصل اول: مقدمه‌ای بر فناوری نانو و الکترونیک مولکولی

۱-۱ مقدمه..... ۸

۲-۱ تعریف فناوری نانو..... ۹

۳-۱ نانو مواد..... ۱۰

۴-۱ الکترونیک مولکولی..... ۱۱

۵-۱ مزایای الکترونیک مولکولی..... ۱۴

۶-۱ مثال‌ها..... ۱۵

## فصل دوم: اسپینترونیک مولکولی آلی

۱-۲ مقدمه..... ۱۸

۲-۲ اسپینترونیک آلی..... ۱۹

۲۳	.....	۳-۲ اثرات اسپینترونیکی
۲۳	.....	۱-۳-۲ اثر مقاومت مغناطیسی بزرگ (GMR)
۲۵	.....	۲-۳-۲ اثر مقاومت مغناطیسی تونلی (TMR)
۲۷	.....	۴-۲ کاربردهای اسپینترونیکی
۲۷	.....	۱-۴-۲ شیر اسپینی
۲۹	.....	۲-۴-۲ ترانزیستور اثر میدانی اسپینی (spin-FET)
۳۰	.....	۳-۴-۲ دیودهای تابشی نوری اسپینی (spin(LED)

## فصل سوم: پلیمرهای رسانا

۳۲	.....	۱-۳ مقدمه
۳۳	.....	۲-۳ پلیمرهای رسانا
۳۴	.....	۱-۲-۳ پلیمرهای رسانای الکتریکی
۳۴	.....	۳-۳ کاربردهای پلیمرهای رسانا
۳۶	.....	۴-۳ تیوفن
۳۷	.....	۵-۳ پلی تیوفن
۳۸	.....	۶-۳ پژوهش‌های اخیر در مورد پلی تیوفن و دیگر پلیمرها

## فصل چهارم: نظریه تابع چگالی و تابع گرین غیر تعادلی

- ۱-۴ مقدمه ..... ۴۲
- ۲-۴ نظریه تابعی چگالی ..... ۴۲
- ۱-۲-۴ مسئله بس ذره‌ای ..... ۴۲
- ۲-۲-۴ نظریه هوهنبرگ - کوهن ..... ۴۴
- ۳-۲-۴ معادلات کوهن-شم ..... ۴۴
- ۴-۲-۴ تابعی‌های تبادلی - همبستگی ..... ۴۵
- ۱-۴-۲-۴ تقریب چگالی موضعی (LDA) ..... ۴۶
- ۲-۴-۲-۴ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) ..... ۴۶
- ۳-۴ روش‌های حل معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم ..... ۴۷
- ۱-۳-۴ کد SIESTA ..... ۴۸
- ۱-۱-۳-۴ مجموعه پایه جایگزیده اوربیتال اتمی ..... ۴۸
- ۲-۱-۳-۴ شبه پتانسیل ..... ۵۰
- ۴-۴ مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) ..... ۵۳
- ۵-۴ فرمالیسم لاندائور - بوتیکر ..... ۵۴
- ۶-۴ مقدمه بر تابع گرین غیر تعادلی ..... ۵۶

۴-۶-۱ مدل ساده برای تراپرد غیرتعدالی..... ۵۷

۴-۶-۲ روش نظری در کد TRANSIESTA..... ۶۱

۴-۶-۳ برپایی سیستم..... ۶۲

۴-۶-۴ محاسبه جریان..... ۶۴

## فصل پنجم: بررسی خواص الکترونی و تراپردی الیکومرهای تیوفن در اتصال با الکتروود طلا

### Au/OligomerThiophene/Au

۵-۱ مقدمه..... ۶۸

۵-۲ روش محاسبه..... ۶۸

۵-۳ بهینه‌سازی پارامترها..... ۶۹

۵-۳-۱ انرژی قطع..... ۶۹

۵-۳-۲ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون..... ۷۰

۵-۴ تعیین پارامترهای ورودی الیکومرهای تیوفن خالص و متصل به اتم سولفور..... ۷۱

۵-۴-۱ انرژی قطع..... ۷۱

۵-۴-۲ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون..... ۷۳

۵-۴-۳ مجموعه پایه‌ها..... ۷۳

۵-۵ بهینه‌سازی ساختار..... ۷۴

- ۶-۵ بررسی خواص الکترونی الیگو تیوفن‌های خالص و متصل به اتم سولفور..... ۷۵
- ۱-۶-۵ بررسی ساختار نواری..... ۷۵
- ۲-۶-۵ محاسبه چگالی حالت‌های کلی (DOS) و جزئی (PDOS)..... ۷۸
- ۷-۵ بررسی ترابرد الکترونی مولکول n-تیوفن در اتصال Au/OligoThiophene/Au..... ۸۳
- ۱-۷-۵ ترابرد الکترونی الیگو تیوفن‌ها متصل شده با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا..... ۸۵
- ۲-۷-۵ ترابرد الکترونی الیگو تیوفن‌ها متصل شده با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۰۰) طلا..... ۸۹
- ۳-۷-۵ ترابرد الکترونی الیگو تیوفن‌ها متصل شده با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا..... ۹۲
- ۴-۷-۵ ترابرد الکترونی الیگو تیوفن‌ها متصل شده با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا..... ۹۵
- ۸-۵ بررسی اثر طول، زاویه و صفحات اتصال بر روی ترابرد الیگو تیوفن..... ۹۸
- ۹-۵ جمع‌بندی..... ۱۰۰

## فصل ششم: ترابرد اسپین الیکومرهای تیوفن در اتصال Fe/Oligo Thiophene/Fe

- ۱-۶ مقدمه..... ۱۰۲
- ۲-۶ اثر TMR..... ۱۰۲
- ۳-۶ اثر اسپین فیلترینگ (SFE)..... ۱۰۴

- ۴-۶ بررسی مساله..... ۱۰۵.....
- ۵-۶ بررسی ترابرد اسپینی مولکول n-تیوفن در اتصال Fe/OligoThiophene/Fe..... ۱۰۶.....
- ۱-۵-۶ ترابرد اسپینی الیگو تیوفن‌ها متصل شده با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن..... ۱۰۸.....
- ۲-۵-۶ ترابرد اسپینی الیگو تیوفن‌ها متصل شده با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) آهن..... ۱۲۷.....
- ۶-۶ جمع‌بندی..... ۱۳۸.....
- پیشنهادات برای کارهای آینده..... ۱۴۰.....
- منابع..... ۱۴۱.....

# فهرست شکل‌ها

شکل ۱: (الف) نمودار روند توسعه‌ی تعداد ترازیستورها بر مبنای قانون مور (ب) روند کوچک‌سازی اندازه

ترازیستورها..... ۲

شکل ۲-۱: نمایش طرح واره از یک دریچه اسپینی. دو الکتروود فرومغناطیس (FM) (جهت مغناش به وسیله

پیکان‌ها مشخص شده) که توسط یک جداکننده غیرمغناطیسی (NM) از یکدیگر مجزا شده‌اند. یک سد تونلی

میان الکتروود فرومغناطیس و جداکننده غیرمغناطیسی می‌تواند سینگنال اسپین را افزایش دهد. (الف) لامپ

طرح وار رسانایی بالا در مورد مغناطش موازی، و (ب) لامپ طرح وار رسانایی پایین در مورد مغناطش

پادموازی را نشان می‌دهد. (ج) دریچه اسپینی با جدا کننده غیرمغناطیسی را نشان

می‌دهد..... ۲۱

شکل ۲-۲: تغییرات مقاومت بر حسب میدان مغناطیسی خارجی..... ۲۴

شکل ۲-۳: دو هندسه‌ی متفاوت برای قطعات GMR الف) جریان در صفحه (CIP) ب) جریان عمود بر

صفحه (CPP)..... ۲۵

شکل ۲-۴: یک قطعه TMR تشکیل شده از دو الکتروود فرومغناطیس (رنگ آبی) که توسط یک سد تونلی

نارسانا (خاکستری) از هم جدا شده‌اند. نمایش زیر نوارهای اسپینی الکتروودهای فرومغناطیسی الف) آرایش

موازی ب) آرایش پاد موازی..... ۲۶

شکل ۲-۵: نمایش یک شیر اسپینی و اختلاف مقاوت آن بر اساس جهت گیری مغناطش دولایه‌ی

فرومغناطیس نسبت به هم. مغناطش یک لایه فرومغناطیس توسط یک لایه آنتی فرومغناطیس ثابت نگه

داشته می‌شود در حالیکه مغناطش لایه دیگر با اعمال میدان خارجی مغناطیسی می‌تواند تغییر کند.



- مغناطش موازی لایه‌های فرومغناطیس کمترین مقاومت و حالت پاد موازی، بیشترین مقاومت جریان را دارد..... ۲۸
- شکل ۲-۶: نمایش ترازستور اسپینی در دو وضعیت الف) روشن ب) خاموش. کانال میانی نیم رساناست (آبی)..... ۲۹
- شکل ۲-۷: تزریق حفره‌هایی با قطبش اسپینی، در یک دیود نوری تابشی، توسط نیم‌رسانای رقیق شده‌ی مغناطیسی (DMS) (Ga,Mn) As.  $\sigma^+$  بیانگر نور قطبیده دایروی تابشی، از لایه‌ی چاه کوانتومی می‌باشد..... ۳۰
- شکل ۳-۱: نمایش ساختار مولکول تیوفن..... ۳۶
- شکل ۳-۲: اتصالات مولکول تیوفن در حضور جایگزینی بنزن با گروه‌های ترکیبات شیمیایی..... ۳۹
- شکل ۳-۳: مقادیر گشتاور مغناطیسی تابعی از طول مولکول n..... ۴۰
- شکل ۳-۴: مقادیر گاف نواری خانواده اسن بر حسب n..... ۴۰
- شکل ۳-۵: نمودار رسانندگی تابعی از تعداد حلقه‌های الیگوتیوفن..... ۴۰
- شکل ۴-۱: مشخصه جریان-ولتاژ دیود تونل زنی..... ۵۳
- شکل ۴-۲: الف) شکل طرحوار دو پراب جریان/ولتاژ که از طریق یک سیستم تک تراز انرژی  $\epsilon$  به هم متصل شده اند  $\mu_1 < \epsilon < \mu_2$ . ب) تراز انرژی  $\epsilon$  در اثر جفت شدگی با الکترودها طبق اصل عدم قطعیت به اندازه  $\gamma$  پهن می‌شود..... ۵۷
- شکل ۴-۳: مدلی برای ترابرد الکترونی برای یک مولکول یا یک نانو سیم کوتاه..... ۶۲
- شکل ۴-۴: طرح واره‌ای از خود انرژی‌های به جای الکترودهای نامتناهی در ترابرد الکترونی در یک

- مولکول.....۶۴
- شکل ۴-۵: طرح شماتیک روش خودسازگار برای مدل NEGF+DF.....۶۵
- شکل ۵-۱: نمودار انرژی قطع بر حسب انرژی کل الف: الیگو دی تیوفن خالص ب: الیگو دی تیوفن متصل به اتم سولفور.....۷۲
- شکل ۵-۲: ساختار نواری الیگو تیوفن‌های خالص.....۷۶
- شکل ۵-۳: ساختار نواری الیگو تیوفن‌های متصل به اتم سولفور.....۷۶
- شکل ۵-۴: روند تغییرات گاف نواری به صورت تابعی از  $n$  تعداد حلقه‌های تیوفنی. الف) الیگو تیوفن‌های خالص ب) الیگو تیوفن‌های متصل به اتم سولفور.....۷۸
- شکل ۵-۵: چگالی حالت‌های کلی الیگو تیوفن‌های خالص.....۸۰
- شکل ۵-۶: چگالی حالت‌های کلی الیگو تیوفن‌های متصل به اتم سولفور.....۸۰
- شکل ۵-۷: گشتاور مغناطیسی محاسبه شده در الیگو تیوفن‌های متصل به اتم سولفور به تابعی از طول مولکول.....۸۱
- شکل ۵-۸: نمودار چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های C، H و S در الیگو تیوفن‌های خالص.....۸۲
- شکل ۵-۹: نمودار چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های C، H و S در الیگو تیوفن‌های متصل به اتم سولفور.....۸۲
- شکل ۵-۱۰: ساختارهای سیم مولکولی مدل سازی شده برای الیگو تیوفن‌های (دی تیوفن، تری تیوفن، پنتاتیوفن، هگزاتیوفن، هپتاتیوفن و اکتاتیوفن)، که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند.....۸۴

- شکل ۵-۱۱: ساختارهای سیم مولکولی مدل سازی شده برای الیگو تیوفن‌های (مونوتیوفن، دی تیوفن، تری تیوفن و تتراتیوفن)، که با زاویه ۹۰ درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند..... ۸۴
- شکل ۵-۱۲: منحنی جریان-ولتاژ برای کلیه ساختارهای الیگوها که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند..... ۸۷
- شکل ۵-۱۳: الف) ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم و معکوس، مونوتیوفن که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند. ب) نمودار ضریب تراپردی برای ولتاژ صفر، تمامی الیگوهای n-تیوفن..... ۸۸
- شکل ۵-۱۴: منحنی جریان-ولتاژ برای کلیه ساختارها که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند..... ۹۱
- شکل ۵-۱۵: ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم، الیگو تیوفن‌های که با زاویه ۹۰ درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند. الف) دی تیوفن ب) تری تیوفن..... ۹۱
- شکل ۵-۱۶: منحنی جریان-ولتاژ برای کلیه ساختارها که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند..... ۹۳
- شکل ۵-۱۷: ضریب تراپردی کلیه ولتاژها را برای ، تتراتیوفن برای حالتی که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده است..... ۹۴
- شکل ۵-۱۸: منحنی جریان-ولتاژ برای کلیه ساختارها که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند..... ۹۷
- شکل ۵-۱۹: ضریب تراپردی ولتاژهای معکوس، الیگو تیوفن‌های که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند. الف) پنتاتیوفن ب) هگزاتیوفن..... ۹۷

شکل ۵-۲۰: ضریب تراپردی ولتاژ  $V = 1/0$  ، الیگو تیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند. الف) دی تیوفن ب) تتراتیوفن ج) هگزاتیوفن..... ۹۸

شکل ۵-۲۱: الف) ضریب تراپردی ولتاژ  $V = 1/0$  ، تتراتیوفن که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده است ب) ضریب تراپردی ولتاژ  $V = 1/0$  ، تتراتیوفن که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده است..... ۹۹

شکل ۵-۲۲: الف) ضریب تراپردی ولتاژ  $V = 1/0$  ، تتراتیوفن که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده است ب) ضریب تراپردی ولتاژ  $V = 1/0$  ، تتراتیوفن که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده است..... ۹۹

شکل ۶-۱: طرح واره‌ای از تونل‌زنی یک موج الکترون از یک سد پتاسیل..... ۱۰۲

شکل ۶-۲: منحنی افزایش چگالی داده‌ها بر حسب سال..... ۱۰۳

شکل ۶-۳: ساختارهای پیوندگاه تونلی مولکولی مدل سازی شده برای الیگو تیوفن‌های (مونوتیوفن، دی تیوفن، تتراتیوفن و هگزاتیوفن)، که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) آهن متصل شده‌اند..... ۱۰۷

شکل ۶-۴: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UU متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن ج) تتراتیوفن د) هگزاتیوفن..... ۱۱۰

شکل ۶-۵: چگالی حالت‌های کلی الکتروود آهن در حالت اسپین بالا..... ۱۱۱

شکل ۶-۶: درصد SFE های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UU متصل‌اند..... ۱۱۱

شکل ۶-۷: ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم، الیگو تیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن

در حالت موازی UU متصل شده‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن..... ۱۱۲

شکل ۶-۸: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

UD متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن ج) تتراتیوفن د)

هگزاتیوفن..... ۱۱۴

شکل ۶-۹: درصد SFE های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UD

متصل‌اند..... ۱۱۴

شکل ۶-۱۰: ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم، الیگو تیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن

در حالت موازی UD متصل شده‌اند. الف) تتراتیوفن ب) هگزاتیوفن..... ۱۱۵

شکل ۶-۱۱:  $TMR_{UU}$  های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن

متصل‌اند..... ۱۱۶

شکل ۶-۱۲: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

DD متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن ج) تتراتیوفن د) هگزاتیوفن..... ۱۱۸

شکل ۶-۱۳: چگالی حالت‌های الکتروود آهن در حالت اسپین پایین..... ۱۱۹

شکل ۶-۱۴: درصد SFE های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت DD

متصل‌اند..... ۱۱۹

شکل ۶-۱۵: ضریب تراپردی ولتاژهای معکوس، الیگو تیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن

در حالت موازی DD متصل شده‌اند. الف) مونوتیوفن ب) تتراتیوفن..... ۱۲۰

شکل ۶-۱۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

DU متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن ج) تتراتیوفن د) هگزاتیوفن..... ۱۲۲

شکل ۶-۱۷: درصد SFE های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت DU

متصل‌اند.....۱۲۲

شکل ۶-۱۸: ضریب تراپردی ولتاژهای معکوس، الیگو تیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن

در حالت موازی DU متصل شده‌اند. الف) دی تیوفن ب) هگزاتیوفن.....۱۲۳

شکل ۶-۱۹: TMR<sub>DD</sub> های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن

متصل‌اند.....۱۲۴

شکل ۶-۲۰: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

NS متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن ج) تتراتیوفن د) هگزاتیوفن.....۱۲۶

شکل ۶-۲۱: درصد SFE های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت NS

متصل‌اند.....۱۲۶

شکل ۶-۲۲: ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم، الیگو تیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن

در حالت موازی NS متصل شده است.....۱۲۷

شکل ۶-۲۳: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت

UU متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن.....۱۲۸

شکل ۶-۲۴: درصد SFE های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UU

متصل‌اند.....۱۲۸

شکل ۶-۲۵: ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم، مونوتیوفن‌های که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UU متصل

شده‌اند.....۱۲۹

شکل ۶-۲۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت

UD متصل اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن..... ۱۳۰

شکل ۶-۲۷: درصد SFE های بدست آمده از الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UD

متصل اند..... ۱۳۰

شکل ۶-۲۸: ضریب تراپردی ولتاژهای معکوس، مونوتیوفن که به صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UD متصل

شده اند..... ۱۳۱

شکل ۶-۲۹:  $TMR_{UU}$  های بدست آمده از الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن

متصل اند..... ۱۳۱

شکل ۶-۳۰: جریان های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت

DD متصل اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن..... ۱۳۲

شکل ۶-۳۱: درصد SFE های بدست آمده از الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DD

متصل اند..... ۱۳۳

شکل ۶-۳۲: ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم، مونوتیوفن که به صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DD متصل

شده اند..... ۱۳۳

شکل ۶-۳۳: جریان های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت

DU متصل اند. الف) مونوتیوفن ب) دی تیوفن..... ۱۳۴

شکل ۶-۳۴: درصد SFE های بدست آمده از الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DU

متصل اند..... ۱۳۵

شکل ۶-۳۵: ضریب تراپردی ولتاژهای معکوس، مونوتیوفن که به صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DU متصل

شده اند..... ۱۳۵

شکل ۶-۳۶:  $TMR_{DD}$  های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن

متصل‌اند..... ۱۳۶

شکل ۶-۳۷: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت

NS متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن..... ۱۳۷

شکل ۶-۳۸: درصد FES های بدست آمده از الیگو تیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت NS

متصل‌اند..... ۱۳۷



# فهرست جداول

جدول ۵-۱: انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای دوگروه الیگو دی تیوفن خالص و متصل به اتم

سولفور..... ۷۲

جدول ۵-۲: پارامترهای ورودی محاسبات، الیگو تیوفن‌ها..... ۷۴

جدول ۵-۳: گاف نواری الیگوهای تیوفن خالص و موقعیت تراز فرمی آن‌ها و مقادیر

LUMO,HOMO..... ۷۷

جدول ۵-۴: گاف نواری الیگوهای تیوفن متصل به سولفور و موقعیت تراز فرمی آن‌ها و مقادیر

LUMO,HOMO..... ۷۷

جدول ۵-۵: پارامترهای ورودی محاسبات خواص تراپردی، الیگو تیوفن‌ها..... ۸۵

جدول ۵-۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با زاویه صفر درجه با صفحات

(۱۰۰) طلا متصل‌اند..... ۸۶

جدول ۵-۷: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات

(۱۰۰) طلا متصل‌اند..... ۸۹

جدول ۵-۸: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با زاویه صفر درجه با صفحات

(۱۱۱) طلا متصل‌اند..... ۹۲

جدول ۵-۹: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن‌هایی که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات

۹۵..... (۱۱۱) طلا متصل اند

جدول ۱-۶: پارامترهای ورودی محاسبات خواص ترابرد اسپینی، الیگو تیوفن ها..... ۱۰۶

جدول ۲-۶: جریان های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

UU متصل اند..... ۱۰۹

جدول ۳-۶: جریان های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

UD متصل اند..... ۱۱۳

جدول ۴-۶: مقادیر  $TMR_{UU}$  بدست آمده از الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن

متصل اند..... ۱۱۶

جدول ۵-۶: جریان های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

DD متصل اند..... ۱۱۷

جدول ۶-۶: جریان های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

DU متصل اند..... ۱۲۱

جدول ۷-۶: مقادیر  $TMR_{DD}$  بدست آمده از الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن

متصل اند..... ۱۲۴

جدول ۸-۶: جریان های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

NS متصل اند..... ۱۲۵

## پیشگفتار

در سه دهه اخیر پیشرفت فناوری الکترونیک و رایانه مبتنی بر توسعه هر چه سریع تر و قدرتمندتر ابزار و وسایل مورد نیاز در این صنعت، قرار گرفته است. اما میزان این پیشرفت و نیز سرعت و کارایی این وسایل، به فرآیند کوچک سازی اجزاء و مدارات در قطعات الکترونیکی بستگی دارد.

مدارهای مجتمع (IC)<sup>۱</sup> امروزی شامل میلیون ها ترانزیستور و قطعه الکترونیکی مرتبط به هم می باشند. این ترانزیستورها به کمک مفهوم حضور یا غیاب بار الکتریکی، داده ها را به صورت بیت های صفر و یک ذخیره می کنند. در واقع رشد میکروالکترونیک در قانون مور<sup>۲</sup> خلاصه می شود. مور یک رشد نمایی در تعداد ترانزیستورها بر IC، مشاهده کرد و پیش بینی کرد این روند در آینده نیز ادامه خواهد داشت [۱]. بنابراین بر اساس این قانون در هر ۱۸ ماه تعداد ترانزیستورها بر IC دو برابر می شود و در نتیجه پردازش اطلاعات نیز به همان نسبت افزایش می یابد. در شکل (۱) نمودار قانون مور و همچنین روند کوچک سازی اندازه ترانزیستورها نشان داده شده است. به اعتقاد کارشناسان، میکروالکترونیک بر پایه سیلیکون به دلیل رفتارهای فیزیکی حاکم بر قطعات CMOS<sup>۳</sup> و ایجاد محدودیت هایی که برای فناوری های ساخت وجود دارد، نخواهد توانست روند پیش بینی شده توسط مور را برای مدت طولانی ادامه دهد [۲-۵]. کوچک سازی عناصر مدارها تا حد نانومتری بر پایه فناوری سیلیکون مشکلاتی از قبیل ظرفیت خازنی محل جفت شدن<sup>۴</sup> اجزاء، اتلاف گرمایی و آلاینده یکنواخت سیلیکون در این ابعاد را به همراه خواهد داشت. با حل این مشکلات باز هم فرآیند کوچک سازی مدارهای مجتمع در ابعاد نانو در تضاد با قوانین پایه ای فیزیک است.

---

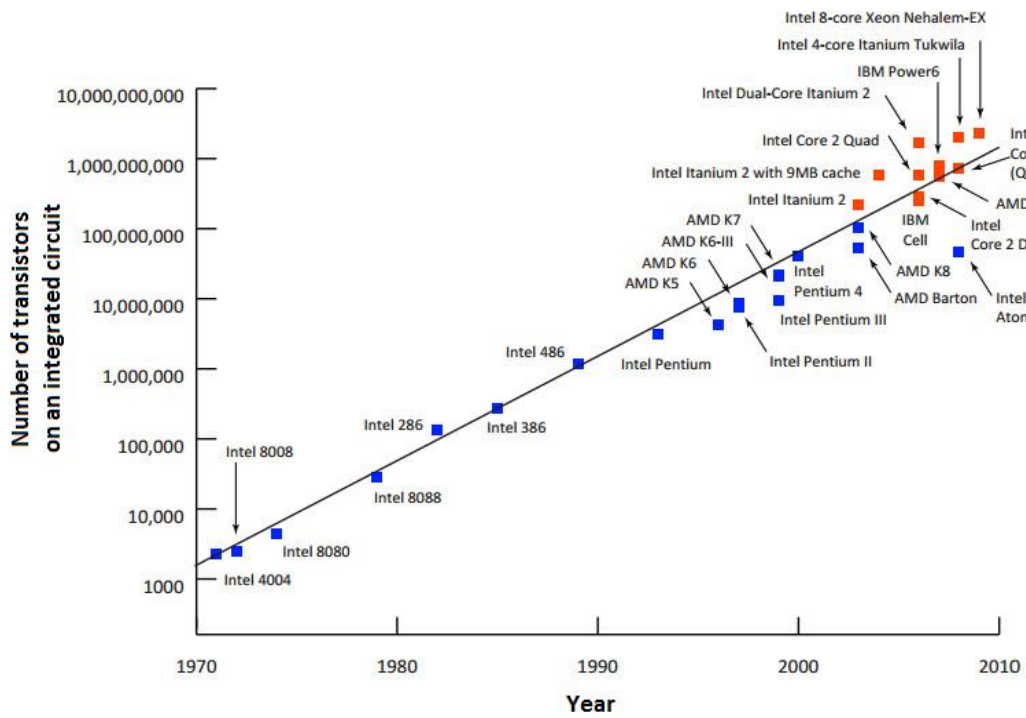
<sup>1</sup> Integrated Circuit

<sup>2</sup> Moores' Law

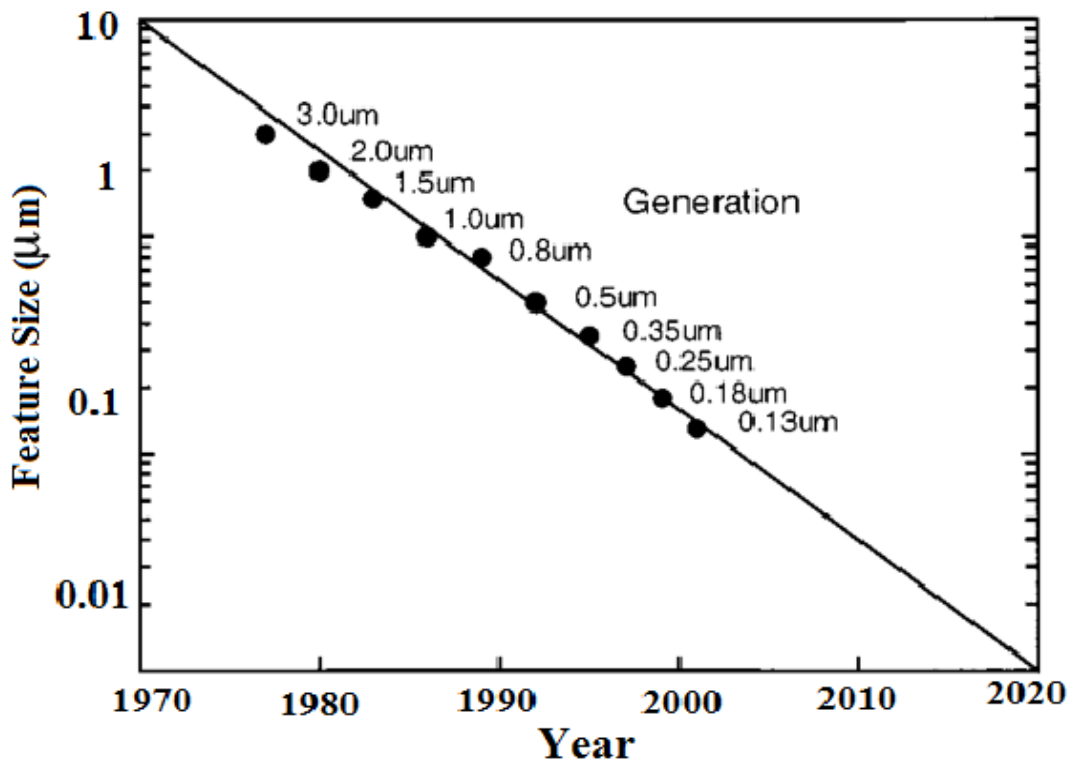
<sup>3</sup> Complementary Metal-Oxide Semiconductor

<sup>4</sup> Coupling

(الف)



(ب)



شکل ۱: (الف) نمودار روند توسعه‌ی تعداد ترازیستورها بر مبنای قانون مور (ب) روند کوچک‌سازی اندازه ترازیستورها [۶].

در قطعات الکترونیکی سیلیکونی بلوری<sup>۱</sup> الکترون‌ها می‌توانند در داخل نوارهای مجاز انرژی سیلیکون حرکت کنند و با اعمال یک ولتاژ خارجی الکترون‌ها انرژی کسب کرده و در داخل قطعه حرکت می‌کنند. اما با کاهش ابعاد قطعه سیلیکونی در مقیاس نانو به علت محدودیت‌های کوانتومی طیف انرژی دیگر به صورت ترازهای انرژی پیوسته ظاهر نخواهد شد و ترازهای انرژی کوانتیده می‌شود. در این وضعیت برای ادامه روند کوچک‌سازی مدارهای مجتمع، باید فناوری حالت جامد مرسوم قبلی، با نسلی جدید از قطعات الکترونیکی بر پایه اثرات کوانتومی جایگزین شود. این قطعات به دو دسته تقسیم می‌شوند:

۱- قطعات نانو الکترونیک مبتنی بر اثرات کوانتومی

۲- قطعات بر پایه الکترونیک مولکولی

دسته اول همان قطعات قدیمی هستند که کوچکتر شده و سرعت پردازش اطلاعات در آنها بالا رفته است. در این فناوری قوانین حاکم بر قطعات، قوانین مکانیک کوانتوم است. اما مواد به کار رفته در ساخت مدارهای مجتمع تغییر نمی‌کند. قطعات تونل‌زنی تشدید<sup>۲</sup> و ترانزیستورهای تک‌الکترونی از جمله قطعات نانو الکترونیک هستند که تمامی این قطعات شامل تعداد معینی از اتم‌ها هستند که الکترون‌ها در آن محدودند. کوچک‌سازی عناصر مدارها تا حد نانومتری پژوهشگران را به سمت ساخت دسته دیگری از قطعات نانو الکترونیک در اندازه مولکولی رهنمون کرد [۷]. واژه الکترونیک مولکولی برای اولین بار در سال ۱۹۸۰ میلادی به‌طور جدی به کار گرفته شد. با وجود این تا زمانی که نانوفناوری ظهور نکرده بود و ساختمان مولکولی دستگاه‌ها با قدرت تفکیک اتمی شناخته نشده بودند، نیازی به الکترونیک مولکولی احساس نمی‌شد. اما با ظهور دانش جدید، الکترونیک مولکولی به‌عنوان یکی از شاخه‌های جدید دانش نانوفناوری شناخته شد. این واژه گاهی برای تعریف یک دسته جدیدی

---

<sup>1</sup> Crystal

<sup>2</sup> Resonant Tunneling Devices

از دستگاه‌هایی با قدرت تفکیک مولکولی نظیر میکروسکوپ تونلی روبشی (STM)<sup>۱</sup> به کار برده می‌شود. اگر مسیر پیشرفت به سمت کوچک‌سازی ادامه یابد در این صورت به ترکیباتی می‌رسیم که اندازه‌ای در حدود ۱ nm دارند. در این روند کوچک‌سازی ما به یک فاز جدید از الکترونیک و شیمی می‌رسیم که اصطلاحاً الکترونیک مولکولی نامیده می‌شود.

سه دسته عمومی از مولکول‌هایی که می‌توانند در الکترونیک مولکولی مورد استفاده قرار گیرند عبارتند از:

۱- مولکول‌های زیستی بزرگ (DNA و پروتئین)

۲- مولکول‌های آلی با پیوند کووالانسی (پلیمرهای همیوگ)

۳- گروه‌های کربن خالص (فولرین و نانولوله‌ها)

هم‌اکنون الکترونیک مولکولی توسط پژوهشگران زیادی مورد بررسی و کاوش قرار گرفته است تا بتواند در طولانی مدت به‌عنوان جایگزین مناسب برای ساخت قطعات در ابعاد مولکولی و همچنین ادامه‌ی تحقق قانون مور تا مقیاس نانو مورد استفاده قرار گیرد. الکترونیک مولکولی امروزه به طبیعت زنده و روندهای مولکولی حیات روی آورده است، چرا که طبیعت زنده پس از گذران میلیون‌ها سال تغییر و تحول در جهت انطباق با شرایط گوناگون محیطی، به تکامل یافته‌ترین سازوکار مولکولی دست یافته است. در راستای کوچک‌سازی قطعات الکترونیکی و افزایش سرعت پردازش داده‌ها پژوهشگران به ویژگی دیگر الکترون یعنی اسپین روی آوردند [۹-۸]. اسپین یک پدیده کوانتومی است که بسته به جهت میدان مغناطیسی می‌تواند در جهت بالا یا پایین قرار گیرد و بر این اساس می‌توان آن را به منطق صفر و یک مربوط کرد. در دستگاه‌های اسپینترونیک<sup>۲</sup>، اسپین الکترون به خوبی بار الکترون می‌تواند برای ذخیره، پردازش و انتقال اطلاعات استفاده شود [۱۱-۱۰] و برخلاف حالت‌های بار

<sup>1</sup> Scanning Tunneling Microscopy

<sup>2</sup> Spintronics

الکترون که به آسانی توسط پراکندگی‌ها یا برخورد با آلاینده‌ها، ناکاملی‌ها و سایر الکترون‌ها از بین می‌رود، طول همدوسی بلند و زمان واهلش طولانی اسپین باعث باقی ماندن آن برای مدت طولانی در یک حالت می‌شود، برتری دیگر اسپین نسبت به بار الکتریکی این است که اسپین الکترون را می‌توان به آسانی به وسیله میدان مغناطیسی خارجی کنترل کرد که از این ویژگی برای طراحی و ساخت دستگاه‌های اسپینترونیکی استفاده می‌شود [۱۸-۱۲]. مزیت‌های استفاده از وسایل بر پایه ترابرد اسپینی نسبت به وسایل شناخته شده بر پایه ترابرد بار الکتریکی به قرار زیر است:

۱- وسایل بر پایه ترابرد اسپین این توانایی را دارند که قانون مور را برای ۵۰ تا ۱۰۰ سال آینده ادامه دهند.

۲- این وسایل سبکتر، سریع‌تر و مصرف انرژی پایین‌تری نسبت به وسایل بر پایه ترابرد بار دارند.

۳- رایانه‌های کوانتومی با استفاده از اسپین می‌توانند تحقق یابند.

۴- سرعت انتقال داده‌ها در وسایل مبتنی بر پایه مقاومت مغناطیس بزرگ امروزی بالاتر از ۵ پنتا بیت می‌رسد.

۵- وسایل مبتنی بر پایه اسپینترونیکی می‌توانند پردازش و ذخیره داده‌ها را به‌طور هم‌زمان انجام دهند.

۶- هم‌اکنون یک بیت با استفاده از ۱۰۱۸ اتم کد گذاری می‌شود، که در اسپینترونیکی این عدد به رقم ۱۰۰۰ کاهش یافته است.

پژوهش‌های جدید مبتنی بر طراحی قطعاتی به صورت الکتروود- مولکول- الکتروود انجام می‌شود که در آن انواع مولکول‌ها برای طراحی این ساختارها استفاده می‌شود. روش‌های ساخت نیز متنوع و معمولاً تکنیک‌های لیتوگرافی با میکروسکوپ روبشی و یا براساس روش‌های خود سامانی می‌باشد. در

حال حاضر مهم‌ترین قطعات الکترونیکی ساخته شده بر پایه مولکول، دیودها و ترانزیستورهای مولکولی هستند [۱۹].

الکترونیک و امروزه اسپینترونیک مولکولی یک خط سیر خوش آتیه است و زمینه رشد فناوری نانو محسوب می‌شود. در اسپینترونیک مولکولی از مولکول‌های آلی به خاطر ساختار قابل کنترلشان، قوی بودن جفت شدگی الکترون-فونون [۲۰] و طول همدوسی اسپینی بزرگی که نسبت به فلزات و نیمرساناهای رایج دارند [۲۱-۲۲]، به‌عنوان قطعات الکترونیکی اسپین قطبیده استفاده می‌شود.

در این رابطه مولکول تیوفن<sup>۱</sup> به‌عنوان یک نیمرسانای آلی مناسب در قطعات الکترونیکی مولکولی بسیار مورد توجه است. استفاده از مولکول تیوفن به‌عنوان یک سیم مولکولی در مدارهای الکترونیکی مزیت‌های زیادی به همراه دارد.

با توجه به اهمیت قطعات اسپینترونیکی و خواص جالب توجه مولکول‌های تیوفن در این پژوهش ما به بررسی خواص ترابرد اسپینی این مولکول می‌پردازیم. برای این منظور این مولکول‌ها را بین الکترودهای غیرمغناطیسی طلا و مغناطیسی آهن قرار داده و خواص ترابرد را برای تعدادی از اعضای این خانواده با استفاد از کد ترابرد سیستا<sup>۲</sup> بررسی می‌نماییم. از نتایج این پژوهش می‌توان در جداکننده‌های اسپینی و قطعات TMR<sup>۳</sup> مولکولی استفاده نمود.

---

<sup>1</sup> Thiophene

<sup>2</sup> Siesta

<sup>3</sup> Tunneling Magneto Resistance



# فصل اول

مقدمه ای بر فناوری نانو

و

الکترونیک مولکولی

فناوری نانو<sup>۱</sup> یک دانش وابسته به ابزار است و ابزارهایی که به مرور با کیفیت بالا کاربردی تر می‌شوند. فناوری نانو و شاخه‌های کاربردی آن مانند نانوالکترونیک در واقع تولید کارآمد دستگاه‌ها و سامانه‌ها با کنترل ماده در مقیاس طولی نانو است و بهره‌برداری از خواص و پدیده‌های نوظهوری است که در این مقیاس توسعه یافته است. پیشرفت صنعت الکترونیک در چندین دهه گذشته بر اساس طراحی و ساخت دستگاه‌هایی در اندازه‌های کوچک و کوچکتر و همچنین مواد الکترونیکی فشرده‌تر صورت گرفته است که دستیابی به رایانه‌های قوی‌تر را تضمین می‌کند.

بسیاری از مدارهای الکترونیکی کنونی توسط ترانزیستورهای CMOS<sup>۲</sup> (فلز-اکسید-نیم‌رسانا) ساخته شده‌اند. کوچک شدن ابعاد قطعات تا حد نانومتر با قوانین فیزیک در ارتباط است. در دستگاه‌های الکترونیکی سیلیکونی مرسوم، انتقال اطلاعات توسط الکترون‌های متحرک در گستره‌ای از انرژی‌های مجاز بر اساس ساختار نواری نیم‌رسانا انجام می‌شود. اما وقتی ابعاد تا مقیاس نانو کم شود و باند انرژی به صورت ترازهای انرژی مجزا در آید، اثرات کوانتومی منجر به جایگزیدگی الکترون می‌شود. بنابراین به منظور ادامه فشرده سازی مدارها نیاز به فناوری پیشرفته بر پایه بهره‌برداری از اثرات کوانتوم مکانیکی حاکم در مقیاس نانو است. در همین راستا الکترونیک مولکولی که پیدایش ایده اولیه آن به چندین دهه قبل بر می‌گردد، در سال‌های اخیر پیشرفت زیادی داشته و شکوفا شده است. برای پیشبرد فناوری نانوالکترونیک و به نتیجه رساندن آن چند مرحله پیشنهاد می‌شود که با پیاده سازی این مرحله‌ها می‌توان نانو الکترونیک را جایگزین فناوری الکترونیک سیلیکونی کرد و نسل جدیدی از محصولات الکترونیک را وارد بازار ساخت. البته باید به این موضوع نیز توجه کرد که مولکولی که در نظر گرفته می‌شود باید کاربردهای ساده، ارزان و غیر پیچیده داشته باشد تا اطمینان نسبی به الکترونیک مولکولی ایجاد شود. با ظهور فناوری نانو، الکترونیک نیز رشد کرده و دانشمندان

<sup>1</sup> Nanotechnology

<sup>2</sup> Complementary Metal-Oxide-Semiconductor

برای رسیدن به اهدافشان در تولید ادوات نانو الکترونیک، تحقیق وسیعی را انجام داده‌اند. انتظار می‌رود که نانو الکترونیک بتواند دنیای محاسبه و فناوری اطلاعات را متحول سازد. مزیت فناوری نانو در علم الکترونیک، توانایی ساخت قطعات در مقیاس نانو (به وسیله نانو لوله‌های کربنی یا دیگر طرح‌های مولکولی) است به طوری که، بزرگ‌ترین رویا در پیوند نانو الکترونیک، الحاق مستقیم ادوات الکترونیکی به مولکول‌ها است. آخرین بازبینی در الکترونیک، الکترونیک مغناطیسی است که الکترونیک اسپینی یا اسپینترونیک نیز نامیده می‌شود.

## ۲-۱ تعریف فناوری نانو

به دلیل جدید بودن حوزه علوم و فناوری نانو (نانو به معنی یک میلیاردیم)، تعریف دقیق و روشنی که همه بر آن اتفاق نظر داشته باشند، وجود ندارد. با این وجود، نیاز به تعیین حدود و مبنای هر علمی ما را به تعریف آن وا می‌دارد. با کمک تعیین حدود و مبنای شاید بتوان علوم نانو را اینگونه توصیف کرد که "توسعه تحقیقات و فناوری در سطوح اتمی، مولکولی و ماکرومولکولی با طول تقریبی ۱ تا ۱۰۰ نانومتر، برای فراهم آوردن شناخت درست از پدیده‌ها و مواد در مقیاس نانو و برای ساخت و استفاده از ساختارها، قطعات و سیستم‌هایی که به خاطر اندازه کوچک و یا متوسط خود دارای خواص و عملکردهای جدیدی هستند، همگی چشم انداز جدیدی را در دنیای علم معرفی می‌کند که پژوهشگران آن را فناوری نانو نامیده‌اند" [۲۳]. فناوری نانو که به طور عمده از مباحث فیزیک، شیمی، علوم زیستی و مهندسی بهره می‌گیرد، عرصه جدیدی در علم است که تعاریف گوناگونی از آن وجود دارد، اما سه مشخصه زیر در تعریف آن‌ها اهمیت ویژه‌ای دارند:

۱- محدوده ساختارهای نانو از یک تا صد نانومتر است.

۲- ساختارهای نانو به شکل حساب شده‌ای طراحی شده‌اند.

۳- ساختارهای نانو می‌توانند ترکیب شده و ساختارهای بزرگتری را بوجود آورند.

در محدوده مطالعاتی نیز می‌توان فناوری نانو را به سه دسته تقسیم کرد. اگرچه روش‌های تحقیقاتی در آن‌ها با یکدیگر متفاوت است، اما بطور کامل با یکدیگر مرتبط هستند و پیشرفت در یکی از شاخه‌ها می‌تواند در شاخه‌های دیگر نیز کاملاً تاثیر گذار باشد. این سه شاخه عبارتند از:

۱- فناوری نانوی مرطوب: در این شاخه سیستم‌های زنده موجود در محیط‌های آبی مورد مطالعه و تحقیق قرار می‌گیرند. در این شاخه ساختمان مواد ژنتیکی، غشاءها و سایر ترکیبات سلولی در مقیاس نانومتر از موضوعات مورد علاقه پژوهشگران هستند. پژوهشگران موفق شده‌اند ساختارهای زیستی فراوانی تولید کنند که نحوه عملکرد آن‌ها در مقیاس نانویی کنترل می‌شود. این شاخه در برگیرنده علوم پزشکی، دارویی و به طور کلی علوم و روش‌های مرتبط با زیست فناوری است.

۲- فناوری نانوی خشک: در این شاخه، علوم پایه (شیمی و فیزیک) نقش مهمی ایفا می‌کنند. مطالعه چگونگی تشکیل ساختارهای کربنی، سیلیکونی و مواد غیر آلی و فلزی از اهداف این شاخه است. نکته قابل توجه این است که الکترون‌های آزاد که در فناوری مرطوب موجب انتقال مواد و ایجاد واکنش‌ها می‌شدند، در فناوری خشک خصوصیات فیزیکی ماده را پدید می‌آورند. در فناوری نانوی خشک چگونگی کاربرد نانو مواد در علوم دیگر مورد توجه است.

۳- فناوری نانوی محاسباتی: در این شاخه از رایانه‌ها برای شبیه‌سازی فرآیند و واکنش‌های اتم‌ها و مولکول‌ها استفاده می‌شود. شناختی که به وسیله محاسبه به دست می‌آید، باعث می‌شود که زمان پیشرفت فناوری نانوی خشک کاهش یابد و تاثیر مهمی در فناوری نانوی مرطوب نیز خواهد داشت.

### ۱-۳ نانو مواد<sup>۱</sup>

به هر ماده‌ای که حداقل یکی از ابعاد آن در مقیاس نانو باشد، نانو ماده گفته می‌شود. دو ویژگی مهم که نانو مواد را از دیگر گروه‌ها متمایز می‌سازد، عبارتند از: نسبت سطح به حجم و تاثیرات کوانتومی.

---

<sup>1</sup> Nanomaterial

این عوامل می‌توانند باعث ایجاد تغییرات یا به وجود آمدن خواص ویژه‌ای مانند تاثیر در واکنش‌ها، مقاومت مکانیکی و مشخصه‌های ویژه الکتریکی در نانو مواد شوند. همان‌طور که اندازه مواد کاسته می‌شود، تعداد بیشتری از اتم‌ها در سطح قرار می‌گیرند، در نتیجه نانو مواد در مقایسه با ذرات بزرگتر، دارای سطح بزرگتری در واحد جرم هستند. با توجه به ازدیاد سطح در این مواد، تماس ماده با سایر عناصر بیشتر و موجب افزایش واکنش با آن‌ها می‌شود. این عمل منجر به تغییرات عمده در شرایط مکانیکی و الکتریکی این مواد خواهد شد. برای مثال سطوح بین ذرات بلورها در بیشتر فلزات باعث تحمل فشارهای مکانیکی بر آن می‌شود. اگر این فلزات در مقیاس نانو ساخته شوند، با توجه به زیاد شدن سطح بین بلورها، مقاومت مکانیکی آن به شدت افزایش می‌یابد. برای شناخت و مطالعه نانو مواد دسته بندی آن‌ها بر اساس مشخصات فیزیکی یا ریخت‌شناسی بسیار اثر بخش خواهد بود. نانو مواد را می‌توان از نظر ساختار هندسی به سه دسته اصلی تقسیم کرد:

۱- اولین دسته گروه نانو لایه‌ها<sup>۱</sup> در یک بعد، در اندازه‌های نانو هستند و در دو بعد دیگر توسعه می‌یابند مانند فیلم‌های نازک و پوشش‌ها (برخی از قطعات رایانه جزو این گروه هستند).

۲- گروه بعدی شامل موادی است که دارای دو بعد در اندازه نانو هستند و تنها در یک بعد دیگر گسترش می‌یابند و شامل نانو لوله‌ها<sup>۲</sup> و نانو سیم‌ها<sup>۳</sup> می‌شوند.

۳- گروه مواد سه بعدی در نانو شامل نانو ذرات<sup>۴</sup>، نقطه‌های کوانتومی (ذرات کوچک مواد نیمه‌هادی) و نظایر آن‌ها می‌شوند که در هر سه بعد در اندازه‌های نانو باقی می‌مانند.

#### ۴-۱ الکترونیک مولکولی

الکترونیک مولکولی که مولترونیک نیز نامیده می‌شود، شاخه‌ای از نانو الکترونیک است که در آن

---

<sup>1</sup> Nanolayer

<sup>2</sup> Nanotube

<sup>3</sup> Nanowire

<sup>4</sup> Nanoparticles

به مطالعه و بررسی کاربرد استفاده از گروه‌های کوچک مولکول در ابعاد نانو و حتی مولکول منفرد، در مدار الکترونیکی پرداخته می‌شود که ساخت مدارهای الکترونیکی با استفاده از تک مولکول، افق ایده‌آل نانو الکترونیک می‌باشد. مفهوم الکترونیک مولکولی بر اساس این واقعیت می‌باشد که کنترل خواص ماده را می‌توان از طریق ترازهای مولکولی انجام داد [۲۴]. الکترونیک مولکولی ابزار قدرتمندی برای عبور از حدود پیش‌بینی شده قانون مور برای مدارهای مجتمع سیلیکونی را فراهم می‌سازد. فعالیت‌های پژوهشی در این علم اساساً در دو بخش انجام می‌شود. در یک بخش از ویژگی‌های مجموعه‌های مولکولی برای کاهش اندازه قطعات الکترونیک استفاده می‌شود در حالی که بخش دیگر تمرکز بر کاربرد تک مولکول‌ها می‌باشد [۲۶-۲۵]. به دنبال فرآیند کوچک سازی اجزاء و مدارات الکترونیکی، علاوه بر سرعت پردازش، توان مصرفی نیز کاهش می‌یابد در نتیجه پژوهشگران کوشش کرده‌اند کوچک‌ترین واحد دارای ساختار قابل تصور را برای کاربردهای الکترونیکی بیابند. به منظور دسترسی به ابعاد کوچکتر، باید فناوری جدید برای ساخت مواد توسعه یابد یعنی باید از مولکول‌هایی به اندازه ۰/۱ تا چندین نانومتر استفاده شود (مولکول‌های آلی، نانو لوله‌ها و مولکول‌های DNA [۲۸]). استفاده از الکترونیک مولکولی به دلیل کوچک کردن ابزارهای الکترونیکی، کاهش هزینه و بهروری اقتصادی، آسانی در خود سامانی<sup>۱</sup>، کاهش توان مصرفی، افزایش سرعت پردازش، دریچه جدیدی را به سمت استفاده از مولکول‌های واحد، چند مولکول‌ها و پلیمرهایی می‌گشاید که به دلیل داشتن سیستم‌های همیوگ بستر مناسبی را برای پژوهش و بررسی خواص الکترونیکی این ساختارها فراهم کرده است. مطالعه جریان و انرژی عبوری از مولکول‌ها اولین بار در سال ۱۹۴۰ میلادی توسط رابرت مولیکن<sup>۲</sup> و همکارانش در توصیف سیستم‌های دهنده-پذیرنده<sup>۳</sup> معرفی و توسعه یافت [۲۸]. به‌طور مشابه در سال ۱۹۷۴ میلادی در یک مقاله، آویرام<sup>۴</sup> و رایتنر<sup>۵</sup> در یک کار پژوهشی یکسوساز مولکولی بر پایه ترکیبات مولکولی ساخته شده از پلیمرهای همیوگ آلی و ساندریچ شده بین دو الکتروود فلزی را

<sup>1</sup> Self-assemble

<sup>2</sup> Robert Mulliken

<sup>3</sup> Donor-Acceptor

<sup>4</sup> Aviram

<sup>5</sup> Ratner

عملی کردند [۲۹]. با توجه به تمایل و علاقه بنیادین و بهره اقتصادی که در استفاده از الکترونیک مولکولی وجود داشت، ۱۶ سال بعد از اولین پژوهش، آشول<sup>۱</sup> و همکارانش یکسوساز مولکولی ساخته شده از فیلم نازک مولکولی را عملی کردند، تا اینکه در سال ۱۹۹۷ میلادی اولین محاسبات بر روی رسانایی مولکول واحد منتشر شد. با توجه به اینکه در سیستم‌های مولکولی فرآیندهای الکترونیکی در ابعاد نانومتری عمل می‌کنند لذا قوانین مکانیک کوانتومی در آنها حکم‌فرما می‌باشد. بعنوان مثال می‌توان از فرآیندهایی نظیر تونل‌زنی کوانتومی، مقاومت منفی و پرش به کمک فونون‌ها نام برد. فرآیندهای الکترونیکی "مولکولی" در مجموع می‌توانند در مقیاس ماکرو ظاهر شوند. مطالعه و ساخت قطعات الکترونیکی آلی فعال در مقیاس ماکرو از چند دهه قبل آغاز شده و نسبتاً به حد تکامل رسیده است و از ۱۹۷۰ میلادی به بعد مجموعه‌ای از مواد جدید و قطعات الکترونیک توسعه یافتند. این یافته‌ها زمینه را برای رسیدن به الکترونیک پلیمری و الکترونیک نوری و کاربردهای تجاری آن هموار کرد. در ادامه لازم به ذکر است که چون رایانه اطلاعات را تنها به صورت ۰ و ۱ ذخیره می‌کند، پس تمام آنچه که نیاز است، کلید کردن جریان به شکل ۰ (خاموش) و ۱ (روشن) می‌باشد که البته این همان کاری است که ترانزیستور انجام می‌دهد. لذا با پیروی از این روش کلی، می‌توان انتظار داشت که در مقیاس کوچک نیز همین کار حتی با یک مولکول انجام شود. در نتیجه مولکول‌هایی که در الکترونیک مولکولی مورد استفاده قرار می‌گیرند بایستی شرایطی داشته باشند. نخست آن که، این مولکول‌ها باید دارای دو شکل متفاوت باشند که توسط یک محرک خارجی نظیر نور یا ولتاژ تغییر شکل دهد. دیگر آن که، این تغییر شکل باید برگشت‌پذیر هم باشد. در واقع مولکول در یک حالت به‌عنوان صفر و در یک حالت به‌عنوان یک رفتار می‌کند. از طرفی، رفتار برگشت‌پذیری مولکول هم باید سریع باشد. به گونه‌ای که بتواند در مدارات الکترونیکی مجتمع، مفید واقع شود. همچنین پایداری و مخصوصاً پایداری گرمایی نیز عامل مهمی است. یعنی این مولکول‌ها در برابر تغییرات دمایی نباید از شکلی به شکل دیگر تغییر کنند. زیرا در مدارات مجتمع محدوده تغییرات دمایی بسیار

---

<sup>1</sup> Ashwell

زیاد است و در صورت تغییر شکل مولکول‌ها، اطلاعات آن‌ها از دست می‌رود [۳۰]. آن‌چه امروزه در اختیار است یک کلید مولکولی بسیار کوچک در ابعاد چند نانومتر است که جریان الکتریکی عبوری از آن با استفاده از یک ولتاژ قابل کنترل است که مزیت اصلی آن نسبت به ترانزیستورهای سیلیکونی، ابعاد کوچک‌تر آن است. لیکن توسعه رایانه‌ها و استفاده از الکترونیک مولکولی در صنایع الکترونیک و رایانه، مستلزم اتصال این مولکول‌ها به یکدیگر و ساخت گیت‌های منطقی است [۳۱]. همچنین روش‌های ساخت و تولید آن‌ها در مقیاس انبوه نیز، چالشی است که باید قبل از توسعه الکترونیک مولکولی حل شود. از جمله مولکول‌هایی که برای جایگزینی به جای سیلیکون در مدارهای الکترونیکی بسیار مورد توجه است، مولکول‌های آلی است که مواد آلی زیادی شامل پلیمرها و مولکول‌های کوچک برای این منظور مورد بررسی قرار گرفته‌اند، تیوفن‌ها نیز یک گروه از این ترکیبات آلی هستند.

## ۵-۱ مزایای الکترونیک مولکولی

استفاده از الکترونیک مولکولی، به‌عنوان فناوری نوین و جایگزین در صنعت الکترونیک به دلایل و کارکردهایی که دارد، صورت می‌گیرد. از جمله این دلایل می‌توان به این موارد اشاره کرد.

۱- اندازه مدارهای الکترونیکی: کوچک‌سازی ابعاد مدارهای الکترونیکی را تا حد ابعاد مولکول ممکن می‌سازد. این بدان معنی است که چون اندازه مولکول‌ها بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر است، لذا ساخت مدارهای الکترونیکی در ابعاد نانو به همراه مزیت بازدهی بالا، توان اتلاف کم و در نتیجه هزینه پایین را امکان‌پذیر می‌کند.

۲- شکل و ساختار فضایی یا شیمی مولکول: برخی از مولکول‌ها چندین ساختار هندسی پایدار و استوار مجزا دارند یعنی دارای چند ایزومر مختلف هستند که این ایزومرها خواص الکتریکی و اپتیکی متفاوتی دارند. از این خاصیت آن‌ها می‌توان در کلیدزنی<sup>۱</sup> استفاده نمود و از طریق انتخاب مولکول‌های

---

<sup>۱</sup> Switch



مختلف و چینش هندسی متفاوت آن‌ها در کنار یکدیگر، می‌توان خواص تراپردی، اپتیکی، پیوندی<sup>۱</sup> و ساختاری را به‌طور دلخواه تغییر داد.

۳- توانایی و قابلیت ترکیب شدن: با ترکیب مولکول‌ها می‌توان انتقال بار، ویژگی‌های ساختاری و اپتیکی مولکول‌ها را به‌طور وسیعی تغییر داد و می‌توان از این قابلیت برای اصلاح رفتار الکتریکی مولکول‌ها استفاده کرد. مولکول‌ها نیز نظیر سایر ساختارهای فیزیکی همیشه به دنبال رسیدن به پایین‌ترین سطح انرژی هستند و اگر پیوند یافتن با مولکول دیگر این شرط را برآورده سازد مولکول با آن پیوند برقرار می‌کند. به همین دلیل خودآرایی مولکول‌ها از آن است که تحت شرایط آزمایشگاهی مناسب خود را به صورت یک آرایه ابر مولکولی در می‌آورد. خودآرایی می‌تواند هم در حالت محلول و هم در حالت جامد توسط پیوندهای هیدروژنی، واندروالس و یا برهم کنش دوقطبی انجام شود. اگرچه برخی مولکول‌های آلی معایبی مثل ناپایداری در درجه حرارت‌های بالا دارند اما به‌طور کلی، این مزیت، مولکول‌ها را برای کاربردهای الکترونیکی مطلوب می‌سازد [۳۲].

## ۱-۶ مثال‌ها

متداولترین شکل استفاده از مولکول‌ها در الکترونیک مولکولی ساختارهایی شامل پیوندهای یگانه و دوگانه در سیستم‌های همیوگ<sup>۲</sup> است. دلیل اینکه از این ساختارها در الکترونیک مولکولی استفاده می‌شود این است که، این ساختارها اوربیتال‌های مولکولی دارند که به‌صورت ابر الکترونی بر روی کل مولکول مستقر است و بنابراین این قابلیت را دارد که الکترون‌ها به آسانی بر روی کل نواحی پیوندی حرکت کنند [۳۳]. از مثال‌هایی برای این موارد می‌توان، سیم‌های مولکولی<sup>۳</sup>، ترانزیستورها و یکسوسازی‌های مولکولی<sup>۴</sup> را نام برد. سیم مولکولی در مقیاس مولکولی به‌عنوان مهم‌ترین ابزار

<sup>1</sup> Binding

<sup>2</sup> Conjugate system

<sup>3</sup> Wire

<sup>4</sup> Rectifiers

الکترونیکی در انتقال بار الکتریکی است. سیم مولکولی شامل دو الکتروود که بین آنها یک مولکول به عنوان پل قرار گرفته است، معرفی می شود. سیم های مولکولی به دو صورت زنجیره های اشباع شامل مولکول های اشباع مثل آلکان ها که گاف انرژی (اختلاف بین بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده<sup>۱</sup> و پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده<sup>۲</sup>) در آنها زیاد است (در حدود ۶-۴ eV) و زنجیره های که پل مولکولی شامل مولکول های غیر اشباع که گاف انرژی کوچکتری دارند، نامیده می شوند. دیود مولکولی در حوزه الکترونیک مولکولی به عنوان نیم رسانای آلی، ماده آلی که خواص نیم رسانا را از خود نشان می دهد تعریف می شود. نیم رسانایی به اشکال متفاوت مولکول ها تنها<sup>۳</sup>، زنجیره کوتاه<sup>۴</sup> و پلیمرهای آلی<sup>۵</sup> متجلی می شود. مولکول های کوچک نیم رسانا مثل هیدروکربن های آروماتیک<sup>۶</sup> شامل ترکیبات پلی سایکلیک<sup>۷</sup> مثل پنتاسن<sup>۸</sup> و آنتراسن<sup>۹</sup> است. همچنین می توان از نیم رساناهای پلیمریک<sup>۱۰</sup> پلیمریک<sup>۱۰</sup> نظیر پلی سه-هگزاتیوفن<sup>۱۱</sup> و پلی پی-فینیلین وینیلین<sup>۱۲</sup> را نام برد. دو گروه اصلی از نیم رسانای آلی به نام های ترکیبات انتقال بار آلی<sup>۱۳</sup> و ترکیبات مختلف پلیمرهای رسانا<sup>۱۴</sup> که مشتقاتی از پلی استیلین<sup>۱۵</sup>، شامل خود پلی استیلین، پلی پیروول<sup>۱۶</sup>، پلی آنیلین و پلی تیوفن است، وجود دارد.

<sup>1</sup> Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO)

<sup>2</sup> Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO)

<sup>3</sup> Single molecule

<sup>4</sup> Oligomer

<sup>5</sup> Organic Polymers

<sup>6</sup> Aromatic Hydrocarbons

<sup>7</sup> Polycyclic Aromatic

<sup>8</sup> Pentacene

<sup>9</sup> Anthracene

<sup>10</sup> Polymeric Semiconductor

<sup>11</sup> Poly(3-hexylthiophene)

<sup>12</sup> Poly(p-phenylene vinylene)

<sup>13</sup> Organic charge-transfer complexes

<sup>14</sup> Conductive polymers

<sup>15</sup> Polyacetylene

<sup>16</sup> Polypyrrole

# فصل دوم

## ایسٹرونیٹک موکلوی آلی

حامل‌های بار یعنی الکترون‌ها و حفره‌ها دارای دو مشخصه اساسی بنام بار و اسپین هستند که امروزه بطور گسترده‌ای در قطعات الکترونیک بکار می‌روند. بار با میدان الکتریکی اندرکنش دارد و اسپین، به علت داشتن گشتاور مغناطیسی، با میدان مغناطیسی اندرکنش می‌کند. این خاصیت حامل‌های بار اساس تکنولوژی ذخیره اطلاعات بر پایه منطق بولی<sup>۱</sup> را تشکیل می‌دهد. حالت‌های "۰" و "۱" (به ترتیب متناظر با مقاومت بالا و پایین قطعه) به معنی حالت‌های "خاموش" و "روشن" دستگاه است. در استفاده از خاصیت بار حامل‌ها، حالت‌های خاموش و روشن فوق را می‌توان با اعمال میدان الکتریکی خارجی به همدیگر تغییر داد همان‌گونه که ولتاژ گیت در یک ترانزیستور اثر میدانی عبوری جریان بین الکترودها را کنترل می‌کند. همچنین می‌توان از خاصیت اسپینی حامل‌ها در قطعات الکترونیکی استفاده کرد و از میدان مغناطیسی خارجی برای کنترل آن‌ها کمک گرفت، چرا که اسپین در هر جهت خاص فقط دارای دو حالت است که اصطلاحاً به حالت‌های بالا و پایین معروفند و با اعمال میدان مغناطیسی می‌شود جهت‌های بالا و پایین اسپین را تعویض کرد. این شاخه از علم الکترونیک که از اسپین به‌عنوان پایه اصلی انتقال یا ذخیره اطلاعات استفاده می‌کند را «اسپینترونیک» می‌نامند. قطعات اسپینترونیک عمدتاً به‌عنوان حسگرهای مغناطیسی (هد دیسک‌های سخت) و RAM<sup>۲</sup>های مغناطیسی بکار می‌روند. عملکرد این قطعات بر اساس سه خاصیت مهم اسپینی: مقاومت مغناطیسی ناهمسانگرد (AMR)<sup>۳</sup>، مقاومت مغناطیسی تونلی (TMR)<sup>۴</sup> و مقاومت مغناطیسی عظیم (GMR)<sup>۵</sup> می‌باشد.

هدف اسپینترونیک فهم و درک برهم‌کنش اسپین و محیط حالت-جامد اطرافش به منظور ساخت و طراحی قطعات مفید براساس این درک و دانش بدست آمده می‌باشد. از دیدگاهی اساسی‌تر،

---

<sup>1</sup> Boolean logic

<sup>2</sup> Random Access Memory

<sup>3</sup> Anisotropic Magneto-Resistance

<sup>4</sup> Tunneling Magneto-Resistance

<sup>5</sup> Giant Magneto-Resistance

اسپینترونیک شامل بررسی ترابرد اسپینی همچون دینامیک و واهلش اسپینی در مواد حالت جامد می‌باشد که به لحاظ فناورانه پیشرفته و پربازده می‌باشند. از مزایای قطعات اسپینترونیکی نسبت به قطعات الکترونیکی می‌توان به موارد زیر اشاره نمود:

- ۱- سرعت پردازش و عملکرد بالا: به دلیل اینکه ذخیره‌سازی و پردازش اطلاعات در قطعات اسپینترونیکی تواما انجام می‌پذیرد و حافظه و عملیات منطقی روی یک تراشه واحد قرار می‌گیرد.
- ۲- مصرف انرژی فوق‌العاده پایین با بهره‌ی بالا: انرژی لازم برای چرخش اسپین حامل بار و جهت‌گیری آن به مراتب نسبت به تغییر جهت حرکت خود حامل بار به میزان قابل توجهی کمتر می‌باشد [۳۴].
- ۳- ذخیره‌کننده‌های بر مبنای اسپین حامل بار در گروه حافظه‌های غیرفرار<sup>۱</sup> قرار می‌گیرند در حالیکه بر مبنای بار الکتریکی، با قطع ولتاژ اطلاعات از بین می‌رود.
- ۴- طول عمر اسپینی (همچون طول همدوسی و طول واهلش) در نیمرساناها نسبت به فلزات بالا است و اسپین‌ها همدوسی خود را در زمان‌ها و فواصل طولانی حفظ می‌کنند [۳۵-۳۶].

## ۲-۲ اسپینترونیک آلی

اسپینترونیک آلی یک زمینه پژوهشی جدید و امید بخش است که در آن از مواد آلی به‌عنوان واسط یا کنترل یک اسپین-قطبیده استفاده می‌شود. اسپینترونیک آلی ترکیبی از الکترونیک بر پایه مواد آلی [۳۷-۳۸] و ترابرد اسپینی است [۳۹-۴۰]. مواد آلی از یک طرف راهی به سوی الکترونیک ارزان، سبک، از لحاظ مکانیکی انعطاف‌پذیر، از لحاظ شیمیایی فعال و تابع فرآیند از پایین به بالا<sup>۲</sup> را می‌گشاید و از طرف دیگر با کاربرد اسپین الکترون به جای بار الکترون اجازه مطالعه و ساخت دستگاه‌های غیرفرار را می‌دهد. دستگاه‌های اسپینترونیکی نسبت به دستگاه‌های مبتنی بر پایه ترابرد

---

<sup>1</sup> Non-volatile memory

<sup>2</sup> Bottom-up

بار سریع‌تر هستند و توان الکتریکی کمتری مصرف می‌کنند. به همین خاطر انرژی لازم برای تغییر در سطوح انرژی اسپینی از انرژی لازم برای دستکاری سطوح انرژی بارهای الکتریکی، کمتر است. شکل (۱-۲ الف) بطور طرح‌وار نمونه متعارفی از یک دستگاه اسپینترونیکی (دریچه اسپینی<sup>۱</sup>) را نشان می‌دهد که در آن دو فرومغناطیسی (FM) با میدان‌های اعمالی متفاوت (Hc)، یکی به‌عنوان تزریق‌کننده<sup>۲</sup> و دیگری آشکارساز<sup>۳</sup> اسپین به وسیله یک جداکننده غیرمغناطیسی (NM) از هم جدا شده‌اند. نقش جدا کننده، جدا کردن الکترودهای فرومغناطیسی از یکدیگر است که اجازه ترابرد اسپین از یک الکتروود به الکتروود دیگر را می‌دهد. مقاومت الکتریکی در این سامانه به جهت‌گیری نسبی مغناطش دو الکتروود فرومغناطیس وابسته است و این جهت‌گیری، نسبی سازوکار تعیین‌کننده در خواص ترابرد اسپین است. جهت‌گیری نسبی می‌تواند به وسیله یک میدان مغناطیسی خارجی میان دو وضعیت موازی و پادموازی تعیین شود. مقاومت مغناطیسی در حالت پادموازی، معمولاً بیشتر از حالت موازی است که این اثر به‌عنوان مقاومت مغناطیسی بزرگ<sup>۴</sup> (GMR) نامیده می‌شود. بنابراین مقاومت مغناطیسی چنین قطعه‌ای قابل تغییرات و مقاومت کم یا زیاد مشابه منطق صفر و یک تعبیر می‌شود. از اواسط دهه میلادی قرن گذشته دریچه‌های اسپینی به‌طور گسترده‌ای در رایانه‌ها و هِدخوان بکار می‌روند. امروزه با استفاده از دریچه‌های اسپینی بسیار حساس امکان ساخت دیسک‌های سخت با سرعت بالا فراهم شده است که می‌توان اطلاعات را با سرعت دستیابی بالا، روی آن‌ها ذخیره کرد. با توجه به نمودار (ج) شکل (۱-۲) ماده جداکننده معمولاً از یک فلز غیرمغناطیسی، یک لایه نارسانای نازک (در مورد پیوندگاه‌های مغناطیسی تونلی<sup>۵</sup> (MTJ)) تشکیل شده است، اثر مقاومت مغناطیسی در مورد جداکننده نارسانا اشاره به مقاومت مغناطیسی تونلی دارد. اخیراً لئو<sup>۶</sup> و همکارانش از نیمرسانا غیرآلی (GaAs) به‌عنوان جداکننده نارسانا در تزریق و آشکارسازی اسپین استفاده کرده‌اند [۴۱].

---

<sup>1</sup> Spin valve

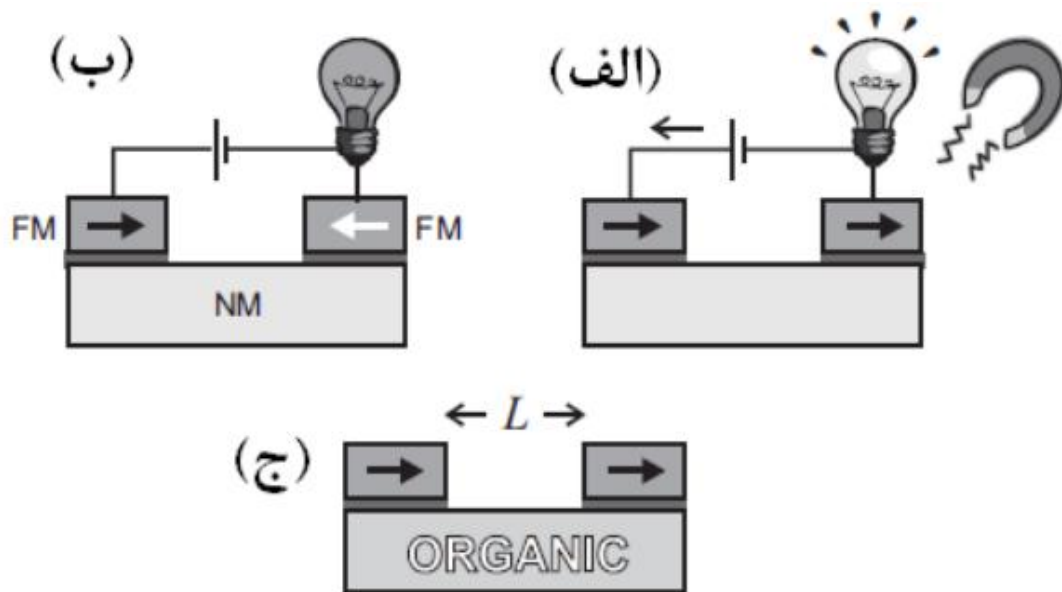
<sup>2</sup> Source

<sup>3</sup> Drain

<sup>4</sup> Giant Magneto-Resistance

<sup>5</sup> Magnetic Tunnel Junction

<sup>6</sup> Lou



شکل ۱-۲: نمایش طرح واره از یک دریچه اسپینی. دو الکتروود فرومغناطیس (FM) (جهت مغناش به وسیله پیکان‌ها مشخص شده) که توسط یک جداکننده غیرمغناطیسی (NM) از یکدیگر مجزا شده‌اند. یک سد تونلی میان الکتروود فرومغناطیس و جداکننده غیرمغناطیسی می‌تواند سیگنال اسپین را افزایش دهد. (الف) لامپ طرح وار رسانایی بالا در مورد مغناطش موازی، (ب) لامپ طرح وار رسانایی پایین در مورد مغناطش پادموازی را نشان می‌دهد. (ج) دریچه اسپینی با جدا کننده غیرمغناطیسی را نشان می‌دهد [۴۲].

با توجه به نمودار (ج) شکل (۱-۲) چون الکتروودهای فرومغناطیس غیر آلی با جدا کننده نارسانای آلی ترکیب شده‌اند، یک وسیله اسپینترونیکی تمام آلی ساخته نمی‌شود. اما اگر الکتروودها هم از فرومغناطیس‌های آلی انتخاب شوند منجر به طراحی یک قطعه اسپینترونیکی تمام آلی می‌شود. هم‌اکنون مواد آلی با ویژگی‌های فرو مغناطیسی وجود اما ساخت دستگاه‌های اسپینترونیکی تمام آلی تا کنون محقق نشده است. زمان واهلش<sup>۱</sup> طولانی اسپین در مواد آلی باعث شده که اسپینترونیک آلی در سال‌های اخیر توجه زیادی به خود جلب کند. با استفاده از اندازه‌گیری‌های تشدید پارامغناطیسی<sup>۲</sup>، زمان‌های واهلش اسپینی در دمای اتاق در باز  $10^{-5}$  -  $10^{-7}$  s بدست آورده شده است ( $10^{-1}$  s در فلزات). زمان واهلش اسپینی یا عمر اسپین به وسیله رابطه زیر بدست می‌آید:

<sup>1</sup> Relaxation times

<sup>2</sup> Paramagnetic resonance

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{1}{\tau_{\downarrow}} + \frac{1}{\tau_{\uparrow}} \quad (1-2)$$

که میانگین زمان تبدیل یک الکترون با اسپین بالا به اسپین پایین است و  $\tau_{\uparrow}$  برای فرآیند معکوس بکار می‌رود. زمان واهلش اسپینی در دستگاه‌های اسپینترونیک یک پارامتر کلیدی است. به طوری که در مورد یک فلز غیرمغناطیسی با یک گاز فرمی تبهگن نیمرسانا [۴۳-۴۴] ارتباط بین طول واهلش اسپین به زمان واهلش به صورت زیر بیان می‌شود:

$$L_s = \sqrt{\frac{\tau_s}{4e^2 N(E_F) \rho_N}} \quad (2-2)$$

که  $\rho_N$  و  $N(E_F)$  به ترتیب چگالی حالت‌ها در تراز فرمی و مقاومت ماده جداکننده غیر مغناطیسی می‌باشند. برای یک نیمرسانا در رژیم غیرتبهگن،  $L_s$  به صورت زیر مشخص می‌شود [۴۳-۴۴]:

$$L_s = \sqrt{\frac{K_B T \tau_s}{2n e^2 \rho_N}} \quad (3-2)$$

که  $K_B$  ثابت بولتزمن،  $T$  دما و  $n$  چگالی حامل‌ها می‌باشد. برای اینکه دریچه اسپینی شکل (۱-۲) عملکرد درستی داشته باشد باید فاصله  $L$  میان دو الکتروود فرومغناطیس کوچکتر از طول واهلش اسپین باشد. هندسه شکل (۱-۲) می‌تواند برای تعیین  $L_s$  با تغییر دادن فاصله میان دو الکتروود ( $L$ ) استفاده شود. چنین روش تمام الکتریکی تعیین  $L_s$  به طور عملی در رساناهای آلی جالب است. به طوری که الکترودهای فرومغناطیسی پادموازی برای ساخت دیودهای گسیل دهنده نوری آلی پیشنهاد شد تا بازدهی گسیل نور را افزایش دهند [۴۵-۴۷]. در مواد آلی بر همکنش اسپین-مدار و همچنین بر همکنش فوق ریز<sup>۱</sup> سازوکار غالب در واهلش اسپین هستند. به طوری که هر دو عامل در مواد آلی ضعیف می‌شوند. با توجه به این ویژگی، مولکول آلی را می‌توان برای ساخت قطعات اسپینترونیکی و تراورد اسپین قطبیده به‌عنوان جانشین خوب معرفی کرد. عبور اسپین قطبیده از میان ساختارهای آلی به صورت نظری مورد بررسی قرار گرفته است [۴۸-۴۹]. همچنین نتایج تجربی نشان

---

<sup>1</sup> Hyperfine



می‌دهد که برخی از مولکول‌های آلی می‌توانند مقاومت مغناطیسی تونلی بالایی ایجاد کنند [۵۰-۵۲]. در این آزمایشات تراپد اسپین قطبیده از میان مولکول‌های با اروربیتال- $\pi$ ، نانو لوله‌ها [۴۹] و پل‌های مولکولی که بین دو لایه مغناطیسی قرار گرفته‌اند، مورد بررسی قرار گرفته است. در کنار زمان واهلش، لازم است که رسانندگی نیمرساناهای آلی به اندازه کافی بزرگ باشد، از آنجایی که زمان واهلش اسپین طولانی، یکی از مزیت‌های واضح مواد آلی محسوب می‌شود اما رسانندگی نسبتاً کم اکثر نیمرساناهای آلی یک نکته جدی قابل توجه است. به هر حال پیشرفت‌های مهمی در ساخت دستگاه‌های بر پایه مقاومت مغناطیسی تونلی آلی در سال‌های اخیر صورت گرفته است.

## ۲-۳ اثرات اسپینترونیکی

### ۲-۳-۱ اثر مقاومت مغناطیسی بزرگ<sup>۱</sup> (GMR)

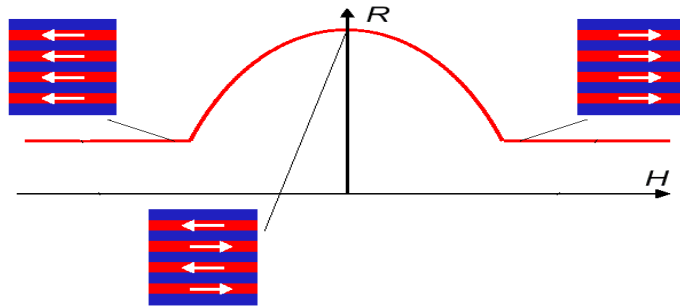
پدیده مقاومت مغناطیسی بزرگ در سال ۱۹۸۸ میلادی توسط دو دانشمند اروپایی آلبرت فرت<sup>۲</sup> و همکارانش [۵۳] در دانشگاه پاری سود در فرانسه و پیتر گرونبرگ<sup>۳</sup> و همکارانش [۵۴]، در مرکز تحقیقاتی در جولیش آلمان، به طور مستقل بر روی چند لایه‌ای Fe/Cr کشف شد و بعداً در لایه‌های چندتایی Co/Cu توسط سیدلادا<sup>۴</sup> و همکارانش گزارش شده بود [۵۵]. یک قطعه GMR از دو لایه فلزی فرومغناطیسی تشکیل شده است که توسط یک لایه فلزی غیرمغناطیسی از هم جدا شده‌اند. با اعمال میدان مغناطیسی خارجی و تغییر جهت نسبی مغناطش دو لایه‌ی فرومغناطیسی مجاور، مقاومت سیستم تغییر می‌کند. همان‌گونه که در شکل (۲-۲) نشان داده شده است، هرگاه لایه‌های فرومغناطیسی با هم موازی باشند کم‌ترین مقاومت، و هرگاه پادموازی باشند، بیشترین مقاومت مشاهده می‌شود.

<sup>1</sup> Giant Magneto-Resistance

<sup>2</sup> Albert Fert

<sup>3</sup> Peter Grünberg

<sup>4</sup> Cebdillada



شکل ۲-۲: تغییرات مقاومت بر حسب میدان مغناطیسی خارجی [۵۵].

از آن جا که تغییرات نسبی مقاومت از حدود ۵٪ تا چند صد درصد دردمای اتاق مشاهده می شود و این مقادیر نسبت به ۱-۳٪ تغییرات نسبی مقاومت مغناطیسی ناهمسانگرد<sup>۱</sup> بسیار بزرگتر است، به این پدیده مقاومت مغناطیسی عظیم می گوئیم که از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$GMR = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} \times 100 \quad (۴-۲)$$

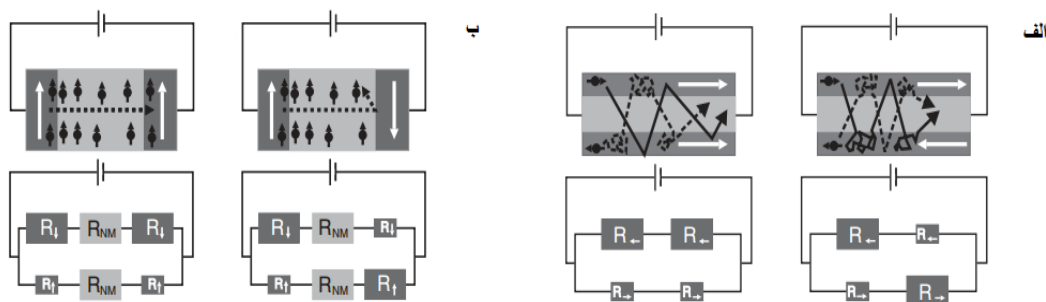
$R_P$  ( $R_{AP}$ ) مقاومت سیستم در حالتی است که دو لایه فرومغناطیسی موازی (پاد موازی) هستند. دو هندسه متفاوت برای یک قطعه GMR، شامل هندسه جریان در صفحه (CIP)<sup>۲</sup> و عمود بر صفحه (CPP)<sup>۳</sup> می باشد که به ترتیب در شکل های (۲-الف) و (۲-ب) نشان داده شده اند. اولین قطعه GMR با هندسه CIP ساخته شد. در این هندسه راستای جریان با جهت مغناطش الکترونها موازی می باشد. حال اگر جریان ورودی به قطعه که از لحاظ جهت گیری اسپینی حامل هایش موازی می باشد، نسبت به جریان ورودی به قطعه که از لحاظ جهت گیری اسپینی حامل هایش غیرقطبیده و در راستاهای متفاوت می باشند، جهت اسپینی موازی با جهت مغناطش الکترونها داشته باشند، مقاومت و پراکندگی کمتر، و اگر جهتی مخالف جهت مغناطش الکترونها داشته باشند، مقاومت و پراکندگی بیشتری را بر سر راه خود حس می کنند. در نتیجه در حالتی که جهت مغناطش الکترونها با هم موازی می باشند (پراکندگی بیشتر برای حامل هایی که راستای

<sup>1</sup> Anisotropic Magneto-Resistance

<sup>2</sup> Current in plan

<sup>3</sup> Current perpendicular to plan

اسپینی متفاوت با مغناطش الکترونها دارند اتفاق می افتد) نسبت به حالتی که پادموازی می باشند (پراکندگی برای حامل های با اسپین بالا و پایین به یک میزان و به طور یکسان اتفاق می افتد) شاهد مقاومت و پراکندگی کمتری می باشیم. یک قطعه GMR می تواند به عنوان یک آشکارساز موثر برای تشخیص جهت گیری میدان مغناطیسی مورد استفاده قرار گیرد و یا در هداخوان ها در ذخیره سازهای مغناطیسی مورد استفاده واقع شود. یک دهه پس از کشف GMR، قطعات تجاری شده بر پایه این پدیده از قبیل نوک خوان هارد دیسک ها، حسگرهای مغناطیسی، تراشه های<sup>۱</sup> حافظه مغناطیسی وارد بازار مصرف شد.



شکل ۲-۳: دو هندسه متفاوت برای قطعات GMR (الف) جریان در صفحه (CIP) (ب) جریان عمود بر صفحه (CPP)

### ۲-۳-۲ اثر مقاومت مغناطیسی تونلی (TMR)

پدیده TMR در سال ۱۹۷۵ توسط ژولیه<sup>۳</sup> کشف شد [۵۶]. اما به دلیل نبود تکنولوژی ساخت مناسب و مقادیر بسیار کم TMR، در حدود چند درصد در دماهای پایین، تا حدود ۲۰ سال بعد مطالعه جدی ای در این زمینه صورت نگرفت تا این که در سال ۱۹۹۵ میلادی، میازاکی<sup>۴</sup> و تزوکا<sup>۵</sup> [۵۷] و همچنین مودرا و همکارانش<sup>۶</sup> [۵۸]، مستقل از هم، هر کدام مقادیر بیش از ۱۰٪ را در دمای

<sup>1</sup> Chips

<sup>2</sup> Tunneling Magneto-Resistance

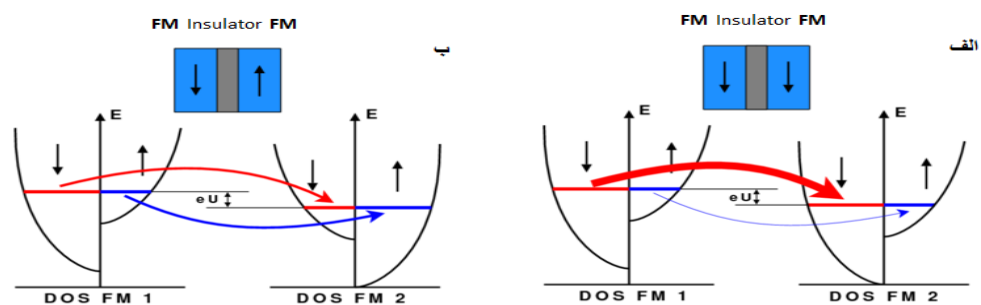
<sup>3</sup> Julliere

<sup>4</sup> Miyazaki

<sup>5</sup> Tezuka

<sup>6</sup> Moodera et al

اتاق برای TMR به دست آوردند. سیستمی که این اثر در آن مشاهده می‌شود، پیوندگاه تونل زنی مغناطیسی<sup>۱</sup> (MTJ) نام دارد که شامل دو لایه فرومغناطیسی (به‌عنوان الکتروود) می‌باشند، توسط یک لایه عایق یا نیمرسانای بسیار نازک، در حدود چند نانومتر یا کمتر، از هم جدا شده‌اند. شکل (۲-۴) طرحی از یک نمونه از این پیوندگاه‌ها را نشان می‌دهد. یک قطعه TMR مقاومت مغناطیسی بزرگی، بیشتر از ۵۰ درصد را در دمای اتاق نشان می‌دهد که می‌تواند برای تشکیل حافظه‌های مغناطیسی تصادفی<sup>۲</sup> (MRAM) مورد استفاده قرار گیرد. در واقع می‌توان با استفاده از یک میدان مغناطیسی تغییر بسیار بزرگی در فرآیند تونل‌زنی در مغناطش ماده، ایجاد کرد. چنین اتصالاتی دارای حساسیت بالاتر و توان مصرفی پایین‌تری نسبت به عناصر مقاومتی GMR هستند، که این خود یک مزیت است اما این مقاومت ظاهری بالا مستعد نویز زیادی نیز می‌باشد [۵۹]. پدیده TMR از تفاوت چگالی حالت‌های (DOS) الکترون‌های اسپین بالا  $n_{\uparrow}(E_F)$  و اسپین پایین  $n_{\downarrow}(E_F)$  در انرژی فرمی ناشی می‌شود. با در نظر گرفتن بقای انرژی اسپین در طول تونل زنی، الکترون‌ها می‌توانند از یک زیر نوار اسپینی در اولین الکتروود فرومغناطیس (FM) به همان زیر نوار اسپینی در الکتروود FM دوم، تونل زنی کنند. همانطور که در شکل (۲-۴) نمایش داده شده است.



شکل ۲-۴: یک قطعه TMR تشکیل شده از دو الکتروود فرومغناطیس (رنگ آبی) که توسط یک سد تونلی نارسانا (خاکستری) از هم جدا شده‌اند. پیکان‌ها جهت مغناطش الکتروودها را نشان می‌دهند. نمایش زیر نوارهای اسپینی الکتروودهای فرومغناطیسی. الف) آرایش موازی ب) آرایش پاد موازی [۵۹].

<sup>1</sup> Magnetic Tunnel Junction

<sup>2</sup> Magnetic Random Access Memory

<sup>3</sup> Density of states

آهنگ تونل زنی الکترون‌ها از یک اتصال FM به اتصال دیگر با حاصل ضرب چگالی حالت‌های زیر نوار اسپینی مربوط در دو الکتروود فرومغناطیس در انرژی فرمی  $E_F$ ، یا به عبارت دیگر با جهت‌گیری مغناطش الکتروودهای فرومغناطیس نسبت به هم متناسب است. در نتیجه مقاومت در حالت مغناطش موازی شکل (۲-۴ الف) کمتر از حالت پادموازی شکل (۲-۴ ب) می‌باشد. بر پایه‌ی کارهای تدرو<sup>۱</sup> و میزروی<sup>۲</sup> در سال ۱۹۷۳ [۶۰]، که فرض کردند انرژی و اسپین پایسته هستند، ژولیه رابطه اختلاف مقاومت بین آرایش موازی (P) و پادموازی (AP) که همان نسبت TMR می‌شود را، به صورت زیر بدست آورد:

$$TMR = \frac{R_{AP}-R_P}{R_P} = \frac{G_P-G_{AP}}{G_{AP}} = \frac{2P_1P_2}{1-P_1P_2} \quad (۲-۵)$$

که  $R_P(R_{AP})$  مقاومت در دو آرایش موازی (پادموازی)،  $G_P(G_{AP})$  رسانش و هدایت در دو آرایش موازی (پادموازی) و  $P_1(P_2)$  قطبش اولین (دومین) الکتروود فرومغناطیس (FM) که به صورت زیر تعریف می‌شود، می‌باشد.

$$P_i = \frac{n_{i\uparrow}(E_F)-n_{i\downarrow}(E_F)}{n_{i\uparrow}(E_F)+n_{i\downarrow}(E_F)} \quad i = 1,2 \quad (۲-۶)$$

## ۲-۴ کاربردهای اسپینترونیک

### ۲-۴-۱ شیر اسپینی<sup>۳</sup>

یک نمونه از قطعات اسپینترونیکی، شیر اسپینی هستند. یک شیر اسپینی از دو الکتروود فلزی فرومغناطیس تشکیل شده است که توسط یک جدا کننده غیرمغناطیسی (فلز یا عایق) از هم مجزا شده‌اند، همانطور که در شکل (۲-۵) نشان داده شده است. عموماً مغناطش یکی از دو لایه‌ی

<sup>1</sup> Tedrow

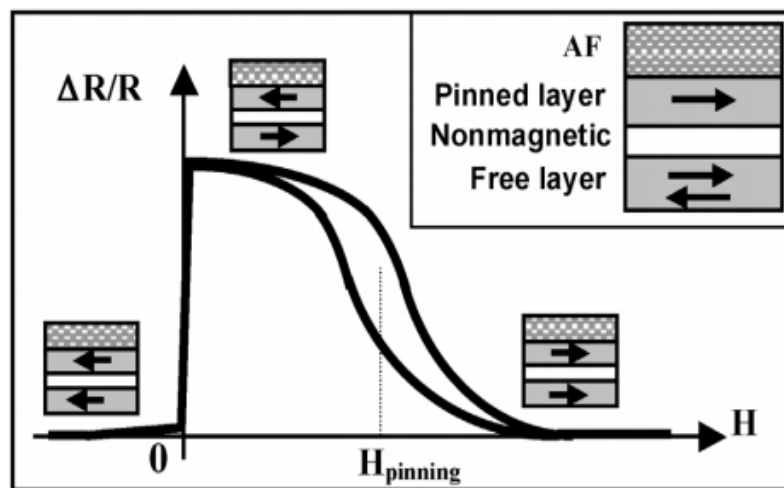
<sup>2</sup> Meservey

<sup>3</sup> Spin-Valve

مغناطیسی به واسطه جفت شدگی با یک لایه‌ی آنتی فرومغناطیس (AF) در یک جهت ثابت می‌شود، در حالی که مغناطش لایه‌ی دیگر می‌تواند آزادانه و مطابق با میدان مغناطیسی خارجی تغییر وضعیت دهد. جریانی که از شیر اسپینی عبور می‌کند، به جهت گیری مغناطش الکترودها نسبت به هم بستگی دارد و معمولاً وقتی مغناطش الکترودها با هم موازی باشند جریان بیشتری نسبت به حالت پادموازی عبور می‌کند. بنابراین وارون شدن میدان مغناطیسی خارجی می‌تواند باعث تغییر زیاد مقاومت قطعه شود. وابستگی مقاومت یک قطعه به میدان مغناطیسی را مغناطو مقاومت<sup>1</sup> (MR) می‌گویند، که این کمیت میزان جدادگی اسپین را در یک شیر اسپینی مشخص می‌کند. MR برای یک ولتاژ بایاس اعمال شده معین به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$MR = \frac{I_P - I_{AP}}{I_{AP}} \quad (۶-۲)$$

$I_P$  جریان حالت موازی و  $I_{AP}$  جریان حالت پادموازی است.

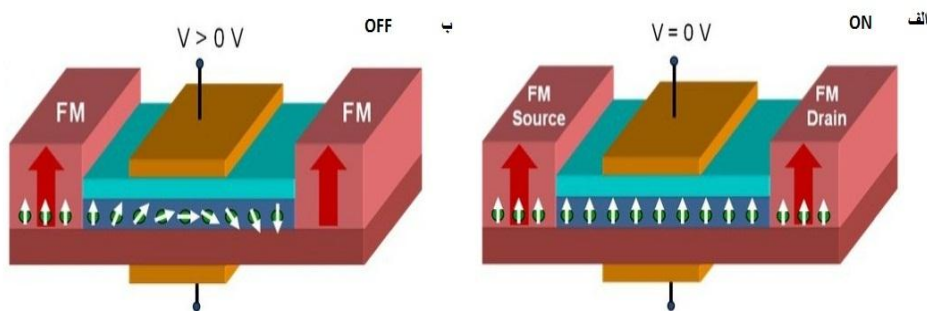


شکل ۲-۵: نمایش یک شیر اسپینی و اختلاف مقاومت آن بر اساس جهت گیری مغناطش دو لایه‌ی فرومغناطیس نسبت به هم. مغناطش یک لایه فرومغناطیس توسط یک لایه آنتی فرومغناطیس ثابت نگه داشته می‌شود در حالیکه مغناطش لایه دیگر با اعمال میدان خارجی مغناطیسی می‌تواند تغییر کند. مغناطش موازی لایه‌های فرومغناطیس کمترین مقاومت و حالت پادموازی، بیشترین مقاومت جریان را دارد.

<sup>1</sup> Magneto-Resistance

## ۲-۴-۲ ترانزیستور اثر میدانی اسپینی (Spin-FET):<sup>۱</sup>

ترانزیستورهای اثر میدانی اسپینی شامل دو الکتروود فرومغناطیسی می‌باشد، که توسط یک کانال نیمرسانا از هم جدا شده‌اند. در ترانزیستورهای اثر میدانی اسپینی که توسط داتا<sup>۲</sup> و داس<sup>۳</sup> مطرح شد [۶۱]، حامل‌ها با آرایش اسپینی کاملاً مشخص از الکتروود با قطبش اسپینی (منبع)<sup>۴</sup>، که می‌تواند فلز فرومغناطیس، نیم‌فلز و یا نیمرسانای رقیق شده مغناطیسی<sup>۵</sup> (DMS) باشد به داخل کانال تزریق، و توسط دیگر الکتروود قطبیده مغناطیسی جمع‌کننده<sup>۶</sup>، جمع و آشکار می‌شود. (شکل (۲-۶)) جریان منبع-جمع‌کننده به وضعیت اسپین حامل‌ها و جهت مغناطش الکتروودهای منبع و جمع‌کننده بستگی دارد. چنانچه وضعیت اسپین حامل‌ها نسبت به مغناطش الکتروودهای منبع و جمع‌کننده موازی هم باشند، شاهد بیشترین جریان خواهیم بود و اگر پادموازی باشند کمترین جریان، و ترانزیستور در وضعیت خاموش می‌باشد. با اعمال ولتاژ گیت، آرایش و نظم اسپینی حامل‌ها در کانال کنترل می‌شود. اگر ولتاژ اعمالی برای هم راستا کردن و منظم کردن اسپین حامل‌ها به صورت پادموازی با مغناطش الکتروود جمع‌کننده، به اندازه کافی مناسب باشد، جریان در ترانزیستور اثر میدانی اسپینی قطع می‌شود و انتظار می‌رود.



شکل ۲-۶: نمایش ترانزیستور اسپینی در دو وضعیت (الف) روشن (ب) خاموش. کانال میانی نیم رساناست (آبی) [۶۱].

<sup>1</sup> Spin Field Effect Transistor

<sup>2</sup> Data

<sup>3</sup> Das

<sup>4</sup> Source

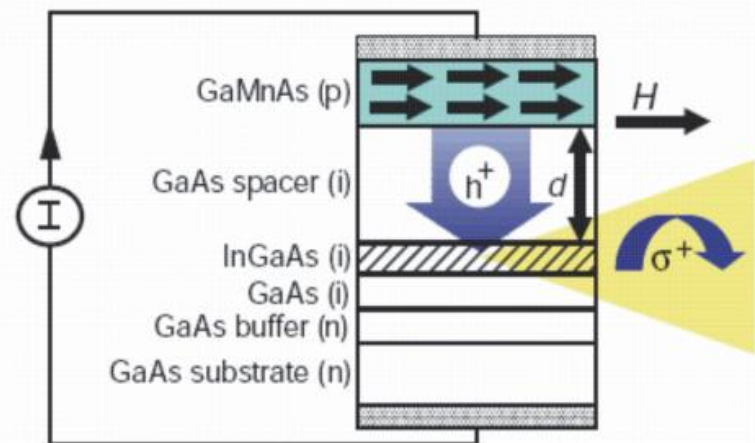
<sup>5</sup> Diluted Magnetic Semiconductor

<sup>6</sup> Drain

این وضعیت نسبتاً به ترانزیستورهای معمولی که براساس کنترل بار الکتریکی حامل‌ها عمل می‌کند در ولتاژ پایین‌تری اتفاق بیافتد. این می‌تواند قابلیت کاربردی ترانزیستورهای اسپینی در ولتاژهای پایین، در ریزپردازنده‌ها<sup>۱</sup> باشد.

## ۲-۴-۳ دیودهای تابشی نوری اسپینی (Spin(LED))<sup>۲</sup>:

در دیودهای تابشی نوری اسپینی، حفره‌های قطبیده اسپینی از یک نیم‌رسانای رقیق شده مغناطیسی (DMS) و الکترون‌های غیر قطبیده از یک نیم‌رسانای غیرمغناطیسی از دو طرف در یک چاه کوانتومی تزریق و باز ترکیب<sup>۳</sup> می‌شوند. میزان قطبش حفره‌های تزریق شده، می‌تواند با مقایسه‌ی شدت الکترو لومینسانس<sup>۴</sup> تابشی نور یا قطبش دایروی چپ‌گرد و راست‌گرد<sup>۵</sup> اندازه‌گیری و تعیین گردد. در شکل (۷-۲) ساختار نمونه‌ی یک دیود تابشی نوری اسپینی بر پایه GaAs، نمایش داده شده است. ساختار دیود تابشی بر پایه GaAs تشکیل شده از یک نیم‌رسانای فرامغناطیس (Ga,Mn) As نوع p، و نیم‌رسانای غیرمغناطیسی GaAs نوع n می‌باشد.



شکل ۷-۲: تزریق حفره‌هایی با قطبش اسپینی، در یک دیود نوری تابشی، توسط نیم‌رسانای رقیق شده‌ی مغناطیسی (DMS) (Ga,Mn) As.  $\sigma^+$  بیانگر نور قطبیده دایروی تابشی، از لبه‌ی چاه کوانتومی می‌باشد.

<sup>1</sup> Microprocessor

<sup>2</sup> Spin Light Emitting Diodes

<sup>3</sup> Recombination

<sup>4</sup> Electroluminescence

<sup>5</sup> Right- and left-circularly polarized light



فصل سوم

پیام‌های رسانه‌ها

پلیمرها<sup>۱</sup> مولکول‌های بزرگی هستند که از اتصال تعداد زیادی واحد تکراری کوچکتر به نام مونومر<sup>۲</sup> تشکیل شده‌اند و دارای وزن مولکولی بالایی می‌باشند [۶۲]. واژه پلیمر از کلمات یونانی پلی<sup>۳</sup> به معنی بسیار و مروس<sup>۴</sup> به معنی قسمت، قطعه یا پاره گرفته شده است. به همین دلیل در واژه‌نامه‌های فارسی در بسیاری مواقع بسیار نامیده می‌شود. از اتصال تعداد کمی از مونومرها به یکدیگر پلیمری با وزن مولکولی کم حاصل می‌گردد که الیگومر<sup>۵</sup> نامیده می‌شود. واژه الیگومر از کلمه یونانی الیگوس<sup>۶</sup> یعنی کم، گرفته شده است [۶۲]. پلیمرها، انواع و کاربردهای زیادی داشته و استفاده از این مواد در زندگی روزمره ابزار و صنایع گوناگون به خوبی دیده می‌شود. دسته‌ای از پلیمرها، پلیمرهای مزدوج<sup>۷</sup> هستند که در زنجیره‌ی خود پیوندهای یگانه و دوگانه‌ی متناوب دارند و در حقیقت از یک مونومر غیراشباع پدید آمده‌اند. شاید تا حدود ۴۰ سال پیش کسی تصور نمی‌کرد که یک پلیمر یا پلاستیک بتواند رسانای جریان الکتریسته باشد. اساسا پلیمرها جزء مواد نارسانا یا عایق محسوب می‌شوند و حتی به‌عنوان پوشش‌های عایق الکتریکی کاربرد دارند. اما از اوایل دهه‌ی هفتاد میلادی پلیمرهای مزدوج تولید شدند، این تصورات تغییر کرد. این پلیمرها می‌توانند رسانا باشند و الکترون‌ها را در طول زنجیر خود جا به جا کنند.

این کشف شگفت‌انگیز شاخه‌ی جدیدی را در دانش پلیمر به نام پلیمرهای رسانای الکتریکی<sup>۸</sup> ایجاد نمود که توجه دانشمندان زیادی را به خود جلب کرده است. اگرچه رسانایی پلیمرهای مزدوج در حد فلزاتی چون نقره، مس و حتی آهن نیست، اما تلفیقی از خواص فلزی (رسانایی) و پلیمری، این مواد را هم از فلزات و هم از پلیمرها متمایز و ممتاز کرده است. در حقیقت هر چند این مواد به‌عنوان

---

<sup>1</sup> Polymers

<sup>2</sup> Monomer

<sup>3</sup> poly

<sup>4</sup> Meros

<sup>5</sup> Oligomer

<sup>6</sup> Oligos

<sup>7</sup> Conjugated Polymers

<sup>8</sup> Electrically Conductive Polymers

پلیمرهای رسانا، شناخته می‌شوند، اما تنها خاصیت رسانایی آن‌ها نیست که مورد توجه قرار دارد. پلیمرهای مزدوج مجموعه‌ای از خواص الکتریکی، خصوصیات پلیمری نظیر انعطاف پذیری، چگالی کم، بهبود پذیری آسان ساختار، خواص نوری و دیگر ویژگی‌های جالب توجه را دارا هستند [۶۳]. امروزه به دلیل آن که پلیمرهای مزدوج، رسانایی قابل ملاحظه‌ای دارند به آن‌ها فلزات آلی<sup>۱</sup> یا فلزات سنتزی<sup>۲</sup> نیز گفته می‌شود. نقش این پلیمرها در صنایع، پزشکی و سایر امور زندگی غیر قابل انکار است. اهمیت این مواد تا اندازه‌ای است که به آن‌ها مواد قرن بیست و یکم گفته می‌شود [۶۴]. تاریخچه پلیمرهای رسانای الکتریکی به سال ۱۸۶۲ میلادی باز می‌گردد. در آن سال لدبای<sup>۳</sup> در کالج بیمارستان لندن با اکسایش آندی آنیلین در اسید سولفوریک ماده‌ی رسانایی بدست آورد که شاید پلی آنیلین بود [۶۵]. اما ماده‌ای که باعث تحقیقات فراوان در زمینه پلیمرهای رسانا شد، پلی استیلن بود. با شروع دهه‌ی ۱۹۹۰ میلادی پلیمرهای رسانای جدیدی مانند پلی پیرول<sup>۴</sup> (PPY)، پلی تیوفن<sup>۵</sup> (PT)، پلی پارافنیلن<sup>۶</sup> (PPP) و پلی فنیلین وینیلین<sup>۷</sup> (PPV) معرفی و اصلاح شیمیایی آن‌ها آن‌ها به سرعت توسعه یافت [۶۶].

### ۲-۳ پلیمرهای رسانا

پلیمرهای رسانا به چهار دسته تقسیم بندی می‌شوند که عبارتند از: پلیمرهای مرکب<sup>۸</sup>، پلیمرهای رسانای یونی<sup>۹</sup>، پلیمرهای اکسایشی و کاهش‌ی<sup>۱۰</sup> و پلیمرهای رسانای الکتریکی<sup>۱۱</sup>.

---

<sup>1</sup> Organic Metals

<sup>2</sup> Synthetic Metals

<sup>3</sup> Letheby

<sup>4</sup> Poly Pyrrole

<sup>5</sup> Poly Thiophene

<sup>6</sup> Poly Paraphenylene

<sup>7</sup> Poly Phenylene Vinylene

<sup>8</sup> Composites

<sup>9</sup> Ionically Conducting Polymers

<sup>10</sup> Redox Polymers

<sup>11</sup> Electrically Conductive Polymers

### ۳-۲-۱ پلیمرهای رسانای الکتریکی

این گروه دارای پیوندهای یگانه و دوگانه متناوب هستند. این پیوندهای متناوب یک شبکه  $\pi$  وسیع و گسترده تشکیل می‌دهند. جابه‌جایی الکترون در این شبکه  $\pi$ ، منبع رسانایی است. در پلیمرهای رسانای الکتریکی، رسانایی در یک زنجیره پلیمری براساس ماهیت مزدوج مولکول‌های پلیمر و در نتیجه تحرک الکترون‌های  $\pi$  است. در بین پلیمرهای رسانایی فوق‌الذکر، دسته چهارم خواص بهتر و کاربردهای بیشتری دارند و تحقیقات وسیع‌تری به منظور بهینه‌سازی خواص و کاربردهای آن‌ها در مراکز علمی و پژوهشی سراسر جهان صورت گرفته است.

### ۳-۳ کاربردهای پلیمرهای رسانا

کاربرد پلیمرهای رسانا در صنایع و نقش انکارناپذیر این مواد در زندگی امروزی چنان که گفته شد، گسترده‌تر از آن است که مجال بحث در مورد یک‌یک آن‌ها در این جا فراهم باشد. به پاره‌ای از مهم‌ترین کاربردهای این مواد اشاره می‌شود:

۱- باترهای با قابلیت شارژ مجدد<sup>۱</sup>: از پلی‌پیرول و پلی‌استیلن و پلی‌تیوفن و... در ساخت این باتری‌ها باتری‌ها استفاده می‌شود و این باتری‌ها در رایانه‌های همراه، گوشی‌های تلفن همراه و... کاربرد دارند. باتری‌های قابل شارژ ساخته شده از این مواد نسبت به باتری‌های لیتیومی موجود در بازار عمر طولانی‌تر، وزن کمتر و رسانایی بالاتر دارند و در برابر شارژ بیش از حد و نشسته مواد شیمیایی مقاوم هستند [۶۷].

۲- وسایل الکتروکرومیک<sup>۲</sup> (رنگزای الکترونی): یکی از کاربردهای بسیار جالب پلیمرهای رسانا، استفاده در ساخت تجهیزات الکتروکرومیک می‌باشد.

---

<sup>1</sup> Rechargeable Battery

<sup>2</sup> Electrochromic

به‌عنوان مثال پلی‌تیوفن که می‌تواند در حالت‌های مختلف، رنگ‌های مختلفی داشته باشد، یعنی در حالت اکسید به رنگ قرمز و در حالت احیا به رنگ آبی درآید. مثال دیگر پلی‌آنیلین می‌باشد که قابلیت تولید طیف وسیعی از رنگ‌ها را داراست. این ویژگی، کاربرد نمایشی این پلیمرها در تابلوهای اعلام و نمایشگرها و آگهی تبلیغاتی را در بر دارد [۶۸].

۳- کاربردهای پزشکی: استفاده از پلیمرهای رسانا در پزشکی بسیار گسترده و رو به افزایش است. از این دسته کاربردهای جالب می‌توان به ماهیچه‌های مصنوعی، عصب مصنوعی و غشای زیست پزشکی اشاره کرد [۶۹-۷۱].

۴- حسگرها: انواع حسگرهای گازی و زیست حسگرها با کاربردهای متنوع با استفاده از انواع پلیمرهای رسانا ساخته شده است. به‌عنوان مثال این حسگرها در تشخیص مواد سمی و خطرناک برای انسان در کارخانه‌ها، انبارها و معادن و... به کار می‌روند.

۵- دیودهای نشر نوری<sup>۱</sup> (LED): یکی دیگر از کاربردهای پلیمرهای رسانا در دیودهای نشر نوری (LED) است که در صفحه نمایشگرها به کار می‌روند و باعث نشر نور به صورت یکنواخت از صفحه نمایشگر می‌گردد. از ویژگی‌های این دیودها می‌توان به کاهش انرژی، وزن سبک، افزایش استحکام، ایجاد زاویه‌ی دید بهتر و افزایش روشنایی تصویر اشاره کرد [۷۲].

۶- انواع مواد هوشمند<sup>۲</sup>: مواد هوشمند اصطلاحاً به موادی گفته می‌شود که می‌توانند با درک محیط و شرایط اطراف خود نسبت به آن واکنش مناسب نشان دهند. در مواد هوشمند، هم‌زمان با تاثیر محرک بیرونی شاهد پاسخ‌دهی به آن هستیم. در اکثر موارد این مواد توانایی پاسخ به بیش از یک شرایط محیطی برخوردار هستند و پاسخ آن‌ها قابل پیش‌بینی است. مکانیزم هوشمندی در این مواد، عکس‌العمل در برابر تحریکات خارجی است. این عکس‌العمل تغییر در ابعاد و هندسه ماده را شامل می‌شود. از جمله این مواد می‌توان به پنجره‌های هوشمند ساخته شده از پلیمرهای رسانا اشاره کرد،

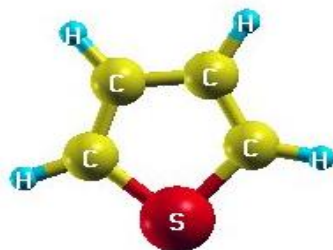
<sup>1</sup>Light Emitting Diodes

<sup>2</sup>Intelligent

که در برابر تابش خورشیدی تاریکی تدریجی به وجود می‌آورند [۶۹]. وسایل تبادل یون، کاتالیز کردن، ابر خازن‌ها<sup>۱</sup>، ترانزیستورهای اثر میدان<sup>۲</sup>، دیودها<sup>۳</sup>، اسپینترونیک<sup>۴</sup> و کاربردهای به‌عنوان محافظ خوردگی و... از دیگر کاربردهای پر شمار این مواد است [۷۳-۷۸].

### ۳-۴ تیوفن<sup>۵</sup>

تیوفن یا تیوفوران با فرمول  $C_4H_4S$  (شکل ۳-۱) یک مایع بی‌رنگ یا زرد بسیار کم‌رنگ با بویی شبیه بوی کهنگی، کپک زدگی و پوسیدگی است. نقطه ذوب آن  $38^\circ C$ - و نقطه جوش آن  $84^\circ C$  است. چگالی آن  $1.05 \frac{g}{ml}$  است [۷۹]. تیوفن یک ترکیب حلقوی آروماتیک با یک حلقه پنج ضلعی سطحی است که زاویه پیوند در CSC برابر  $93^\circ$  و در CCS برابر  $109^\circ$  و در CCC برابر  $114^\circ$  است. طول پیوند C-S  $178^\circ A$  و طول پیوند CC متصل به گوگرد  $134^\circ A$  و طول پیوند CC دیگر  $141^\circ A$  است.



شکل ۳-۱: نمایش ساختار مولکول تیوفن

تیوفن در شرایط عادی پایدار است و در آب نامحلول و در بسیاری از حلال‌های آلی قابل حل است. تیوفن اشتعال پذیر، تا حدی سمی و محرک پوست و چشم است. اولین بار ویکتور میر<sup>۶</sup> در سال ۱۸۸۲ میلادی وجود تیوفن را به صورت ناخالصی در بنزن حاصل از قطران زغال سنگ کشف کرد و نام تیوفن را برای نشان دادن تشابه ظاهری به بنزن به آن داد [۸۰]. تیوفن به صورت طبیعی در

<sup>1</sup> Super Capacitors  
<sup>2</sup> Field Effect Transistors  
<sup>3</sup> Diodes  
<sup>4</sup> Spinteronic  
<sup>5</sup> Thiophene  
<sup>6</sup> Victor meyer

بعضی فرآورده‌های گیاهی، تخم مرغ و مخمر وجود دارد. اما به‌عنوان جزئی از فرآورده‌های دارویی، مصنوعی و مواد رنگی اهمیت بیشتری دارد. هم‌اکنون روش‌های صنعتی و تجاری مناسبی برای تولید تیوفن‌ها از مواد اولیه آلیفاتیک وجود دارد. یک روش مهم شامل ترکیب یک ماده آلیفاتیک دارای یک واحد خطی چهار کربن با یک منبع گوگرد عنصری، مثل گوگرد یا دی‌سولفیدکربن در سطح یک کاتالیزور در دمای ۲۰۰-۷۰۰°C است. روش دیگر ساخت تیوفن با استفاده از استیلن<sup>۱</sup> و وینیل کلراید<sup>۲</sup> و هیدروژن سولفید است [۸۱]. سالانه دو میلیون کیلوگرم تیوفن در سراسر جهان تولید می‌شود. تیوفن یک ترکیب غنی از الکترون است و تمایل زیادی برای واکنش با الکترون دوست‌ها دارد. هالوژن‌ها (X) به سرعت با تیوفن ترکیب می‌شوند [۸۲].

### ۳-۵ پلی تیوفن<sup>۳</sup>

از پلیمریزاسون تیوفن، پلی تیوفن بدست می‌آید. مطالعه این پلیمر مزدوج (نیمه هادی) از چند دهه قبل آغاز شده است. رونکالی<sup>۴</sup> در سال ۱۹۹۲ میلادی تحقیقاتی روی سنتز الکتروشیمیایی پلی تیوفن انجام داد [۸۳]. رونکالی مطالعاتی هم روی ویژگی‌های الکترونیکی این پلیمر انجام داد [۸۴]. مک کالو<sup>۵</sup> در سال ۱۹۹۸ میلادی بر سنتز شیمیایی پلی تیوفن تمرکز کرد. تحقیقاتی که در سال‌های اخیر صورت گرفته است نشان داده است که سیستم‌های الیگوتیوفن که دو انتهای زنجیر با گونه‌های متفاوت مولکولی مثل فلورن<sup>۶</sup>، اترهای تاجی<sup>۷</sup> و... بسته شده است. فلئورسانس و جذب بالایی نشان می‌دهند. همچنین پلی تیوفن‌ها نسبت به پلیمرهای رسانایی مثل پلی استیلن<sup>۸</sup> پایداری محیطی بالاتری نشان می‌دهد. اما از نظر حلالیت، تاکنون حلالیت آن‌ها را در حلال‌های آلی و

---

<sup>1</sup> Acetylene

<sup>2</sup> Vinyl chloride

<sup>3</sup> Polythiophene

<sup>4</sup> Roncali

<sup>5</sup> Mccullough

<sup>6</sup> Fluorene

<sup>7</sup> Crown ethers

<sup>8</sup> Polyactylene

مخلوط‌هایی مثل آرسنیک تری فلوراید و آرسنیک پنتا فلوراید گزارش شده است [۸۵]. در میان پلیمرهای رسانای الکتریسته، پلی تیوفن و مشتقات آن به سرعت جایگاه، ویژه و خوبی پیدا کرده است. به سبب پایداری بالا پلی تیوفن در حالت‌های دوپه شده و دوپه نشده، کاربرد آن در زمینه‌های مختلفی نظیر الکترودها، هادی‌ها و نیمه هادی‌ها آلی گسترش پیدا کرده است. پلی تیوفن و مشتقات آن تا  $35^{\circ}\text{C}$  در هوا و تا  $900^{\circ}\text{C}$  در گاز بی اثر یا تحت خلاء پایدار می‌باشد. در محیط اسیدی غلیظ حل نمی‌شوند ولی در محیط بازی غلیظ به آهستگی حل می‌شوند. از پلی تیوفن در تهیه دستگاه‌های ذخیره‌سازی انرژی مانند خازن‌ها و باترهای قابل شارژ استفاده می‌شود. علاوه بر این از خواص جالب نوری آن‌ها در تهیه دیودهای نشر نوری<sup>۱</sup> (LED)، سلول‌های خورشیدی<sup>۲</sup>، پنجره‌های تزئینی و هوشمند هوشمند [۸۶] و از خواص مغناطیسی آن‌ها در تهیه سپرهای محافظ در مقابل میدان‌های مغناطیس، پوشش‌های آنتی استاتیک، محافظ در مقابل خوردگی، حسگر گازها، الیاف رسانا، ذخیره سازی اطلاعات، ترانزیستورها، اسپینترونیک، چاپگرهای جوهرافشان، چسب رسانا و غیره استفاده می‌گردد [۸۷-۸۸].

### ۳-۶ پژوهش‌های اخیر در مورد پلی تیوفن و دیگر پلیمرها

پلی تیوفن به‌عنوان یکی از مهم‌ترین انواع پلیمرهای رسانا زمینه وسیعی را برای پژوهش در حوزه‌هایی همچون شرایط سنتز از نظر نوع اکسنده<sup>۳</sup>، حلال، دما و زمان انجام واکنش، به علاوه اثر شرایط سنتز برای خواص نظیر گرماتابی، مورفولوژی و هدایت الکتریکی پلیمر و بالاخره حوزه وسیع کاربرد پلی تیوفن در عرصه‌هایی چون حسگرها، الکترونیک و اسپینترونیک و غیره فراهم آورده است. به طوری که محققین در سال ۲۰۰۴ میلادی، موفق به سنتز پلی تیوفن شده‌اند که به‌عنوان کاتد در باتری به کار رفته است [۸۹] و همچنین محققین در سال ۲۰۰۹ میلادی، در ادامه پژوهش خود بر

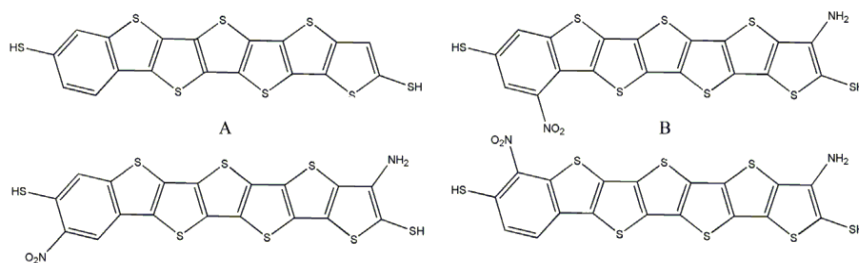
<sup>1</sup>Light Emitting Diodes

<sup>2</sup>Solar Cells

<sup>3</sup>Oxidant



روی کاربرد پلی تیوفن در باتری، موفق به سنتز نانو ذره‌های پلی تیوفن شده‌اند که کاربرد آن در ساخت مواد الکتروود ابر خازن، مورد بررسی قرار گرفته است [۹۰]. پژوهشگران، در ادامه مطالعه خود در زمینه پلی تیوفن، موفق به سنتز آسان نانو سیم‌های پلی تیوفن شده‌اند. آن‌ها گزارش کرده‌اند که نانو سیم‌های پلی تیوفن قطر ۵۰-۱۰۰ nm و طول چند میلی متری دارند و در حضور اکسیژن و رطوبت پایداری زیادی داشته و به آسانی می‌توان خصوصیات نوری و الکترونیکی آن‌ها را کنترل کرد [۹۱]. زنگ<sup>۱</sup> و همکارانش در سال ۲۰۱۳ میلادی به بررسی خواص تراپردی اتصال مولکول تیوفن در حضور جایگزینی بنزن با صفحات (۱۱۱) طلا، توسط رهیافت تابع گرین غیر تعادلی پرداختند [۹۲]. نتایج آن‌ها نشان داد که اتصال و موقعیت‌های یک سری گروه‌های ترکیبات شیمیایی (شکل ۳-۲) به طور موثر می‌توانند بر روی خواص تراپرد الکترونی این مولکول تاثیر بسزایی بگذارند و جهت جریان مورد علاقه بدست آمده قطعه، می‌تواند توسط بایاس ولتاژ اعمالی کنترل گردد و همچنین مقاومت دیفرانسیلی منفی<sup>۲</sup> (NDR) در این سیستم دیده شده است.



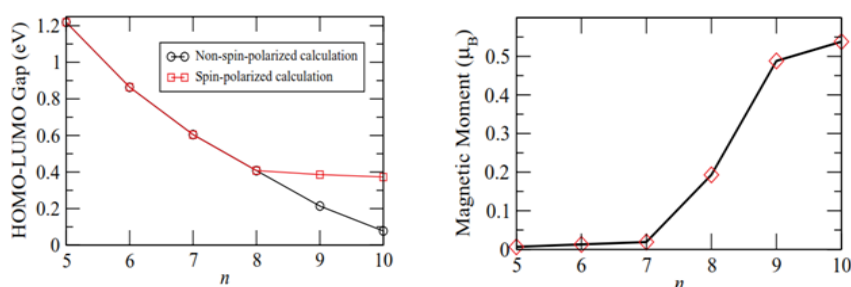
شکل ۳-۲: اتصالات مولکول تیوفن در حضور جایگزینی بنزن با گروه‌های ترکیبات شیمیایی

محاسبات این گروه نشان داد که جریان مستقیم تحت بایاس ولتاژ پایین به دلیل جابه‌جایی غیرمتقارن قله‌های ضریب تراپرد، که ناشی از اثرات تونلی تشدید در حالت‌های HOMO می‌باشد، مطلوب‌تر هست. در حالی که جایگزینی غیرمتقارن حالت‌های HOMO تحت بایاس ولتاژهای بالاتر در جریان معکوس سودمندتر و بهتر است.

<sup>1</sup> Jinping Zhang

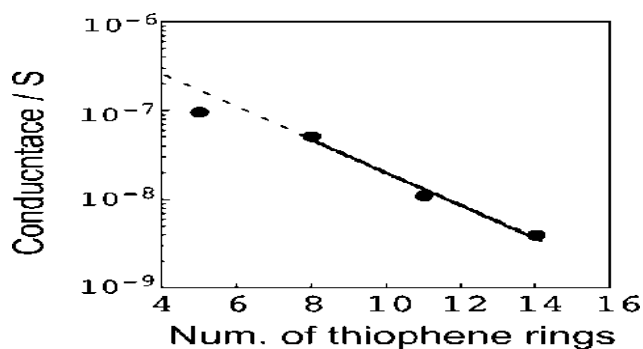
<sup>2</sup> Negative Differential Resistance

سنویتو<sup>۱</sup> و همکارانش در سال ۲۰۱۱ میلادی، خواص تراپردی مولکول‌های متعلق به سری اسن‌ها<sup>۲</sup> متصل با الکتروود طلا، را با استفاده از نظریه تابع چگالی به همراه دستاورد تابع گرین غیرتعدالی برای تراپرد الکترونی بررسی کردند [۹۳]. نتایج آن‌ها نشان داد که اسن‌های کوچک حالت پایه غیرمغناطیسی دارند. در حالی که مولکول‌های که دارای بیشتر از ۹ حلقه اسنی هستند، حالت پایه قطبیده اسپنی دارند (شکل ۳-۳). همچنین نتایج آن‌ها نشان داد که گاف نواری با افزایش طول مولکول کاهش می‌یابد (شکل ۴-۳).



شکل ۳-۳: مقادیر گشتاور مغناطیسی تابعی از طول مولکول  $n$  شکل ۴-۳: مقادیر گاف نواری خانواده اسن برحسب  $n$

و همچنین یامادا<sup>۳</sup> و همکارانش در سال ۲۰۰۸ میلادی، خواص تراپردی الکترونی سیم مولکولی الیگوتیوفن را متصل با الکتروود طلا، را به صورت تجربی بررسی کردند [۹۴]. نتایج آن‌ها نشان داد که با افزایش تعداد حلقه‌های الیگوتیوفن، رسانندگی کاهش می‌یابد (شکل ۵-۳).



شکل ۵-۳: نمودار رسانندگی تابعی از تعداد حلقه‌های الیگوتیوفن

<sup>1</sup> Sanvito  
<sup>2</sup> Acenes  
<sup>3</sup> Yamada

فصل چہارم

نظریہ تبلیغ چکالی

,

تبلیغ کرین غیر تعادلی

#### ۴-۱ مقدمه

نظریه‌های مکانیک کلاسیک و کوانتومی دو نظریه اصلی مورد استفاده برای توصیف اکثر قریب به اتفاق سیستم‌های فیزیکی هستند اما محدودیت اصلی‌شان این است که تنها مسائل تک ذره‌ای و دو ذره‌ای در این چارچوب‌ها دارای حل تحلیلی دقیق هستند و برای بررسی سیستم‌هایی با بیش از دو ذره در حالت کلی باید دست به دامان نظریه‌ها و تقریب‌های توسعه یافته و روش‌های محاسباتی شد. راهکارهای متعدد و مختلفی برای توصیف محاسباتی سیستم‌های بس‌ذره‌ای<sup>۱</sup> توسعه پیدا کرده است که هر یک بسته به اهداف مسائل و خواص مورد مطالعه از تقریب‌ها و مدل‌های نظری مختلفی استفاده می‌کنند. یکی از نظریه‌های مهم و پایه برای بسیاری از محاسبات سیستم‌های بس ذره‌ای نظیر مولکول‌ها و بلورها، نظریه‌ی تابعی چگالی است. استفاده از این نظریه به همراه رهیافت کوهن-شم<sup>۲</sup> منجر به یک توصیف تک ذره‌ای از سیستم‌های بس‌ذره‌ای می‌شود که تأثیر بسزایی در ساده‌سازی محاسبات آن‌ها دارد و به همین دلیل امروزه مبنای اکثر محاسبات کوانتومی بلورها که جزو مسائل اساسی فیزیک ماده چگال هستند به شمار می‌رود.

#### ۴-۲ نظریه تابعی چگالی

#### ۴-۲-۱ مسئله بس ذره‌ای

بررسی مجموعه‌ای از اتم‌ها، مولکول‌ها، جامدات، گازها، مایعات و غیره را شکل می‌دهند که تشکیل شده از الکترون‌ها و هسته‌ها می‌باشند. توسط مکانیک کوانتومی می‌توان یک سیستم بر هم‌کنشی از الکترون‌ها و هسته‌ها را توسط معادله شرودینگر توصیف کرد:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1-4)$$

که  $E$  ویژه مقدار انرژی می‌باشد و عملگر هامیلتونی بس ذره‌ای به صورت زیر می‌باشد:

<sup>1</sup> Many body

<sup>2</sup> Kohn-Sham

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_e} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \nabla_i^2 + \sum_{I=1}^{N_{nuc}} \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\right) \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|} \quad (۲-۴)$$

در معادله (۲-۴) بخش اول و دوم انرژی‌های جنبشی الکترون‌ها و هسته‌ها و سه بخش آخر به ترتیب بر هم‌کنش‌های بین الکترون‌الکترون، الکترون هسته، و هسته هسته می‌باشند.  $\hbar$  ثابت پلانک،  $m$  و  $M$  به ترتیب جرم‌های الکترون و هسته،  $Z_I$  عدد اتمی  $I$  امین اتم،  $e$  بار الکترون،  $r_i$  و  $R_I$  موقعیت  $i$  امین الکترون و  $I$  امین هسته می‌باشند. حل معادله شرودینگر بس‌ذره‌ای بسیار پیچیده است. برای ساده‌سازی مسئله از تقریب بورن اوپنهایمر<sup>۱</sup> استفاده شده است، که بیان می‌کند هسته‌ها بسیار سنگین‌تر از الکترون‌ها هستند و بسیار کندتر از الکترون‌ها حرکت می‌کنند. در نتیجه می‌توان حرکت هسته‌ها و الکترون‌ها را جدا کرد. فرض بر این است که موقعیت اتم‌ها ثابت شده‌اند در حالی که الکترون‌ها در زمینه میدان باری هسته‌ها حرکت می‌کنند. تابع موج کلی می‌تواند به دو قسمت تابع موج الکترونی و یونی جدا سازی شود. در نتیجه معادله شرودینگر برای قسمت الکترونی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\hat{H}_e(r, R) \Psi_e = E_e \Psi_e(r, R) \quad (۳-۴)$$

که عملگر هامیلتونی الکترونی، توسط معادله زیر بیان می‌شود:

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \hat{V}_{ext} \quad (۴-۴)$$

$\hat{V}_{ext}$  پتانسیلی است که توسط هسته‌ها روی الکترون‌ها عمل می‌کند. توجه شود که برهم‌کنش بین هسته‌ها به‌عنوان یک پارامتر وارد می‌شود. اگر چه تعداد درجات آزادی سیستم توسط تقریب بورن-اوپنهایمر می‌تواند کاهش یابد اما حل مسئله بر هم‌کنشی الکترون-الکترون همچنان مشکل است. بعلاوه تابع موج الکترونی وابسته به مختصات تمام الکترون‌ها است.

<sup>1</sup> Born-Oppenheimer

#### ۴-۲-۲ نظریه هوهنبرگ-کوهن<sup>۱</sup>

هدف اصلی نظریه تابعی چگالی، توصیف یک سیستم برهم‌کنشی براساس چگالی الکترونی بجای توابع موج بس ذره‌ای می‌باشد. نظریه تابعی چگالی بر اساس دو نظریه بنیادی، توسط هوهنبرگ و کوهن پایه ریزی شد [۹۵]. نظریه اول بیان می‌کند که انرژی حالت پایه یک سیستم بر هم‌کنشی از الکترون‌ها، تابعی یکتا<sup>۲</sup> از چگالی بار الکترونی است. نظریه اول هوهنبرگ-کوهن فقط اثباتی است بر وجود تابعی از چگالی الکترونی، اگرچه شکل درست تابعی ناشناخته است. از نظریه دوم هوهنبرگ-کوهن این مطلب اثبات می‌شود که انرژی کل هر سیستم بس الکترونی نسبت به چگالی حالت پایه آن، از یک اصل وردشی<sup>۳</sup> تبعیت می‌کند. بر طبق این نظریه مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی در معادله ۴-۴ می‌تواند به صورت زیر بیان شود:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E[n(\mathbf{r})] \quad (۵-۴)$$

که  $E[n(\mathbf{r})]$  تابعی انرژی کل است و  $n(\mathbf{r})$  چگالی الکترونی است. اگر شکل تابعی انرژی مشخص باشد، می‌توان چگالی الکترونی را تا جایی که تابعی انرژی توسط اصل وردشی کمینه شود تغییر داد:

$$\left. \frac{\delta E[n(\mathbf{r})]}{\delta n} \right|_{n=n_0} = 0 \quad (۶-۴)$$

از معادله (۶-۴) چگالی الکترونی که به کمینه انرژی مربوط می‌شود، چگالی حالت پایه  $n_0(\mathbf{r})$

می‌باشد. بر طبق نظریه اول، انرژی حالت پایه می‌تواند به صورت زیر بیان شود:

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = E[n_0(\mathbf{r})] \quad (۷-۴)$$

#### ۴-۲-۳ معادلات کوهن-شم<sup>۴</sup>

راه حلی برای کاهش مسئله بس ذره‌ای حقیقی، به یک مسئله تک الکترونی، توسط کوهن و

<sup>1</sup> Hohenberg-Kohn

<sup>2</sup> Unique functional

<sup>3</sup> Variational principle

<sup>4</sup> Kohn-Sham

شم مطرح شد. الکترون‌های برهم‌کنشی، جایگزین الکترون‌های غیر برهم‌کنشی شد، که تحت یک پتانسیل موثر<sup>۱</sup> حرکت می‌کنند. انرژی تابعی کل در معادله (۴-۵) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$E[n(\mathbf{r})] = T_0[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + \int V_{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} + E_{xc}[n(\mathbf{r})] \quad (۸-۴)$$

در معادله (۸-۴)،  $T_0[n(\mathbf{r})]$  تابعی انرژی جنبشی سیستم الکترونی غیر برهم‌کنشی، بخش دوم انرژی الکترواستاتیکی یا انرژی هارتری<sup>۲</sup> و بخش سوم انرژی خارجی ناشی از هسته‌ها می‌باشند و بخش آخر همه‌ی باقی مانده آنچه که تصحیح کننده انرژی است، که انرژی تبادلی و همبستگی<sup>۳</sup> نامیده می‌شود. با کمینه کردن معادله (۸-۴) نسبت به چگالی، معادلات تک ذره‌ای کوهن شم برابر است با:

$$\left[ -\frac{\nabla^2}{2} + V_{eff}(\mathbf{r}) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (۹-۴)$$

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = V_{ext} + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} \quad (۱۰-۴)$$

توجه شود که توابع موج کوهن-شم  $\Psi_i(\mathbf{r})$ ، هیچ معنی فیزیکی مستقیمی را نمی‌دهند. آن‌ها فقط توابع کمکی<sup>۴</sup> برای محاسبه چگالی الکترونی هستند. چگالی الکترونی می‌تواند به صورت زیر باشد:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (۱۱-۴)$$

#### ۴-۲-۴ تابعی‌های تبادلی-همبستگی<sup>۵</sup>

رویکرد کوهن-شم نشان داد که چطور مسئله بس‌ذره‌ای را به یک مسئله تک الکترونی موثر تبدیل کنیم. البته نیاز است که تابعی تبادلی همبستگی،  $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$  مشخص و تعیین شود. متأسفانه، شکل دقیق تابعی همبستگی-تبادلی به سادگی شناخته شده نیست؛ بنابراین باید از تقریب استفاده نمود.

<sup>1</sup> Effective potential

<sup>2</sup> Hartree energy

<sup>3</sup> Exchange and correlation energy

<sup>4</sup> Auxiliary functions

<sup>5</sup> Exchange-Correlation Functionals

#### ۴-۲-۴-۱ تقریب چگالی موضعی<sup>۱</sup> (LDA)

ساده‌ترین تقریب، تقریب چگالی موضعی (LDA) نامیده می‌شود. تقریب چگالی موضعی برای پتانسیل تبادلی-همبستگی توسط کوهن-شم در سال ۱۹۶۵ ارائه شد، که از انرژی تبادلی-همبستگی گاز الکترونی همگن بدست می‌آید. تابعی تبادلی-همبستگی LDA به صورت زیر است:

$$E_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})] \approx \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{homo}(n(\mathbf{r})) d\mathbf{r} \quad (۱۲-۴)$$

که  $\varepsilon_{xc}^{homo}$ ، انرژی همبستگی-تبادلی چگالی گاز الکترونی همگن، با چگالی الکترونی  $n(\mathbf{r})$  می‌باشد. بنابراین تنها اطلاعاتی که نیاز می‌باشد، انرژی تبادلی-همبستگی گاز الکترونی است که محاسبه دقیق آن امکان پذیر است. به دلیل آنکه تابعی، از چگالی الکترونی یکنواخت موضعی بدست می‌آید انتظار خطا برای مسائلی می‌رود که چگالی‌های آن‌ها به سرعت تغییر می‌کند [۹۶]. اگرچه تقریب LDA برای جامدات کپه‌ای بسیار خوب کار می‌کند، اما در صورت تغییر سریع چگالی الکترونی، همانند داخل اتم و مولکول، بهتر است از تابعی دیگری استفاده شود.

#### ۴-۲-۴-۲ تقریب شیب تعمیم یافته<sup>۲</sup> (GGA)

تقریب پر استفاده دیگری که نسخه تعمیم یافته و بهبود یافته LDA محسوب می‌شود تقریب GGA می‌باشد که فرمول بندی‌های متفاوتی از آن توسعه پیدا کرده است. تلاشهای زیادی برای پیدا کردن تابعی خوب و مناسب از این تقریب انجام گرفته است. دو تا از پر استفاده‌ترین تابعی‌های این تقریب، تابعی پردو-ونگ (PW91) [۹۷] و پردو-بورگ-ارنزهوف (PBE) [۹۸] می‌باشد. در این پایان نامه از دومین تابعی این تقریب بهره گرفته شده است. در تقریب GGA، انرژی تبادلی-همبستگی علاوه بر چگالی الکترونی در هر نقطه، به تغییرات چگالی در آن نقطه نیز وابسته است، و برابر است با:

<sup>1</sup> Local Density Approximation

<sup>2</sup> Generalized Gradient Approximation



$$E_{xc}^{GGA} = \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}(n(\mathbf{r}), |\nabla n(\mathbf{r})|) d\mathbf{r} = \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{homo} F_{xc}(n, |\nabla n|) d\mathbf{r} \quad (13-4)$$

که در این رابطه عبارت  $F_{xc}$  یک تابعی بدون بعد است که به صورت زیر نوشته می شود:

$$F_{xc}(n, |\nabla n|) = F_x(n, |\nabla n|) + F_c(n, |\nabla n|) \quad (14-4)$$

محاسبه  $F_c$  مشکل تر از  $F_x$  می باشد اگر چه نقش آن در عبارت بالا کمتر است، سهم انرژی همبستگی در مقایسه با انرژی تبادل بسیار ناچیز است. برای محاسبه  $F_c$  تابعی های مختلفی پیشنهاد شده است. تنها نام تابعی های مربوط به  $F_x$  ذکر می شود که در بالا دو تا از مهم ترین تابعی های این تقریب ذکر شد و این به دلیل اهمیت بیشتر  $F_x$  نسبت به  $F_c$  می باشد [۹۸]. برای سیستم های قطبیده اسپینی، چگالی انرژی تبادل-همبستگی در این تقریب به صورت زیر می باشد:

$$\varepsilon_{xc}^{\pm}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{xc}^{\pm}(n^+(\mathbf{r}), n^-(\mathbf{r}), |\nabla n^+(\mathbf{r})|, |\nabla n^-(\mathbf{r})|) \quad (15-4)$$

### ۳-۴ روش های حل معادلات تک ذره ای کوهن-شم

تنوع زیادی در کدهای ابتدا به ساکن وجود دارد که از روش DFT برای محاسبه ساختار الکترونی مواد استفاده می کنند [۹۹-۱۰۴]. تفاوت اساسی بین کدها و روش های مختلف، عموماً مربوط به مجموعه پایه ای است که توابع موج کوهن-شم بر اساس آن بسط داده می شوند، همچنین تقریب های به کار گرفته شده در آنها که معمولاً یک موازنه بین دقت و سرعت در این کدها وجود دارد. مجموعه پایه هایی که برای بسط تابع موج کوهن-شم  $\psi_i(\mathbf{r})$  بکار می روند، دارای سه گروه عمده می باشند:

۱- روش پایه های غیر جایگزیده امواج تخت (PW): کدهایی نظیر VASP و QUANTUM ESPRESSO و غیره بر این مبنا می باشند.

۲- روش پایه های جایگزیده: از جمله توابع Gaussian، مانند کد Gaussian و اوربیتال های اتمی نظیر

کد SIESTA و ...

۳- روش هیبریدی و ترکیبی کره‌های اتمی، نظیر اوربیتال مافین-تین خطی (LMTO)<sup>۱</sup> که در آن با در نظر گرفتن کره‌های اتمی فرضی (کره مافین-تین)، همچنین شعاع مافین-تین و انتخاب اوربیتال اتمی به‌عنوان پایه درون کره‌ها و امواج تخت در خارج کره‌ها به حل مسئله می‌پردازد. این روش تلفیقی از دو روش بالا است که از دو نوع پایه استفاده می‌کند. کد محاسباتی WIEN2k بر این روش استوار می‌باشد.

#### ۴-۳-۱ کد SIESTA<sup>۲</sup>

کد سیستا بر مبنای روش دوم، یعنی بسط تابع موج کوهن-شم بر مبنای ترکیب خطی از اوربیتال‌های جایگزیده‌ی اتمی (LCAO) به‌عنوان پایه، و تقریب شبه پتانسیل برای توصیف الکترون‌های مغزی و هسته می‌باشد. در این قسمت توصیف مختصری از SIESTA ارائه می‌شود و توصیفی دقیق‌تر را می‌توان در مراجع [۹۹، ۱۰۵-۱۰۷] یافت.

#### ۴-۳-۱-۱ مجموعه پایه جایگزیده اوربیتال اتمی

در کد SIESTA، برای حل معادله‌ی کوهن-شم، از ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی عددی جایگزیده به‌عنوان مجموعه پایه به منظور بسط، استفاده می‌شود. این اوربیتال‌های اتمی می‌توانند به صورت حاصل ضربی از یک تابع شعاعی در یک هماهنگ‌گ‌کروی نوشته شوند:

$$\phi_{lmn}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (۴-۱۶)$$

که  $R_{n,l}$  یک تابع شعاعی برای اوربیتال  $n$ ، و  $Y_{l,m}$  یک هماهنگ‌گ‌کروی حقیقی برای تکانه زاویه‌ای اوربیتالی  $l$  و عدد کوانتومی مغناطیسی  $m$  می‌باشد. تابع شعاعی فراتر از یک شعاع خاص  $r_c$  صفر

<sup>1</sup> Linearized Muffin-Tin Orbitals

<sup>2</sup> Spanish Initiative for Electronic Simulation with Thousands of Atoms

می شود یعنی  $R_{n,l}(r_c) = 0$ . بر خلاف امواج تخت، دقت نتایج برای یک سیستم داده شده بر مبنای اوربیتال‌های اتمی، وابسته به اندازه و شکل پایه‌هاست. اندازه‌ی تعداد پایه‌ها بر مبنای زتای ( $\xi$ ) چند گانه می باشد که می توان برای هر  $m$  و  $l$ ، تعداد اختیاری از توابع شعاعی بدون گره استفاده کرد که اوربیتال‌های زتای  $\xi$  مرتبه بالاتر گفته می شود [۹۹]. هر اوربیتال زتا  $\xi$ ، مربوط به هماهنگ‌های گروهی مشابه و مشترک با توابع شعاعی متفاوت می‌باشد. در اینجا به معرفی مجموعه اندازه پایه‌های متفاوت که در SIESTA موجود می‌باشد پرداخته می‌شود:

#### ۱- اوربیتال‌های زتای یگانه $^1(SZ)$ :

مجموعه پایه‌ی زتای یگانه ( $SZ$ )، آرایش الکترون‌های لایه‌ی ظرفیت را پوشش می‌دهد که محتوی همه پوسته‌های باز و در بعضی مواقع پوسته‌های بسته با انرژی بالا می‌باشد. این توابع پایه توسط حل معادله‌ی شعاعی شرودینگر برای اتم، با پتانسیل محدود کننده<sup>۲</sup> بدست می‌آید. پتانسیل محدود کننده توسط پارامترهایی نظیر  $V_0$ ،  $r_{inn}$  و  $r_c$  تعریف می‌شود. در اینجا  $V_0$  میزان نرمی<sup>۳</sup> پتانسیل محدود کننده را تعیین می‌کند. پارامتر  $r_c$  تعیین کننده‌ی شعاع محدودیت برای اوربیتال‌های عددی می‌باشد. شعاع محدود کننده  $r_c$  به‌عنوان موقعیت اولین گره‌ی تابع موج با انرژی  $E_{nl} + \Delta E_{nl}$  در نظر گرفته شده است که  $E_{nl}$ ، انرژی مربوط به شبه ویژه حالت اتمی<sup>۴</sup> و  $\Delta E_{nl}$ ، انرژی برانگیختگی اوربیتال شبه اتمی به دلیل محدودیت آن در یک بازه‌ی محدود می‌باشد. مضاف بر آن،  $r_{inn}$  شعاع داخلی است که پتانسیل محدود کننده نرم آغاز می‌شود.

#### ۲- اوربیتال‌های زتای دوگانه $^5(DZ)$ :

اوربیتال‌های زتای دوگانه ( $DZ$ ) با توجه به ادامه‌ی روند شکافت مجموعه پایه‌ی Gaussian ساخته

<sup>1</sup> Single zeta

<sup>2</sup> Confinement potential

<sup>3</sup> Softness

<sup>4</sup> Pseudo-atomic eigenstate

<sup>5</sup> Double zeta

می‌شود. اوربیتال شکافت، توسط ساختن یک پایه‌ی اوربیتالی تحلیلی<sup>۱</sup> که به آرامی در شعاع  $r_{split}$  اوربیتال زتای اولیه را منطبق کند، به دست می‌آید. شکل تابع استفاده شده برای اوربیتال شکافت:

$$R_l^{2\xi}(r) = \begin{cases} r^l(a_l - b_l r^2) & \text{if } r < r_l^{split} \\ R_l^{1\xi}(r) & \text{if } r \geq r_l^{split} \end{cases} \quad (۱۷-۴)$$

ثابت های  $a_l$  و  $b_l$  با استفاده از پیوستگی توابع موج و مشتقات آن‌ها در  $r_l^{split}$  تعیین می‌شوند. تابع شعاعی دومین زتا  $\xi$ ، یعنی  $R_l^{2\xi}(r)$  در  $r \geq r_l^{split}$  دنباله‌ای مشابه اولین زتا  $\xi$  دارد. شعاع شکافت  $r_l^{split}$ ، توسط پارامتر نرم شکافت<sup>۲</sup> تعیین می‌شود. این پارامتر، شعاع انطباق ( $r_m$ ) یک اوربیتال تحلیلی که اوربیتال زتای اولی را به پایه‌ی زتای دوگانه می‌شکافتد، پیدا می‌کند. شعاع انطباق  $r_m$ ، با مشخص شدن اینکه روند شکافت اوربیتال نسبت به روند اوربیتال زتای اولی باید دارای مقدار split-norm باشد، تعیین می‌شود. مقدار معتبر split-norm در بازه‌ی بین ۰ تا ۱ (به غیر از شامل شدن خود ۰ و ۱) قرار دارد.  $r_c$ ، شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای اولی و  $r_m$ ، شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای دومی می‌باشد. مقدار  $r_c$ ، توسط انرژی برانگیختگی و مقدار  $r_m$  توسط پارامتر (Split-Norm) کنترل و تعیین می‌شود.

#### ۴-۳-۱-۲ شبه پتانسیل<sup>۳</sup>

پتانسیل کولنی قوی و الکترون‌های مغزی<sup>۴</sup> به شدت مقید در اتم‌ها، باعث تغییراتی بسیار سریع در توابع موج با تعداد زیادی گره می‌شوند. در نتیجه به تعداد زیادی توابع پایه، برای توصیف و ساخت آن‌ها (توابع موج الکترون‌های مغزی) نیاز داریم. رهیافتی برای کاهش تعداد توابع پایه، شبه پتانسیل می‌باشد. برای کاهش تعداد حالت‌ها در محاسبات، می‌توان الکترون‌های یک اتم را به الکترون‌های مغزی و ظرفیت تقسیم نمود. الکترون‌های ظرفیت، الکترون‌هایی هستند که پوسته‌های خارجی اتم را

<sup>1</sup> Analytical orbital

<sup>2</sup> Split norm parameter

<sup>3</sup> Pseudopotential

<sup>4</sup> Core electrons

اشغال می‌کنند و مسئول پیوندهای شیمیایی می‌باشند. بنابراین خواص الکترونی این حالت‌ها به میزان زیادی به محیط شیمیایی آن‌ها بستگی دارد. از طرف دیگر الکترون‌های مغزی الکترون‌هایی هستند که پوسته‌های داخلی اتم و نزدیک به هسته را اشغال می‌کنند. این الکترون‌ها در پیوندهای شیمیایی مشارکت ندارند و خواص الکترونی آن‌ها به میزان جزئی از محیط شیمیایی اطراف تاثیر می‌پذیرد. بنابراین فرض می‌شود پتانسیل حاصل از الکترون‌های مغزی مستقل از محیط است. در نتیجه می‌توان الکترون‌های مغزی را از محاسبات حذف نمود و تنها الکترون‌های ظرفیت را در نظر گرفت. تنها اثری که الکترون‌های مغزی دارند، استتار پتانسیل هسته می‌باشد. پس می‌توان پتانسیل ناشی از الکترون‌های مغزی و هسته را با یک پتانسیل موثر جایگزین کرد. این پتانسیل موثر در محل هسته، تکینه است اما از آنجا که خواص الکترونی مولکول‌ها و جامدات توسط چگالی بار در ناحیه پیوند تعیین می‌شود، نیاز به توصیف دقیق چگالی بار در نزدیکی هسته وجود ندارد. بنابراین می‌توان پتانسیل موثر را با شبه پتانسیل  $V_{PP}$  جایگزین کرد تا از تکینگی در هسته جلوگیری شود و در فواصل دورتر از هسته، پتانسیل صحیح را ایجاد کند. در نتیجه توابع شبه موج با توابع موج اتمی در نزدیک هسته متفاوت‌اند اما در ناحیه پیوندی، در فواصل دور از هسته یکسان می‌باشند. به اتمی که هسته والکترون‌های مغزی آن توسط شبه پتانسیل جایگزین شود، شبه اتم گفته می‌شود. در SIESTA شبه پتانسیل‌های ترولیر-مارتین<sup>1</sup> استفاده می‌شود [۱۰۸-۱۱۰]. پتانسیل اتمی تک ذره‌ای موثر که روی الکترون‌های ظرفیت اثر می‌کند، با جمع پتانسیل موثر حاصل از هسته و الکترون‌های مغزی (شبه پتانسیل) به اضافه پتانسیل‌های حاصل از الکترون‌های ظرفیت (پتانسیل هارتری و پتانسیل همبستگی-تبادلی) دیگر برابر است. به دلیل این‌که  $V_{ion,l}^{PP}(\mathbf{r})$  (شبه پتانسیل مربوط به هسته و الکترون‌های مغزی)، شبه موضعی می‌باشد، یعنی این پتانسیل غیر از  $\mathbf{r}$  به عدد کوانتومی  $l$  نیز بستگی دارد، بنابراین می‌توان شبه پتانسیل شبه موضعی را به دو قسمت بلندبرد مستقل از  $l$ ،  $V_{ion}^{local}(\mathbf{r})$  و کوتاه برد وابسته به  $l$ ،  $V_l^{nonlocal}(\mathbf{r})$  تقسیم کرد:

<sup>1</sup> Troullier-Martins pseudopotentials

$$V_{ion,l}^{PP}(\mathbf{r}) = V_{ion}^{local}(\mathbf{r}) + V_l^{nonlocal}(\mathbf{r}) \quad (18-4)$$

عملگر شبه پتانسیل یونی با فرمول بندی ترولیر-مارتین به صورت زیر نوشته می شود [۱۰۶]:

$$\hat{V}_l^{PP}(\mathbf{r}) = V_{ion}^{local}(\mathbf{r}) + \sum_l V_l^{nonlocal}(\mathbf{r}) \hat{p}_l \quad (19-4)$$

که  $\hat{p}_l$  یک تصویرکننده روی مولفه  $l$  تابع موج است. قسمت وابسته به  $l$ ، به شکل کاملاً غیر موضعی  $\hat{V}^{KB}$  که توسط کلینمن-بای لندر (KB)<sup>۱</sup> ارائه شده، تقریب زده می شود [۹۷، ۱۰۶-۱۰۸]. نتیجه این است که عملگر شبه پتانسیل برد محدود دارد و به شکل زیر در می آید:

$$\hat{V}_{ion}^{PP}(\mathbf{r}) = V_{ion}^{local}(\mathbf{r}) + \hat{V}^{KB} \quad (20-4)$$

شبه پتانسیل‌ها باید دارای ویژگی‌های زیر باشند: (۱) ویژه مقادیر توابع موج تمام الکترونی برای آرایش مرجع اتمی انتخابی در تطابق با توابع موج شبه اتمی باشد. (۲) تابع موج تمام الکترونی و شبه تابع موج و نیز پتانسیل تمام الکترونی و شبه پتانسیل در خارج از ناحیه مغزی و شعاع مغزی،  $r \geq r_c$  بر هم منطبق باشند. (۳) مقدار بار درون ناحیه مغزی  $r < r_c$ ، که با تابع موج تمام الکترونی و شبه تابع موج محاسبه می شود، یکسان باشد (شرایط پایستگی بار).

$$\int_0^{r_c} r^2 |\psi_l^{ae}(\mathbf{r})|^2 dr = \int_0^{r_c} r^2 |\psi_l^{ps}(\mathbf{r})|^2 dr \quad (21-4)$$

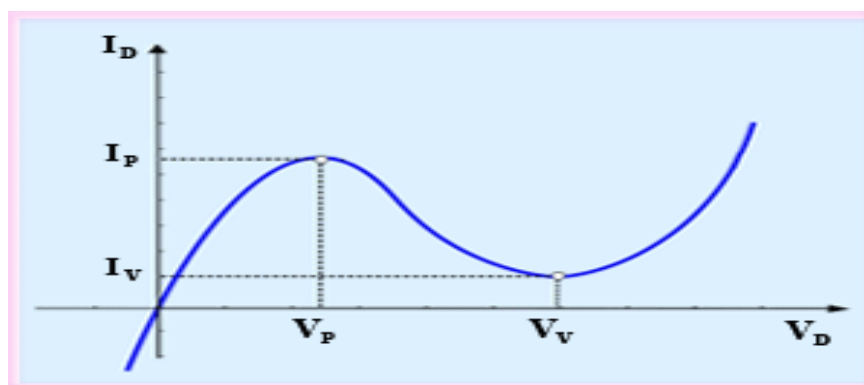
(۴) پراش امواج در اثر وجود ناحیه مغزی برای پتانسیل کامل و شبه پتانسیل یکسان باشد. برای این منظور باید تغییر فاز امواج ناشی از پتانسیل کامل و شبه پتانسیل یکسان باشد. از آنجا که تغییر فاز در اثر وجود سد پتانسیل به مشتق لگاریتمی تابع موج وابسته است، لذا لازم است مشتق لگاریتمی تابع موج تمام الکترونی و شبه تابع موج در  $r_c$  برابر باشند که  $r_c$  شعاع ناحیه مغزی می باشد.

<sup>1</sup> Kleinman-Bylander

$$\frac{d}{dr} \ln \psi_l^{ps}(\mathbf{r})|_{r=r_c} = \frac{d}{dr} \ln \psi_l^{ae}(\mathbf{r})|_{r=r_c} \quad (22-4)$$

#### ۴-۴ مقاومت دیفرانسیلی منفی<sup>۱</sup> (NDR)

اولین بار ایساکي<sup>۲</sup>، در سال ۱۹۵۸ میلادی رسانش دیفرانسیلی را در یک پیوندگاه p-n که به طور مستقیم بایاس شده بود گزارش کرد [۱۱۱]. شکل (۴-۱) منحنی جریان-ولتاژ یک دیود تونل زنی را نشان می‌دهد. در بایاس معکوس جریان به طور مستقیم افزایش می‌یابد. در حالیکه در بایاس مستقیم جریان ابتدا در ولتاژ  $V_p$  تا مقدار قله (حداکثر)  $I_p$  افزایش و در ولتاژ  $V_v$  تا مقدار دره (حداقل)  $I_v$  کاهش



می‌یابد.

شکل ۴-۱: مشخصه جریان-ولتاژ دیود تونل زنی

اگر در ناحیه بین ولتاژ قله و دره جریان، هدایت دیفرانسیلی  $\frac{dI}{dV}$  بدست بیاید. مشاهده می‌شود که این مقدار منفی است. عدد مزیت یک دیود تونلی که به صورت  $\frac{I_P}{I_V}$  تعریف می‌شود، نسبت جریان قله به دره است. که بالا بودن این مقدار نشانه کیفیت بالای سوئیچ الکترونی است. این پدیده منجر به طراحی سوئیچ‌های الکترونیکی پرسرعت، با قابلیت قطع و وصل کردن جریان شده است [۱۱۲]. با بررسی منشاء مقاومت دیفرانسیلی منفی می‌توان قطعات دیگری که دارای این ویژگی‌ها باشند را طراحی نمود. در اینجا، یک مدل سازگار را برای توضیح منشاء NDR در جفت شدگی قوی فلز-مولکول ارائه می‌دهیم. بهترین توجیه برای منشا NDR که یافت شد چنین بیان می‌نمود که با اعمال

<sup>1</sup> Negative different resistance

<sup>2</sup> Esaki

ولتاژهای بالا، جفت شدگی مولکول به الکترودها غیرمتقارن می‌شود که این به دلیل عدم تقارن بین سطوح انرژی بالاترین اوربیتال‌های اشغالی مولکولی (HOMO) و پایین‌ترین اوربیتال مولکولی خالی (LUMO) است. به عبارتی اعمال ولتاژ بالا باعث ظهور یک پتانسیل غیر متقارن در الکترودها و مولکول می‌شود و در نتیجه موجب جایگزینی HOMO و LUMO در قسمت‌های مختلف سیستم می‌شود که می‌تواند باعث کاهش همپوشانی اوربیتالی و نهایتاً کاهش ضریب عبور شود. ما دریافتیم که یک فاز جدید در تابع موج مولکول، که بدلیل همپوشانی اوربیتال‌های پر و خالی، تقارن آن شکسته شده، بوجود می‌آید که با افزایش ولتاژ منجر به یک تغییر غیرخطی در جفت شدگی بین مولکول و الکترودها می‌شود و این منجر به مشاهده پدیده NDR می‌گردد [۱۱۳].

#### ۴-۵ فرمالیسم لاندائور- بوتیکر<sup>۱</sup>

فرمول بندی کوانتومی رسانش الکترونی در یک بعد برای اولین بار در سال ۱۹۵۵ میلادی توسط لاندائور<sup>۲</sup> مطرح شد [۱۱۴]، ایده لاندائور توسط فیشر<sup>۳</sup> و لی<sup>۴</sup>، به رساناهای سه بعدی با چند ترمینال رسانش گسترش یافت [۱۱۵-۱۱۶]. بوتیکر<sup>۵</sup> و همکارانش در سال ۱۹۸۰ میلادی فرمول بندی لاندائور را برای چندین ترمینال رسانش تصحیح کردند [۱۱۷] و به این ترتیب فرمالیسم لاندائور- بوتیکر معروف شد [۱۱۶]. فرمول بندی لاندائور- بوتیکر بر پایه رهیافت پراکندگی کوانتوم مکانیکی قرار دارد و برای محاسبه رسانش الکتریکی قطعات کوچک مناسب است.

در این پژوهش مولکول تیوفن را بین دو الکترودها فلزی (طلا) قرار می‌دهیم، پس فرمول لاندائور- بوتیکر برای قطعه‌ای با دو الکترودها برای محاسبات ما لازم است و به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$g = \frac{2e}{\hbar} \sum_{i,f} |T_{i,f}|^2 \quad (۴-۲۳)$$

<sup>۱</sup> Landaur-buttiker Formalism

<sup>۲</sup> Landaur- Buttiker

<sup>۳</sup> Fisher

<sup>۴</sup> Lee

<sup>۵</sup> Buttiker



این رابطه بیان می‌کند که رسانش  $g = \frac{dI}{dV}$  به صورت مجموع دامنه‌های بهنجار شده ضریب  $T_{i,f}$

تعریف می‌شود که  $i, f$  به ترتیب مدهای ورودی به سیم و مدهای عبوری از سیم می‌باشند. ضریب ۲

در رابطه‌ی بالا به دلیل در نظر گرفتن حالت‌های اسپینی وارد شده است. اگر رسانا به الکترون‌های

نیمه نامحدود ایده‌آل متصل شود. آنگاه مدهای گفته شده در بالا، توسط توابع بلوخ توصیف می‌شوند.

این توابع در صورت استفاده از الکتروادهای فلزی به صورت موج تخت خواهند بود. هنگامی که ولتاژ

کوچکی اعمال شود، تنها الکترون‌هایی با انرژی نزدیک به انرژی فرمی ( $E_f$ ) در جریان مشارکت

می‌کنند. بنابراین ولتاژ  $V$  اعمالی برای اختلاف پتانسیل شیمیایی الکتروود چپ و الکتروود راست برابر

با:

$$V = \Delta\mu = \mu_L - \mu_R \quad (۲۴-۴)$$

فرمول بندی لاندائور-بوتیکر بر پایه یک تصویر تک ذره‌ای از الکترون قرار داد، یعنی الکترون‌ها غیر

برهمکنشی هستند، البته بر همکنش‌های الکترون-الکترون به صورت جزئی و از طریق رهیافت میدان

میانگین وارد محاسبات می‌شود. در این حالت دامنه عبور از حل معادله تک ذره‌ای زیر بدست می‌آید:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}(r) - E_f \right] \psi(r) = 0 \quad (۲۵-۴)$$

که در این معادله پتانسیل موثر نشان دهنده بر همکنش یک الکترون با تعدادی میدان میانگین

ناشی از الکترون‌های دیگر و همچنین هسته است و این انتخاب منحصر به فرد نیست.

در چارچوب فرمول لاندائور-بوتیکر، می توان مشخصه جریان-ولتاژ را با استفاده از رابطه زیر محاسبه کرد:

$$I(V) = \frac{2e^2}{\hbar} \sum_{i,f} \int_{\mu_L}^{\mu_R} dE [F_L(E) - F_R(E)] |T_{i,f}(E, V)|^2 \quad (۴-۲۶)$$

#### ۴-۶ مقدمه بر تابع گرین غیر تعادلی (NEGF)

امروزه محاسبات ساختار الکترونی یک ابزار مهم برای بررسی فیزیکی و شیمیایی مواد و مولکول های جدید هستند [۱۱۸]. یک عامل مهم برای موفقیت این تکنیک ها گسترش روش های اصول اولیه است بدون این که پارامترهای وابسته ی سیستمی را معرفی نماید، واقعیت بخشیدن به مدل سازی یک دامنه ی وسیعی از سیستم ها را ممکن می سازد. بیشتر روش ها در دو جنبه محدود می شوند: (۱) هندسه بسته به این که سیستم تناوبی باشد یا محدود و غیرتناوبی. (۲) سیستم الکترونی باید در حالت تعادلی باشد.

از لحاظ تئوری به منظور پرداختن به موقعیتی که سیستم در مقیاس اتمی / مولکولی در تماس با الکترودهای حجمی باشد، نیازمند روشی است که قادر باشد به صورت سیستم بی نهایت رفتار کند. در موردی که یک ولتاژ بایاس محدود به الکترودها اعمال شود، یک جریان از میان ناحیه ی بدست می آید، زیرا سیستم الکترونی در حالت تعادل گرمایی نیست و مدل باید توانایی این را داشته باشد که این موقعیت غیرتعادلی را تشریح کند. هدف کار حاضر گسترش اصول اولیه ی جدیدی در یک روش ساختار الکترونی غیرتعادلی برای شبیه سازی یک نانو ساختار جفت شده با الکترودهای خارجی در پتانسیل های شیمیایی متفاوت است (در اینجا جمله ی پتانسیل شیمیایی را با تراز فرمی معاوضه می کنیم). در این پژوهش، برای یافتن خواص ترابرد الکترونی حالت پایه در قطعات نانو از رهیافت تابع

<sup>1</sup> Non-equilibrium Green's Function

گرین غیر تعادلی (NEGF) استفاده شده است. این رهیافت حالت خارج از تعادل یک سیستم کوانتومی را توصیف می کند که شامل ناحیه ی پراکندگی می باشد که به مخازن الکترونی نیمه بینهایت، الکتروود متصل شده است. رهیافت تابع گرین غیر تعادلی محاسبه سه خاصیت اصلی سیستم های کوانتومی مکانیکی خارج از تعادل را امکان پذیر می کند:

(۱) محاسبه طیف حالت های مربوط به ناحیه پراکندگی برای هامیلتونی داده شده است.

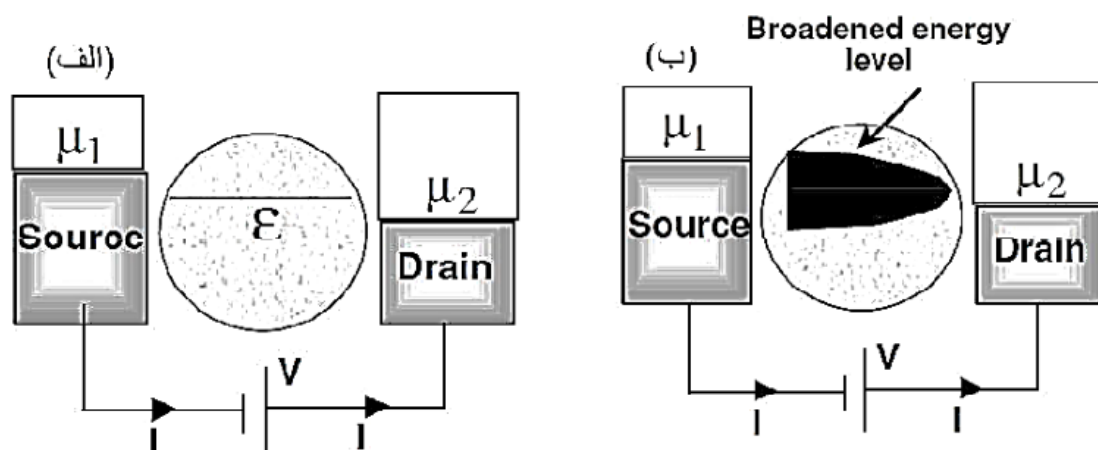
(۲) محاسبه اشغال این حالت ها در ناحیه پراکندگی وقتی که الکتروودها خارج از تعادل هستند.

(۳) محاسبه جریان عبوری به ازای پتانسیل های شیمیایی الکتروودها و چگالی بار ناحیه پراکندگی.

#### ۴-۶-۱ مدل ساده برای ترابرد غیر تعادلی

بررسی ترابرد را با یک مدل ساده تک تراز که توسط داتا<sup>۱</sup> [۱۱۹] ارائه شده است، شروع می کنیم.

دو پراب جریان/ولتاژ با پتانسیل شیمیایی  $\mu_1$  و  $\mu_2$  در نظر بگیرید که از طریق یک اتم با یک تراز انرژی  $\epsilon$  به هم اتصال دارند (شکل ۴-۲ الف). وقتی  $\mu_1 = \mu_2$ ، الکتروودها و اتم هر سه در تعادل هستند.



شکل ۴-۲: الف) شکل طرحوار دو پراب جریان/ولتاژ که از طریق یک سیستم تک تراز انرژی  $\epsilon$  به هم متصل شده اند

ب) تراز انرژی  $\epsilon$  در اثر جفت شدگی با الکتروودها طبق اصل عدم قطعیت به اندازه  $\gamma$  پهن می شود [۱۱۹].

<sup>1</sup> Datta

اما چنانچه  $\mu_1 \neq \mu_2$  بسته به اینکه تراز انرژی اتم با کدام الکترون در تعادل باشد، عدد اشغال با توابع فرمی دیراک زیر داده می‌شود:

$$f_1(\varepsilon) = \frac{1}{1+e^{(\varepsilon-\mu_1)/k_B T}} \quad (۲۷-۴)$$

$$f_2(\varepsilon) = \frac{1}{1+e^{(\varepsilon-\mu_2)/k_B T}} \quad (۲۸-۴)$$

الکترون اول، الکترون‌ها را به سمت تراز انرژی اتم پمپ می‌کند تا تراز اتمی با انرژی فرمی الکترون اول برابر شود و عدد اشغال تراز با  $f_1(\varepsilon)$  باشد. از طرف دیگر الکترون دوم، الکترون‌ها را به سمت خود می‌کشد تا تراز با الکترون دوم در تعادل باشد و عدد اشغال آن با تابع توزیع  $f_2(\varepsilon)$  برابر شود. این حالت یک حالت غیرتعادلی می‌باشد که میانگین تعداد الکترون‌ها  $N$  در حالت پایا مقداری است بین  $f_1$  و  $f_2$ . تفاوت عدد اشغال در حالت تعادلی و غیرتعادلی منجر به ایجاد جریان می‌شود. شار خالص  $I_1$  بین الکترون سمت چپ و ناحیه پراکندگی با اختلاف اعداد اشغال در حالت تعادلی و غیرتعادلی برابر با:

$$I_1 = e \frac{\gamma_1}{\hbar} (f_1 - N) \quad (۲۹-۴)$$

به همین ترتیب شار  $I_2$  بین اتصال سمت راست و اتم برابر است با:

$$I_2 = e \frac{\gamma_2}{\hbar} (f_2 - N) \quad (۳۰-۴)$$

که  $\frac{\gamma_2}{\hbar} \frac{\gamma_1}{\hbar}$  آهنگ ترابرد الکترون بین الکترون سمت چپ (سمت راست) و تراز انرژی  $\varepsilon$  است. در حالت پایا، شاری به تراز انرژی  $\varepsilon$  وارد یا از آن خارج نمی‌شود در نتیجه از معادلات (۲۹-۴) و (۳۰-۴) داریم:

$$N = \frac{\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (۳۱-۴)$$

با قرار دادن رابطه (۳۱-۴) در معادلات (۲۹-۴) و (۳۰-۴) جریان حالت پایا بدست می‌آید:

$$I = -I_1 = I_2 = \frac{e}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} (f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)) \quad (۳۲-۴)$$

این جریان به ازای هر اسپین است. چنانچه دو حالت اسپینی با انرژی یکسان داشته باشیم، جریان در

ضریب دو ضرب می‌شود. از رابطه بالا دیده می‌شود که به جز در دماهای خیلی بالا، تنها وقتی شارش جریان داریم که تراز انرژی  $\varepsilon$  با فاصله چند  $k_B T$  بین  $\mu_1$  و  $\mu_2$  قرار گیرد یعنی  $\mu_1 < \varepsilon < \mu_2$ ، در غیر این صورت اگر  $\mu_1 < \varepsilon$  و  $\mu_2 < \varepsilon$  آنگاه  $f_1 \sim f_2 \sim 0$  و چنانچه  $\mu_2 > \varepsilon$  و  $\mu_1 > \varepsilon$  آنگاه  $f_1 \sim f_2 \sim 1$ . بنابراین برای هدایت، حضور حالت‌هایی اطراف  $E = \mu$  ضروری است و تفاوتی ندارد که این حالت‌ها در هنگام تعادل قبل از اعمال ولتاژ بایاس، حالت‌های خالی هستند (نوع n) یا پر (نوع p). اگر حالت‌های خالی باشند الکترون‌ها توسط الکتروود منفی تزریق و سپس توسط الکتروود دیگر جمع می‌شوند. اگر حالت‌ها در ابتدا پر باشند، الکترون‌ها توسط الکتروود مثبت جمع می‌شوند و سپس توسط الکتروود منفی تزریق می‌شوند. مدلی که تا کنون ارائه شد اطلاعاتی راجع به اشغال تراز انرژی (معادله (۴-۳۱)) و جریان حالت پایا (معادله (۴-۳۲)) به ما می‌دهد. این روابط به ما کمک می‌کند که از یک روش خودسازگار برای پیدا کردن جریان و عدد اشغال شده استفاده کنیم.

در این مدل ساده تقریباً همه جنبه‌های مدل عمومی ترا برد بر پایه تابع گرین غیرتعادلی لحاظ شده است. برای کامل شدن تشابه، باید گستردگی تراز انرژی نیز در نظر گرفته شود. چون تراز انرژی  $\varepsilon$  با الکتروودها جفت شده است و آهنگ فرار الکترون از این ترازها  $\frac{\gamma_1}{\hbar}$  و  $\frac{\gamma_2}{\hbar}$  است، لذا زمان حیات الکترون روی این تراز محدود و برابر با  $\hbar/\gamma$  است که  $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ . بنابراین بر طبق اصل عدم قطعیت، تراز انرژی باید به اندازه  $\gamma$  گسترده باشد. به این ترتیب می‌توان چگالی حالت‌های انرژی (DOS) را به صورت تابع لورنتس حول  $E = \varepsilon$  مطابق رابطه زیر تعریف کرد:

$$D(E) = \frac{\gamma/2\pi}{(E-\varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (۳۳-۴)$$

به طوری که حاصل انتگرال گیری از  $D(E)$  روی بازه انرژی باید برابر با یک الکترون باشد. بنابراین عدد اشغال را بر حسب DOS به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \rho(E) \quad (۳۴-۴)$$

که چگالی بار الکترون در حالت پایا برابر است با:

$$\rho(E) = D(E) \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (35-4)$$

و جریان بر حسب DOS به شکل زیر در می‌آید:

$$I = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E) [f_1(E) - f_2(E)] \quad (36-4)$$

با

$$T(E) = D(E) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (37-4)$$

که  $T(E)$  برابر احتمال عبور است. معادله (36-4) همان معادله لاندور در نظریه پراکندگی است. برای مسائل چند پایانه‌ای مفید است که روابط (29-4) و (30-4) را بر حسب  $D(E)$  و  $\rho(E)$  بنویسیم. برای الکترون  $\alpha$ ،  $I_\alpha$  به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$I_\alpha = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE [\gamma_\alpha^{in} D(E) - \gamma_\alpha \rho(E)] \quad (38-4)$$

$$\text{که } \gamma_\alpha^{in} = \gamma_\alpha f_\alpha$$

در این معادلات جریان و عدد اشغال بر حسب چگالی بار الکترون و احتمال ترابرد نوشته شدند. می‌توان روابط قبل را بر حسب تابع گرین تک ذره‌ای زیر نوشت:

$$G_M(E) = \frac{1}{E - \varepsilon + i\gamma/2} \quad (39-4)$$

این امر کمک می‌کند تا بتوان مفاهیم معرفی شده را به مسائل با ساختار الکترونی پیچیده و روش‌های خود سازگار بسط داد. چگالی حالت‌ها DOS و چگالی بار را به صورت تابعی از  $G$  بازنویسی می‌کنیم:

$$D(E) = \frac{1}{2\pi} G_M(E) \gamma(E) G_M^*(E) = i[G_M(E) - G_M^\dagger(E)] \quad (40-4)$$

$$n(E) = \frac{1}{2\pi} G(E) \gamma^{in}(E) G^\dagger(E) \quad (41-4)$$

$$\text{که } \gamma^{in} = \gamma_1^{in} + \gamma_2^{in}$$

با جایگذاری روابط بالا در (37-4) جریان و ضریب ترابرد به صورت زیر در می‌آید:

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dET(E)[f_1(E) - f_2(E)] \quad (42-4)$$

$$T(E) = G(E)\gamma_1(E)G^*(E)\gamma_2(E) \quad (43-4)$$

تابع گرین غیرتعادلی (NEGF)<sup>۱</sup>، شامل تعمیم روابط تک ترازوی بالا برای ساختارهای الکترونی پیچیده می‌باشد.

#### ۴-۶-۲ روش نظری در کد TRANSIESTA

روش کار بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی است. همانطور که در بخش اول این فصل اشاره شد در این روش، اگر تابعی همبستگی-تبادلی دقیق در دسترس باشد چگالی الکترونی واقعی و انرژی کل بدست می‌آید، ولی این امر امکان پذیر نیست و تابعی همبستگی-تبادلی باید بوسیله‌ی یک تابعی تقریبی جایگزین شود. که در این پژوهش از تقریب شیب تعمیم یافته استفاده شده است.

برای محاسبه ترابرد تنها از چگالی الکترونی کل استفاده نمی‌شود، بلکه توابع موج کوهن-شم نیز به صورت موج تک ذره‌ای واجد شرایط، هنگامی که جریان الکترونی محاسبه می‌شود، استفاده خواهد شد. بنابراین فرض می‌کنیم که توابع همبستگی-تبادلی متداوالی که استفاده می‌شوند، قادرند تا موقعیت‌هایی را که الکترون‌ها در حالت غیرتعادلی هستند توصیف کنند و شار جریان را محاسبه نمایند. این رهیافت تک الکترونی قادر نیست که اثرات بس ذره‌ای عمیق را که ممکن است در برخی موارد در خلال فرآیندهای ترابرد ظاهر شوند را، توصیف کند. به‌عنوان مثال، پراکندگی‌های غیرالاستیک به وسیله فونون‌ها در نظر گرفته نمی‌شود. همانگونه که در مراجع ۱۲۰ و ۱۲۱ توضیح داده شده است، بسته‌ی محاسباتی SIESTA به وسیله‌ی محاسبه‌ی ماتریس چگالی<sup>۲</sup> و با استفاده از روش توابع گرین غیر تعادلی، به سیستم‌های غیرتعادلی بسط داده شده است. این کد ساختار الکترونی غیرتعادلی، به نام TRANSIESTA نامگذاری شد [۱۲۲].

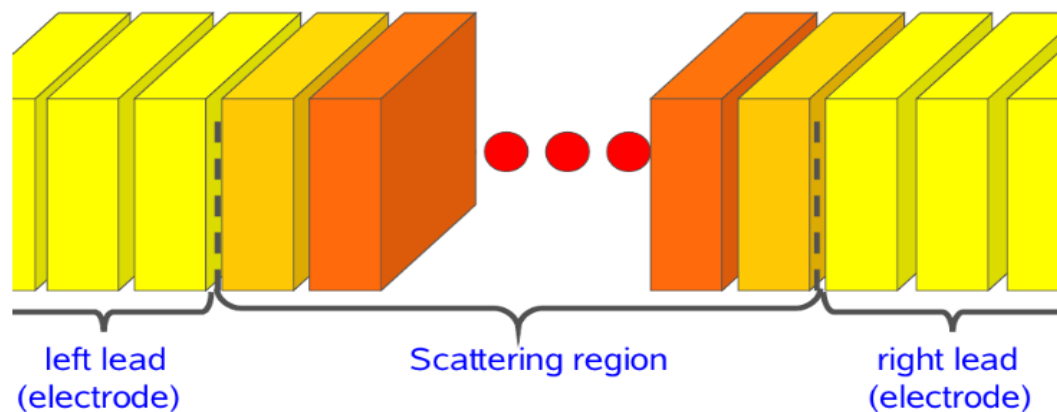
<sup>1</sup> Non-equilibrium Green's Function

<sup>2</sup> Density matrix

در ادامه فصل توضیح خواهیم داد که چگونه سیستم به دو قسمت "الکتروود" و "ناحیه تماس" تقسیم شده است و چگونه با استفاده توابع گرین، ماتریس چگالی حالت غیرتعادلی به دست آمده است.

#### ۳-۶-۴ برپایی سیستم

موقعیت طراحی شده در شکل (۳-۴) را در نظر می‌گیریم. دو الکتروود نیمه نامتناهی چپ و راست با ناحیه‌ی تماس<sup>۱</sup>، جفت می‌شوند. تمام عناصر ماتریس هامیلتونی یا انتگرال‌های همپوشانی<sup>۲</sup> بین اوربیتال‌های اتم‌ها در دو الکتروود چپ و راست صفر هستند به طوری‌که جفت‌شدگی بین الکتروودها تنها از طریق ناحیه‌ی تماس رخ می‌دهد. بنابراین ناحیه‌ی مورد نظر شامل سه قسمت: الکتروود چپ (L)، ناحیه تماس (C) و الکتروود راست (R) می‌باشد. فرض می‌شود اتم‌ها در L(R) بخشی از الکتروودهای حجمی نیمه نامتناهی چپ(راست) باشند که با اتم‌های ناحیه‌ی تماس برهمکنش دارند و همچنین فرض می‌شود که هامیلتونی و ماتریس چگالی به مقادیر حجمی در ناحیه‌ی R و L همگرا شود. بنابراین هامیلتونی، ماتریس چگالی و ماتریس همپوشانی تنها در بخش‌های C، C-L و C-R با مقادیر حجمی متفاوت است.



شکل ۳-۴: مدلی برای ترابرد الکترونی برای یک مولکول یا یک نانو سیم کوتاه [۱۲۳].

به منظور بدست آوردن خواص ترابردی فقط نیاز داریم قسمت متناهی L-C-R از سیستمی نامتناهی، که در شکل (۳-۴) نشان داده شده است را توصیف کنیم. ماتریس چگالی که توزیع

<sup>1</sup> Contact region

<sup>2</sup> Overlap integrals



الکترون‌ها را تشریح می‌کند، می‌تواند از یک سری ماتریس‌های تابع گرین سیستم‌های نامتناهی بدست آید. بنابراین تنها به قسمت متناهی L-C-R از ماتریس چگالی و ماتریس تابع گرین علاقه‌مند هستیم. که مقدار هامیلتونی کل برابر است با:

$$H = \begin{pmatrix} H_{LL} & H_{LC} & 0 \\ H_{LC}^\dagger & H_{CC} & H_{CR} \\ 0 & H_{CR}^\dagger & H_{RR} \end{pmatrix} \quad (44-4)$$

که  $H_{LL}$ ،  $H_{RR}$  و  $H_C$  به ترتیب ماتریس‌های هامیلتونی در ناحیه‌های L، R و C هستند و  $H_{LC}$  ( $H_{CR}$ ) بر همکنش بین ناحیه‌های L(R) و C است. جفت شدگی L و R برای قسمت باقیمانده‌ی الکترودهای نیمه نامتناهی، تماما به وسیله‌ی خود انرژی‌های  $\Sigma_L$  و  $\Sigma_R$  برشمرده می‌شود. توصیف توابع گرین در فیزیک حالت جامد در مراجع [۱۲۴-۱۲۶] یافت می‌شود. در اینجا ما خواص عمومی توابع گرین مربوط به رهیافت NEGF را ارائه می‌دهیم. فرض می‌کنیم سیستم به وسیله هامیلتونی تک ذره‌ای H توصیف می‌شود.

$$H\psi_i = E\psi_i \quad (45-4)$$

که  $\psi_i$  بردار N بعدی تابع موج تک ذره‌ای با ویژه مقدار E است و S ماتریس همپوشانی می‌باشد. چون H و S هرمیتی هستند، E حقیقی می‌باشد. که با توابع گرین به صورت زیر رابطه دارد:

$$(ES - H)G = I \quad (46-4)$$

که I بردار یکه هست معادله تابع گرین به واسطه هامیلتونی کل به صورت زیر بدست می‌آوریم:

$$\begin{pmatrix} ES_{LL} - H_{LL} & ES_{LC} - H_{LC} & 0 \\ (ES_{LL} - H_{LL})^\dagger & ES_{CC} - H_{CC} & ES_{CR} - H_{CR} \\ 0 & (ES_{CR} - H_{CR})^\dagger & ES_{RR} - H_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{LL} & G_{LC} & G_{LR} \\ G_{CL} & G_{CC} & G_{CR} \\ G_{RL} & G_{RC} & G_{RR} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{LL} & 0 & 0 \\ 0 & I_{CC} & 0 \\ 0 & 0 & I_{RR} \end{pmatrix} \quad (47-4)$$

با حل معادله (۴۵-۴) به نتایج زیر می‌رسیم:

$$[(ES_{CC} - H_{CC}) - (ES_{LC} - H_{LC})^\dagger (ES_{LL} - H_{LL})^{-1} (ES_{LC} - H_{LC}) \quad (48-4)$$

$$- (ES_{CR} - H_{CR})^\dagger (ES_{RR} - H_{RR})^{-1} (ES_{CR} - H_{CR})] G_{CC} = I_{CC}$$

$$(ES_{LL} - H_{LL})^{-1} = G_{LL} \quad (49-4)$$

$$(ES_{RR} - H_{RR})^{-1} = G_{RR} \quad (50-4)$$

با قرار دادن معادلات (۴۹-۴) و (۵۰-۴) در معادله (۴۸-۴) خواهیم داشت:

$$[(ES_{CC} - H_{CC}) - (ES_{LC} - H_{LC})^\dagger G_{LL} (ES_{LC} - H_{LC}) - (ES_{CR} - H_{CR})^\dagger G_{RR} (ES_{CR} - H_{CR})] G_{CC} = I_{CC} \quad (۵۱-۴)$$

که از معادله (۵۱-۴) خود انرژی‌های چپ و راست به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\Sigma_L = (ES_{LC} - H_{LC})^\dagger G_{LL} (ES_{LC} - H_{LC}) \quad (۵۲-۴)$$

$$\Sigma_R = (ES_{CR} - H_{CR})^\dagger G_{RR} (ES_{CR} - H_{CR}) \quad (۵۳-۴)$$

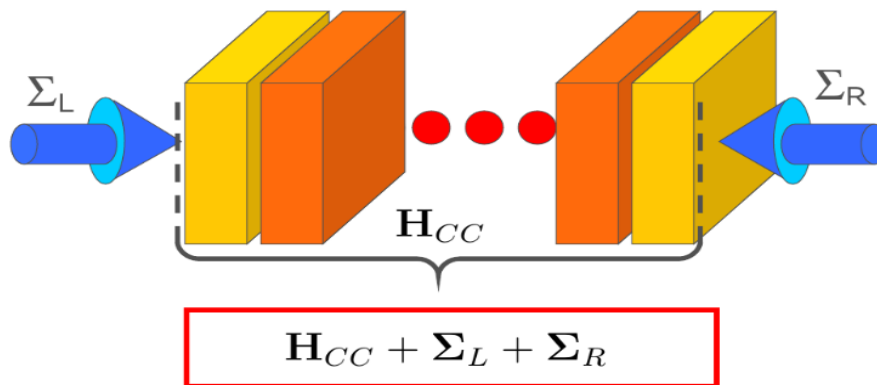
خود انرژی‌های چپ و راست ماتریس‌های غیرهرمیتی هستند، و در شکل (۴-۴) نشان داده است. با

استفاده از معادلات (۵۲-۴) و (۵۳-۴) در معادله (۵۱-۴) خواهیم داشت:

$$[(ES_{CC} - H_{CC}) - \Sigma_L - \Sigma_R] G_{CC} = I_{CC} \quad (۵۴-۴)$$

که تابع گرین در ناحیه پراکندگی به صورت زیر نشان داده می‌شود:

$$G_{CC} = \{ES_{CC} - [H_{CC} + \Sigma_L + \Sigma_R]\}^{-1} \quad (۵۵-۴)$$



شکل ۴-۴: طرح واره‌ای از خود انرژی‌های به جای الکترودهای نامتناهی در ترابرد الکترونی در یک مولکول [۱۲۳].

#### ۴-۶-۴ محاسبه جریان

هرگاه یک سیم مولکولی بین دو الکتروده فلزی نامتناهی قرار گیرد، اعمال یک ولتاژ خارجی به

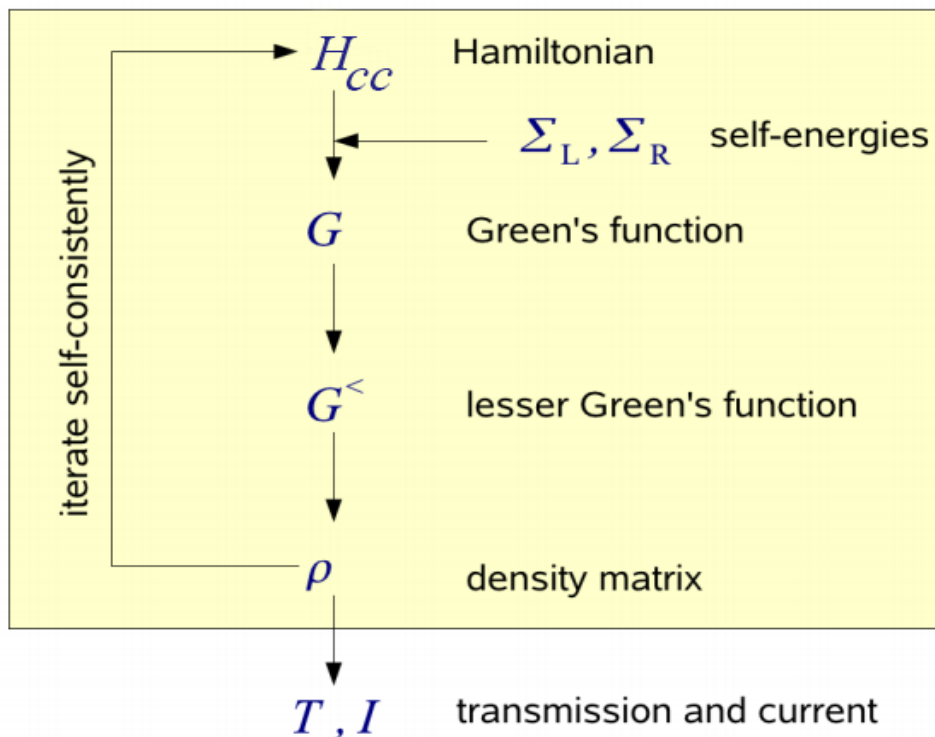
الکترودها باعث می‌شود، پتانسیل الکتروشیمیایی دو الکتروده چپ (راست) نسبت به هم متفاوت

می‌شوند و سیستم دیگر در حالت تعادل نباشد و منجر به جریان غیرصفر، می‌شود. برای بدست آوردن مقدار جریان ناحیه‌ی پراکندگی از روش خودسازگار استفاده می‌کنیم که شکل شماتیک این روش را در شکل (۵-۴) نشان داده شده است. تحت ولتاژ غیرصفر، ماتریس چگالی غیرتعادلی به صورت زیر است:

$$\rho = \frac{1}{2\pi i} \int dE [G_{CC} \Gamma_L G_{CC}^\dagger f(E - \mu_L) + G_{CC} \Gamma_R G_{CC}^\dagger f(E - \mu_R)] \quad (56-4)$$

که  $\Gamma_{L(R)}$  نمایشگر اتصال بین الکترودها و ناحیه‌ی پراکندگی است و معرفی کننده میزان پهن‌شدگی تراز مولکولی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Gamma_{L(R)} = i(\Sigma_{L(R)} - \Sigma_{L(R)}^\dagger) \quad (57-4)$$



شکل ۵-۴: طرح شماتیک روش خودسازگار برای مدل NEGF+DFT [۱۲۳]

علاوه بر این تابع گرین کوچکتر برابر است با:

$$G^< = iG_{CC} [f(E - \mu_L) \Sigma_L + f(E - \mu_R) \Sigma_R] G_{CC}^\dagger \quad (58-4)$$

که  $F$  تابع توزیع فرمی-دیراک می‌باشد و با استفاده از معادله (۵۸-۴) در معادله (۵۶-۴)، داریم:

$$\rho = \frac{1}{2\pi i} \int dE iG^< \quad (۵۹-۴)$$

از مقایسه ماتریس چگالی با مدل DFT، یک چگالی حالت پایه تولید می‌شود که منجر به محاسبه هامیلتونی  $H_{CC}$  می‌شود. سپس جریان را می‌توان از طریق رابطه زیر بدست می‌آید:

$$I = \frac{e}{h} \int dE T(E) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] \approx \frac{e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE T(E) \quad (۶۰-۴)$$

در این معادله  $T(E)$  نشان دهنده، احتمال عبور الکترون تزریق شده با انرژی  $E$  می‌باشد. تابع ترابردی می‌توانند از تابع گرین ناحیه‌ی پراکندگی محاسبه می‌شود. تحت ولتاژ غیر صفر، چگالی و جریان برابر است با:

$$\rho^\sigma = \frac{1}{2\pi} \int dE [G_{CC} \sum_L f(E, \mu_L) G_{CC}^\dagger + G_{CC} \sum_R f(E, \mu_R) G_{CC}^\dagger]_{ij}^\sigma \quad (۶۱-۴)$$

$$I^\sigma = \frac{e}{h} \int dE [Tr(\sum_L G_{CC} \sum_R G_{CC}^\dagger)(f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R))]^\sigma \quad (۶۲-۴)$$

که در معادله بالا  $\mu_L = E_f + \frac{eV}{2}$  و  $\mu_R = E_f - \frac{eV}{2}$  است،  $E_f$  انرژی فرمی الکترون و  $V$ ، ولتاژ اعمالی می‌باشد.

# فصل پنجم

بررسی خواص الکترونی و تراپردی

الیگومرهای تیوفن در اتصال با الکتروود طلا

**Au/OligoThiophene/Au**

## ۵-۱ مقدمه

مولکول‌های خانواده تیوفن  $C_{4n}H_{4n}S_n$  همان‌طور که در فصل سوم معرفی شدند، دسته مهمی از پلیمرهای رسانا هستند که به سبب پایداری بالا، کاربرد آن‌ها در زمینه‌های مختلفی نظیر الکترودها، هادی و نیمه هادی آلی گسترش پیدا کرده است. همچنین از پلی‌تیوفن و الیگوتیوفن‌ها در تهیه دستگاه‌های ذخیره‌سازی انرژی مانند خازن‌ها و باترهای قابل شارژ استفاده می‌شود. علاوه بر این از خواص جالب نوری آن‌ها در تهیه دیودهای نشر نوری (LED)، سلول‌های خورشیدی، پنجره‌های تزئینی و هوشمند و از خواص مغناطیسی آن‌ها در تهیه سپرهای محافظ در مقابل میدان‌های مغناطیس، محافظ در مقابل خوردگی، حسگر گازها، ذخیره سازی اطلاعات، ترانزیستورها، اسپینترونیک، چاپگرهای جوهرافشان، چسب رسانا و غیره استفاده می‌گردد. با توجه به موارد ذکر شده بالا، در این فصل به بررسی خواص الکترونی (ساختار نواری و چگالی حالت‌های جزیی و کلی) الیگوتیوفن‌ها و خواص ترابرد الکترونی این دسته مولکول‌ها که بین دو الکتروود غیر مغناطیسی طلا قرار می‌گیرد، می‌پردازیم.

## ۵-۲ روش محاسبه

محاسبات ما در چارچوب نظریه‌ی تابع چگالی، با کد محاسباتی SIESTA [۱۲۷] که بر پایه‌ی بسط تابع موج بر حسب ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی و تقریب شبه پتانسیل استوار است، انجام گرفته است. برای تابع همبستگی - تبادلی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) [۱۲۸] پردو، برک، انزروهوف (PBE) استفاده کرده‌ایم [۱۲۹]. خواص ترابرد را با استفاده از تابع گرین غیر تعادلی [۱۳۰] و فرمول بندی لانداور - بوتیکر محاسبه می‌شود، در کد محاسباتی SIESTA از هامیلتونی کوهن شم استفاده می‌شود، و همچنین از نرم افزار کوانتومی Virtual Nano Lab برای ساختن، ساختارهای مولکولی الیگوتیوفن‌ها، استفاده کرده‌ایم [۱۳۱].

## ۳-۵ بهینه‌سازی پارامترها

ابتدا قبل از ورود به بحث در مورد محاسبات انجام شده و نتایج، به معرفی تعدادی از پارامترها که به منظور افزایش دقت، کاهش در امر محاسبات و افزایش سرعت همگرایی، می‌بایست آن پارامترها را بهینه کرد، می‌پردازیم. این پارامترها شامل انرژی قطع<sup>۱</sup> و بردار شبکه‌بندی (که تعداد نقاط در فضای وارون را مشخص می‌کند) می‌باشند که در این جا مختصر توضیحی می‌دهیم.

### ۳-۵-۱ انرژی قطع

انرژی قطع به دو صورت می‌باشد: (۱) به منظور محدود کردن بسط جملات امواج تخت در کدهای محاسباتی نظیر VASP و Quantum ESPRESSO توابع موج تک ذره‌ای کوهن شم بر حسب امواج پایه تخت بسط داده می‌شوند. به دلیل اینکه جملات بسط برای امواج تخت با انرژی بالا  $(\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2)$  به تدریج کاهش می‌یابند، می‌توان این جملات موج تخت را به ازای بردار موج‌هایی که انرژی آن‌ها از یک مقدار حدی که اصطلاحاً انرژی قطع نامیده می‌شود بیشتر شود، صفر در نظر گرفت و تنها جملاتی را نگه داشت که انرژی جنبشی آن‌ها طبق رابطه‌ی (۳-۵) از انرژی قطع پایین‌تر است. با این کار تعداد توابع پایه‌ی تخت در بسط محدود می‌شود، و حجم محاسبات کاهش می‌یابد.

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{K} + \vec{G}|^2 \leq E_{cut} \quad (۳-۱)$$

۲- برای محاسبه‌ی بسیاری از کمیت‌های فیزیکی مانند چگالی بار، پتانسیل و انرژی در ساختارهای متناوب و دوره‌ای، همچنین تبدیل فوریه‌ی کمیت‌های فیزیکی از فضای وارون به حقیقی، و بلعکس نیاز به محاسبه‌ی انتگرال‌گیری‌هایی در این فضاها می‌باشیم. به منظور محاسبه‌ی این انتگرال‌ها، ما این فضاها را شبکه‌بندی می‌کنیم. در فضای حقیقی اگر فاصله‌ی بین این نقاط در فضای شبکه‌بندی شده را با  $\Delta x$  نمایش دهیم، رابطه آن با انرژی قطع به صورت زیر است:

<sup>۱</sup> Cutoff energy

$$k_c = \frac{\pi}{\Delta x} \longrightarrow E_{cut} = \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_e} \longrightarrow \text{if } m, \hbar = 1 \longrightarrow \Delta x = \frac{\pi}{\sqrt{2 E_{cut}}} \quad (2-5)$$

که در آن  $k_c$  بردار موج تخت قطع و  $E_{cut}$  انرژی قطع می‌باشد. هرچه مقدار انرژی قطع بیشتر شود، در شبکه‌ی حقیقی فاصله‌ی نقاط کمتر، و تعداد آن‌ها بیشتر می‌شود. در نتیجه تعداد بیشتری از آن‌ها در انتگرال‌گیری مشارکت می‌کنند و این باعث افزایش دقت انتگرال‌گیری در شبکه‌ی حقیقی می‌شود. کد SIESTA به دلیل اینکه بر اساس بسط تابع موج بر حسب اوربیتال‌های اتمی می‌باشد، انرژی قطع تعریف شده برای آن، مورد دوم می‌باشد.

### ۵-۳-۲ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط $K$ در فضای وارون

در یک جامد تناوبی نامحدود، تعداد اتم‌ها و در نتیجه تعداد الکترون‌ها بسیار زیاد است. از آنجا که توابع موج تک ذره‌ای روی همه‌ی جامد گسترده‌اند، باید برای محاسبه‌ی کمیت‌هایی مثل چگالی بار  $n(\vec{r})$  در نقطه‌ی  $\vec{r}$ ، تعداد زیادی توابع موج که به صورت محدود در فضا گسترده شده‌اند، محاسبه شوند. با استفاده از قضیه‌ی بلوخ معادله (۵-۳)، می‌توانیم مساله‌ی محاسبه  $N_e \sim 10^{23}$  تعداد تابع موج تک ذره‌ای  $\psi_i(\vec{r})$  را به مساله‌ی  $\psi_{nk}(\vec{r})$  در منطقه اول بریلوئن و به ازای تعداد محدودی نوار کاهش دهیم.

$$\psi_n(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}) = \psi_n(\vec{k}, \vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (3-5)$$

از آنجا که توابع موج مربوط به نقاط  $\vec{k}$  که نزدیک هم هستند بسیار مشابه‌اند، می‌توان انتگرال‌گیری (که در بخش انرژی قطع توضیح داده شد) روی همه‌ی نقاط  $k$  را با جمع روی مجموعه‌ی ناپیوسته‌ای از نقاط  $k$  تقریب زد. اگرچه اصولاً باید توابع موج به ازای تمام نقاط  $k$  در منطقه‌ی اول بریلوئن را بدانیم، اما در عمل کافی است توابع موج در تعداد محدودی از این نقاط را داشته باشیم. برای انتگرال‌گیری روی این نقاط، باید فضای وارون را شبکه‌بندی کنیم. روشی که در کد SIESTA از



آن بهره می‌بریم روش منخارست پک<sup>۱</sup> می‌باشد [۱۳۲]. شبکه‌بندی در راستاهای آزادی و دوره‌ای ساختار انجام می‌پذیرد که در حالت کلی به صورت  $N \times M \times K$  می‌باشد. این پارامترها اعداد صحیح ( $N, M, K \neq 0$ ) به منظور شبکه‌بندی فضای وارون در راستاهای مختلف می‌باشند.

برای سیستم‌هایی با سه درجه‌ی آزادی مثل سیستم‌های کپه‌ای که بردارهای شبکه‌ی یکسان ( $\vec{a} = \vec{b} = \vec{c}$ ) دارند به صورت  $(N \times N \times N)$ ، برای شبکه‌های دوبعدی مثل گرافن‌ها با دو درجه آزادی در راستای  $\vec{a}, \vec{b}$  و درجه محدودیت در راستای  $\vec{c}$  به صورت  $(N \times N \times 1)$ ، برای ساختارهای یک بعدی و شبه یک بعدی همانند نانولوله‌ها، نانو سیپ‌ها و نانو ریبون‌ها با درجه آزادی در راستای  $\vec{c}$  به صورت  $(1 \times 1 \times N)$  و برای ساختارهایی با سه درجه‌ی محدودیت در سه راستای  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  همانند ملکول‌ها به صورت  $1 \times 1 \times 1$  انجام می‌پذیرد که این نقطه  $\Gamma$  در منطقه بریلوئن می‌باشد. هرچه سلول و ساختار مورد بررسی ما ابعاد بزرگتری در فضای حقیقی داشته باشد، فضای وارون آن (منطقه بریلوئن) متناسباً ابعاد کوچکتری خواهد داشت و بالعکس. بنابراین هرچه فضای وارون کوچکتر شود به تعداد مش‌بندی و نقاط  $k$  کمتری در منطقه بریلوئن نیازمندیم.

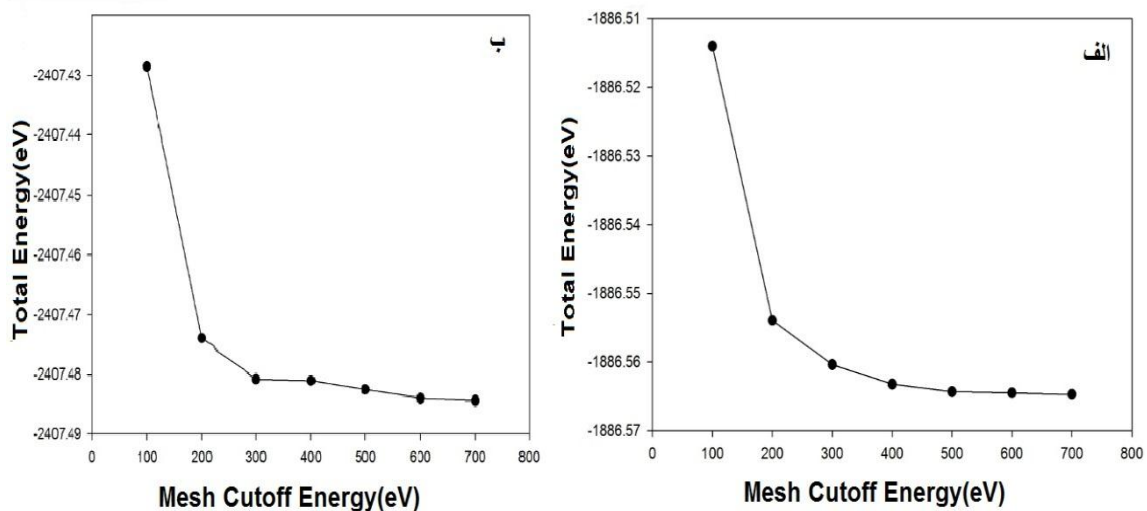
#### ۴-۵ تعیین پارامترهای ورودی الیگومرهای تیوفن خالص و متصل به اتم سولفور

##### ۱-۴-۵ انرژی قطع

با توجه به آنچه که در بخش ۱-۳-۵ اشاره شد، یکی از پارامترهای ورودی که انتخاب درست آن باعث افزایش سرعت همگرایی و کاهش خطا در امر محاسبات می‌شود، تعیین میزان انرژی قطع مناسب می‌باشد. با توجه به کثرت ساختارهای مورد توجه، بررسی مقدار بهینه شده‌ی این پارامتر به ازای هر ساختار امکان پذیر نبود. لذا با توجه به بررسی دوگروه الیگومرهای تیوفن از مونوتیوفن ( $n=1$ ) الی دکاتیوفن ( $n=10$ )، پارامتر انرژی قطع مناسب به ازای الیگو دی تیوفن ( $n=2$ ) به ازای

<sup>1</sup> Monkhorst-pack

الیگوتیوفن‌های خالص و الیگوتیوفن‌های متصل به اتم سولفور را تعیین، و برای تمام محاسبات دیگر از آن بهره برده شد. برای بدست آوردن مقدار بهینه و مناسب این پارامتر، تمام پارامترها به غیر از انرژی قطع، در فایل ورودی دقیق و بالا انتخاب شد تا اطمینان حاصل شود که آن پارامترها خود باعث بروز خطا نگردند، سپس انرژی قطع را در هر مرحله تغییر داده، و انرژی کل به ازای انرژی قطع‌های متفاوت بررسی شد. نتیجه به ازای دو گروه، در جدول و شکل (۵-۱) گزارش شده است.



شکل ۵-۲: نمودار انرژی قطع بر حسب انرژی کل. الف) الیگو دی تیوفن خالص ب) الیگو دی تیوفن متصل به اتم سولفور

جدول ۵-۳: انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای دو گروه الیگو دی تیوفن خالص و متصل به اتم سولفور

انرژی قطع (Ry)	۱۰۰	۲۰۰	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	۶۰۰	۷۰۰
انرژی کل (eV) الیگو n=۲	-۱۸۸۶/۵۱۴۰	-۱۸۸۶/۵۵۳۹	-۱۸۸۶/۵۶۰۳	-۱۸۸۶/۵۶۳۲	-۱۸۸۶/۵۶۴۲	-۱۸۸۶/۵۶۴۴	-۱۸۸۶/۵۶۴۶
انرژی کل (eV) الیگو n=۲ با اتم سولفور	-۲۴۰۷/۴۲۸۵	-۲۴۰۷/۴۷۴۱	-۲۴۰۷/۴۸۰۸	-۲۴۰۷/۴۸۱۰	-۲۴۰۷/۴۸۲۵	-۲۴۰۷/۴۸۴۰	-۲۴۰۷/۴۸۴۳

با توجه به جدول و نمودار (۵-۱)، تغییرات انرژی کل بر حسب انرژی قطع به ازای هر الیگو خالص، از Ry ۵۰۰ به بعد روند یکنواختی داشته و تغییرات زیاد انرژی اتفاق نمی‌افتد، لذا این مقدار برای انرژی قطع در تمام روند محاسبات به‌عنوان پارامتر بهینه انتخاب گردید و برای الیگو متصل به

اتم سولفور، از  $600 \text{ Ry}$  به بعد روند یکنواختی داشته و تغییرات زیاد انرژی اتفاق نمی‌افتد، لذا این مقدار برای انرژی قطع در تمام روند محاسبات به‌عنوان پارامتر بهینه انتخاب گردید.

### ۲-۴-۵ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط $K$ در فضای وارون

پارامتر دیگری که بعد از انرژی قطع می‌بایست به جهت سرعت همگرایی و دقت نتایج، بهینه شود تعداد نقاط و بردار مش‌بندی در فضای وارون  $k$  می‌باشد. همان‌طور که در بخش ۲-۳-۵ توضیح داده شد این مش‌بندی در کد محاسباتی SIESTA توسط روش منخارست‌پک و در راستای آزادی و دوره‌ای ساختار انجام می‌گیرد و با بزرگتر شدن ساختار در فضای حقیقی، به دلیل کوچکتر شدن فضای وارون به تعداد مش‌بندی و نقاط کمتری در این فضا نیاز است. از آنجا که ساختار مورد نظر مولکولی می‌باشد، ساختارهایی مولکولی که با سه درجه‌ی محدودیت در سه راستای  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  همراه هستند، به صورت  $1 \times 1 \times 1$  انجام می‌پذیرد باز با توجه به اینکه ساختارهای مورد بررسی زیاد بودند، امکان بهینه کردن این پارامتر برای تمام ساختارها نبود.

### ۳-۴-۵ مجموعه پایه‌ها

یکی دیگر از کمیت‌هایی که به افزایش دقت محاسبات کمک می‌کند انتخاب یک پایه‌ی مناسب به ازای اوربیتال‌های اتم‌های تشکیل دهنده‌ی ساختار مورد بررسی می‌باشد. همان‌طور که در فصل سوم با جزئیات بیشتر بیان شد، کد محاسباتی SIESTA توابع موج تک ذره‌ای کوهن-شم را بر حسب ترکیب خطی از پایه‌های اوربیتال‌های اتمی بسط می‌دهد. که اوربیتال‌های اتمی را می‌توان به صورت حاصل ضرب تابع شعاعی در هماهنگ‌های کروی در نظر گرفت. دقت محاسبات وابسته به شکل و اندازه این پایه‌هاست. قسمت شعاعی توسط پارامتری به اسم  $r_c$  محدود می‌شود یعنی مقدار آن خارج از این شعاع صفر می‌شود. پایه‌های اتمی می‌توانند توسط تعدادی از پایه‌های چندگانه زتا  $\xi$  بسط داده شوند. هر اوربیتال زتا مربوط می‌شود به هماهنگ‌های کروی (وابسته به دو عدد کوانتومی

( $m$  و  $l$ ) مشترک با تابع شعاعی متفاوت، بدین صورت که زتای یگانه، دوگانه، سه گانه برای یک، دو و سه تابع شعاعی. این اوربیتال ها را می توان با شامل کردن اوربیتال های پایه ی قطبیده غنی تر کرد. در نظر گرفتن اوربیتال های قطبیده به منظور در نظر گرفتن تغییر شکلی است که به علت ایجاد پیوند رخ می دهد. حالت زتای دوگانه قطبیده (DZP) عموماً جوابی با کیفیت بالا با هزینه محاسباتی کم فراهم می کند. لذا در تمامی محاسبات از این پایه به ازای اوربیتال های اتمی، بهره برده شده است.

## ۵-۵ بهینه سازی ساختار

بعد از بهینه سازی پارامترهای مورد نیاز برای انجام محاسبات، اولین عملی که باید قبل از بررسی خواص الکترونی انجام بگیرد، بهینه سازی ساختار و موقعیت اتم ها می باشد. در این قسمت توسط رهیافت دینامیک مولکولی (MD) به مطالعه دینامیک یونی و نیروهای بین اتمی پرداخته می شود. روش های دینامیک مولکولی متفاوتی برای این امر وجود دارد، ولی در محاسبات از روش شیب همیوگ (CG)<sup>۱</sup> بهره برده شد که توسط آن موقعیت و جایگاه های اتمی دائماً تغییر می کنند و در وضعیت های متفاوت نیروی بین آنها توسط روش هلمن-فاینمن تا زمانی که انرژی کل ساختار و سیستم به ازای موقعیت اتم ها و یون ها، کمینه شود ادامه می یابد. دقت نیروی بین اتمی و بیشینه ی تغییرات آن، به عنوان پارامتر ورودی تعریف می شود. با بهینه کردن ساختار می توان به جایگاه های اتمی، ثابت های شبکه ی تعادلی و همچنین طول پیوندهای اتمی، به منظور بررسی خواص الکترونی دست یافت. در جدول ۲-۵ مهم ترین پارامترهای ورودی برای محاسبات الیگومرهای تیوفن آورده شده اند.

جدول ۴-۵: پارامترهای ورودی محاسبات، الیگوتیوفن ها

مجموعه پایه ها	همگرایی نیرو	روش دینامیک مولکولی (MD)	همگرایی چگالی بار	انرژی قطع	بردار شبکه بند دی فضای $k$	تابعی همبستگی-تبادلی	تقریب کد
۲ گانه قطبیده (DZP)	$\leq 0.005 \frac{eV}{\text{\AA}}$	شیب همیوگ (CG)	$10^{-5}$	۵۰۰ Ry	$1 \times 1 \times 1$	GGA(PBE)	شبه پتانسیل

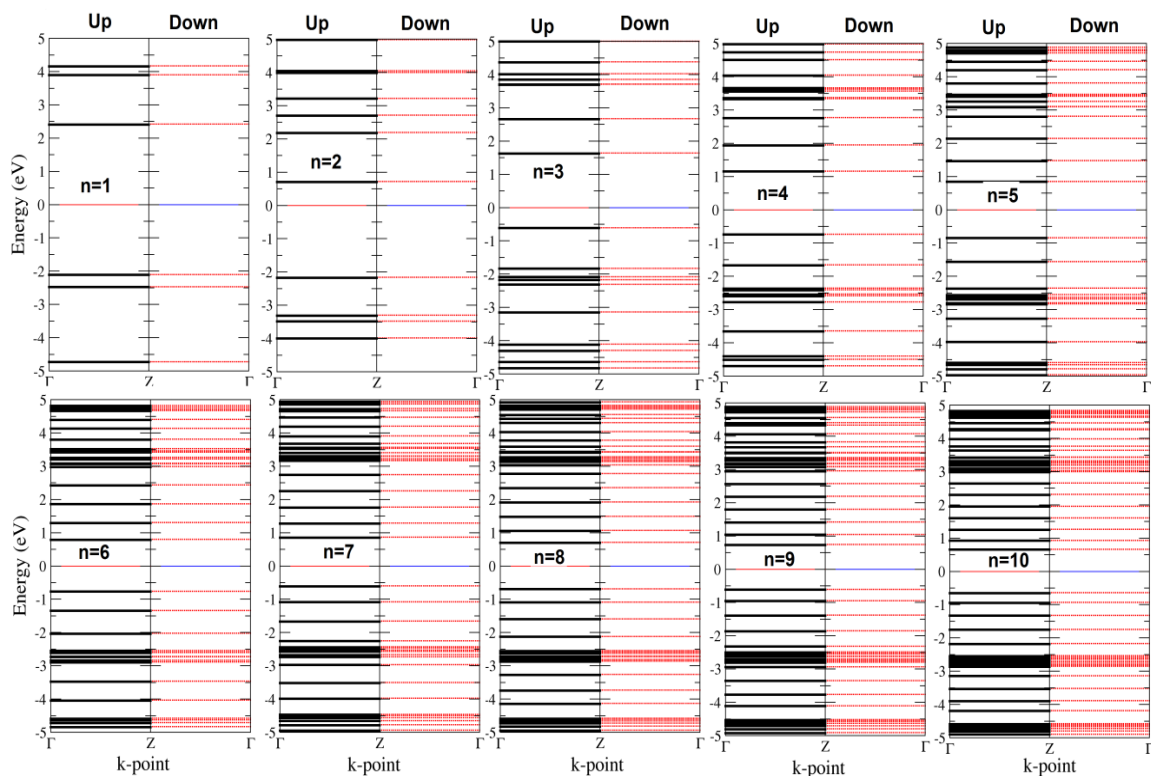
<sup>1</sup> Conjugate Gradients

## ۵-۶ بررسی خواص الکترونی الیگوتیوفن‌های خالص و متصل به اتم سولفور

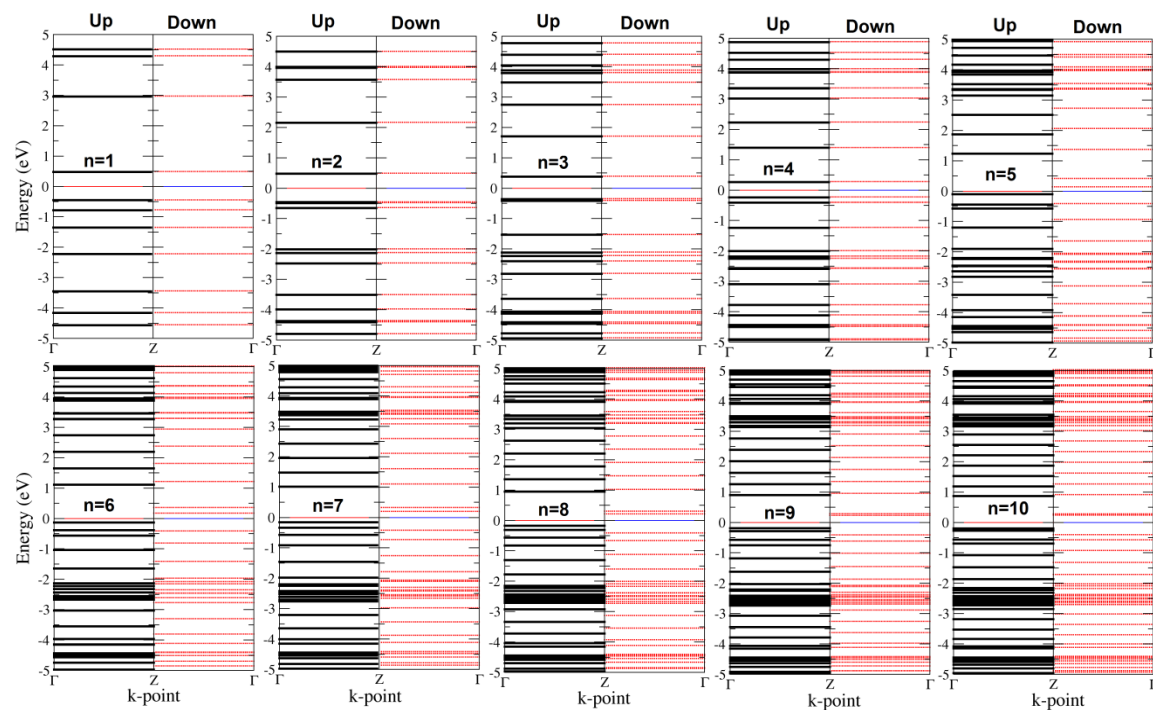
بعد از مرحله‌ی واهلش و بهینه‌سازی ساختارها، با قرار دادن پارامترهای ساختاری بهینه شده، از جمله موقعیت‌های اتمی و پارامترهای مربوط به ثابت‌های شبکه‌ی بهینه شده، به مطالعه‌ی خواص فیزیکی، همچون خاصیت الکترونی ساختارها می‌پردازیم. در این بخش به مطالعه‌ی ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی و جزئی پرداخته می‌شود.

## ۵-۶-۱ بررسی ساختار نواری

در این قسمت ساختار الکترونی  $n$ -تیوفن با طول‌های مختلف از ۱ تا ۱۰ حلقه برای خالص و متصل به سولفور، مورد بررسی قرار می‌گیرد. با بررسی ساختار نواری می‌توان از مقدار گاف نواری و روند تغییرات آن که بسیاری از خواص فیزیکی مربوط به آن‌ها می‌شوند، اطلاعاتی بدست آورد. برای محاسبه‌ی ساختار نواری ابتدا محاسبات خودسازگار انجام می‌شود تا انرژی فرمی بدست آید. نکته مهم بعد از انجام محاسبات خود سازگار، انتخاب مسیر مناسب انتگرال‌گیری در فضای وارون در ناحیه کاهش ناپذیر بریلوئن به منظور محاسبه‌ی نوارهای انرژی می‌باشد. این مسیر دارای بیشترین تقارن می‌باشد. ساختارهای نواری برای الیگوتیوفن‌های خالص در شکل (۵-۲) و الیگوتیوفن‌های متصل به اتم سولفور در شکل (۵-۳) رسم شده‌اند. در تمام نمودارهای ساختار نواری، سطح انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی می‌باشد که با خط افقی مستقیم نشان داده شده است. شکل‌های (۵-۲) و (۵-۳) نشان می‌دهد که با افزایش تعداد حلقه‌های الیگوتیوفن، تعداد ترازهای مولکولی افزایش یافته است.



شکل ۲-۵: ساختار نواری الیگوتیوفن‌های خالص



شکل ۳-۵: ساختار نواری الیگوتیوفن‌های متصل به اتم سولفور

مقادیر گاف نواری (HOMO-LUMO) و مقادیر HOMO<sup>1</sup> (بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده) و LUMO<sup>2</sup> (پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده) و موقعیت تراز فرمی مولکول‌هایی الیگوتیوفن دو گروه را در جدول ۳-۵ و ۴-۵ گزارش شده است.

جدول ۳-۵: گاف نواری الیگوهای تیوفن خالص و موقعیت تراز فرمی آن‌ها و مقادیر HOMO, LUMO

n-تیوفن خالص	n=۱	n=۲	n=۳	n=۴	n=۵	n=۶	n=۷	n=۸	n=۹	n=۱۰
HOMO (eV)	-۵/۰۶۳	-۴/۳۰۱	-۴/۰۱۲	-۳/۸۶۳	-۳/۷۸۰	-۳/۷۲۳	-۳/۶۸۷	-۳/۶۶۰	-۳/۶۴۳	-۳/۶۲۶
LUMO (eV)	-۰/۵۴۴	-۱/۴۲۰	-۱/۷۷۳	-۱/۹۶۷	-۲/۰۸۶	-۲/۱۶۴	-۲/۲۲۰	-۲/۲۶۴	-۲/۲۹۷	-۲/۳۲۱
موقعیت تراز فرمی (eV)	-۲/۹۳۷	-۲/۱۱۲	-۳/۳۸۳	-۳/۱۰۲	-۲/۹۱۴	-۲/۹۳۷	-۳/۰۶۰	-۲/۹۴۹	-۳/۰۱۳	-۲/۹۶۱
HOMO-LUMO	۴/۵۱۸	۲/۸۸۱	۲/۲۳۹	۱/۸۹۶	۱/۶۹۴	۱/۵۵۸	۱/۴۶۶	۱/۳۹۶	۱/۳۴۶	۱/۳۰۴

جدول ۴-۵: گاف نواری الیگوهای تیوفن متصل به سولفور و موقعیت تراز فرمی آن‌ها و مقادیر HOMO, LUMO

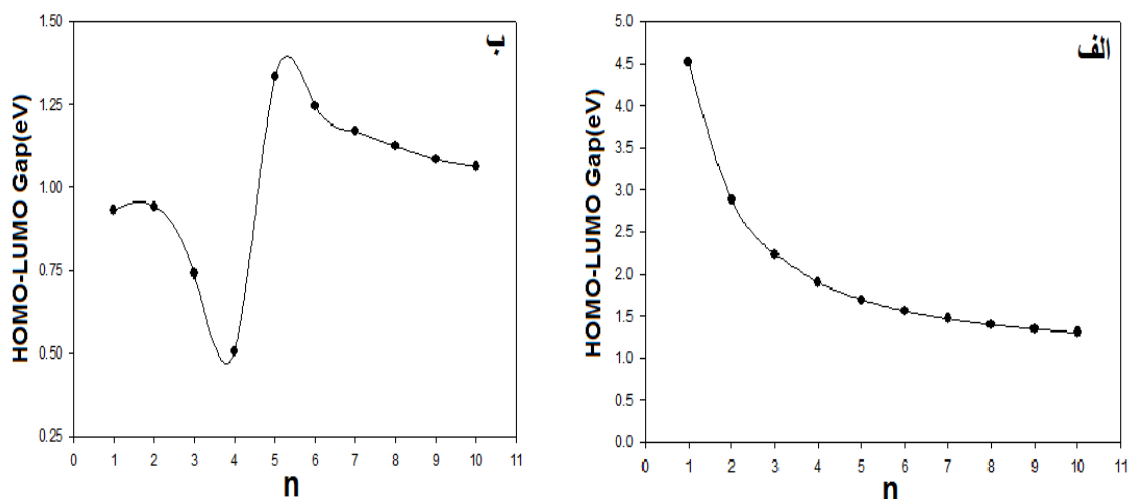
n-تیوفن متصل به سولفور	n=۱	n=۲	n=۳	n=۴	n=۵	n=۶	n=۷	n=۸	n=۹	n=۱۰
HOMO (eV)	-۴/۶۳۱	-۴/۵۶۲	-۴/۳۴۷	-۴/۱۰۴	-۴/۴۳۳	-۴/۳۲۰	-۴/۲۲۵	-۴/۱۶۰	-۴/۱۰۲	-۴/۰۶۳
LUMO (eV)	-۳/۶۹۸	-۳/۶۲۰	-۳/۶۰۶	-۳/۵۹۸	-۳/۰۹۹	-۳/۰۷۵	-۳/۰۵۴	-۳/۰۳۴	-۳/۰۱۷	-۳/۰۰۰
موقعیت تراز فرمی (eV)	-۴/۱۶۵	-۴/۰۹۱	-۳/۹۷۷	-۳/۸۵۱	-۳/۷۶۶	-۳/۶۹۸	-۳/۶۳۹	-۳/۵۹۷	-۳/۵۵۹	-۳/۵۳۲
HOMO-LUMO	۰/۹۳۲	۰/۹۴۱	۰/۷۴۰	۰/۵۰۵	۱/۳۳۴	۱/۲۴۴	۱/۱۷۱	۱/۱۲۵	۱/۰۸۵	۱/۰۶۳

تغییرات گاف نواری بر حسب افزایش طول مولکول‌های هر دو گروه در شکل (۴-۵) رسم شده است. با توجه به نمودار شکل (۴-۵ الف) تغییرات گاف نواری در الیگوتیوفن‌های خالص با افزایش طول

<sup>1</sup> Highest Occupied Molecular Orbital

<sup>2</sup> Lowest Unoccupied Molecular Orbital

مولکول (تعداد حلقه‌های  $n$ ) روندی کاهشی دارد. تغییرات گاف نواری در طول‌های پایین‌تر بیشتر و در طول‌های بالاتر، کمتر می‌گردد و بیشترین مقدار گاف نواری برای مونو تیوفن خالص می‌باشد که در حدود  $4/518(eV)$  است. با توجه به نمودار شکل (۵-۴) تغییرات گاف نواری در الیگوتیوفن‌های متصل به اتم سولفور با افزایش طول مولکول تا الیگوتتراتیوفن روندی کاهشی دارد و در بازه بین الیگوتتراتیوفن و پنتاتیوفن تغییرات گاف نواری روند افزایش بالایی دارد و دوباره روند کاهشی را در پی می‌گیرد و علت آن هم این است که از الیگوپنتاتیوفن به بعد مولکول‌ها خاصیت مغناطیسی می‌گیرند. همچنین در طول‌های پایین‌تر، روند تغییرات گاف نواری در الیگوتیوفن‌های خالص نسبت به الیگوتیوفن‌های متصل به اتم سولفور، بیشتر می‌باشد.



شکل ۵-۴: روند تغییرات گاف نواری به صورت تابعی از  $n$  تعداد حلقه‌های الیگوتیوفن. الف) الیگوتیوفن‌های خالص ب) الیگوتیوفن‌های متصل به اتم سولفور

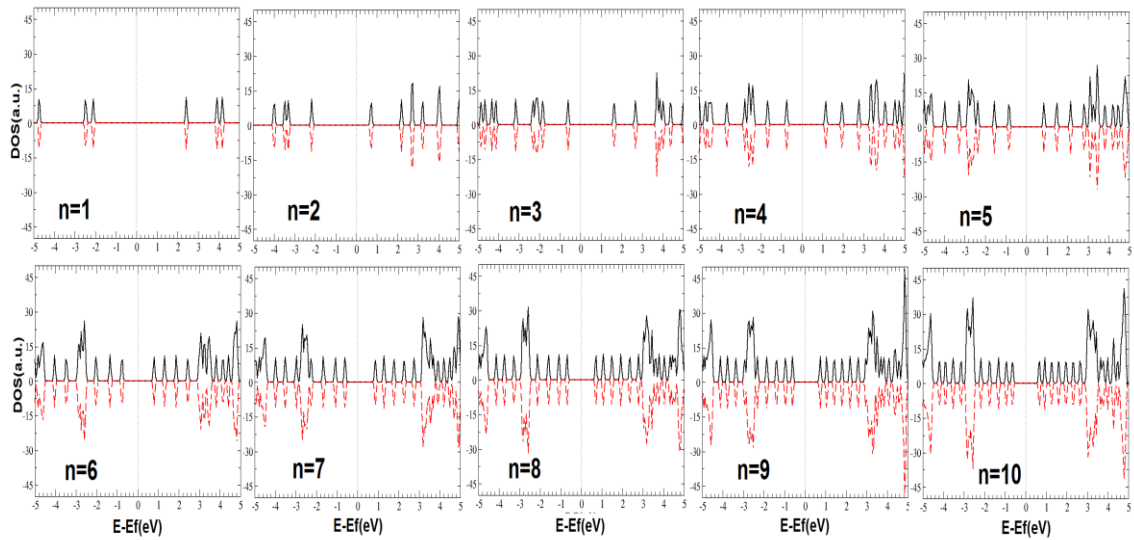
## ۵-۶-۲ محاسبه چگالی حالت‌های کلی (DOS) و جزئی (PDOS)

یکی دیگر از مهم‌ترین کمیت‌هایی که در قسمت خواص الکترونی به آن می‌پردازیم محاسبه‌ی چگالی حالت‌ها می‌باشد. منظور از چگالی حالت‌های یک سیستم، تعداد حالت‌های الکترونی در

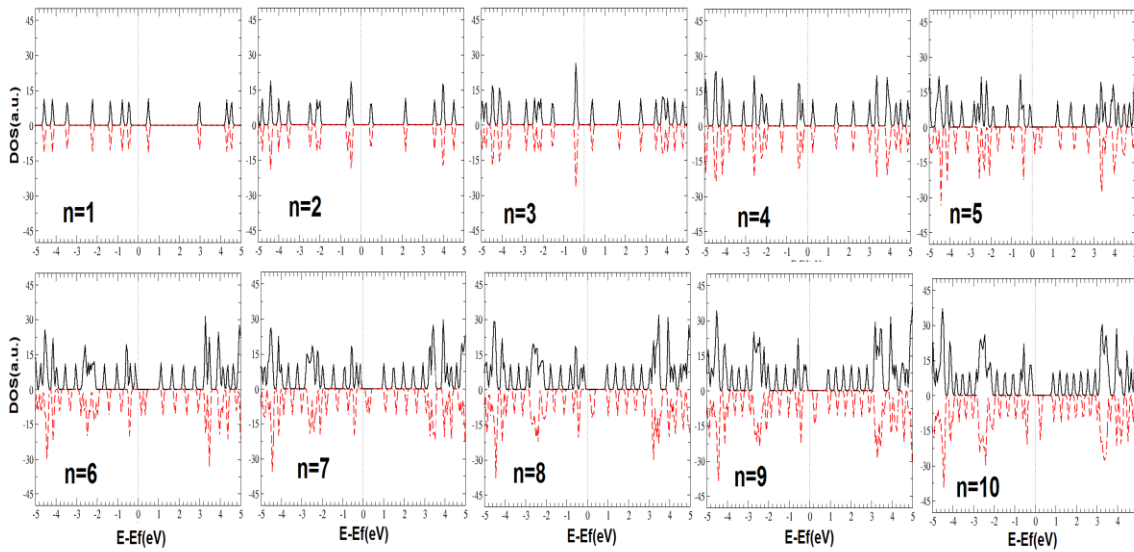


دسترس در واحد حجم در واحد انرژی می‌باشد که در اطراف یک انرژی می‌تواند وجود داشته باشد. یک چگالی حالت بالا در یک تراز انرژی به معنی زیاد بودن تعداد حالت‌ها برای اشغال شدن است. هرگاه با یک چگالی حالت صفر مواجه می‌شویم بدین معناست که هیچ حالتی در تراز انرژی مورد نظر برای اشغال وجود ندارد. چگالی حالت‌های غیر صفر زیر تراز فرمی مربوط به تراز انرژی HOMO می‌باشند که در دمای صفر مطلق  $T=0$  کاملاً پر و اشغال شده‌اند و چگالی حالت‌های غیر صفر بالای تراز فرمی مربوط به تراز انرژی LUMO که در دمای صفر مطلق  $T=0$  کاملاً خالی و اشغال نشده می‌باشند. چگالی حالت‌های کلی یک ترکیب، مجموعی از چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های تشکیل دهنده آن و چگالی حالت‌های کلی یک اتم، مجموع چگالی حالت‌های جزئی اوربیتال‌های اتمی آن اتم می‌باشد. متقارن بودن چگالی حالت‌های کلی یک سیستم برای اسپین بالا و پایین در تمام انرژی‌ها به این معنی می‌باشد که سیستم دارای هیچ قطبش اسپینی نمی‌باشد و سیستم هیچ خصلت مغناطیسی از خود نشان نمی‌دهد. از روی آنالیز چگالی حالت‌های کلی اتم‌ها و مقایسه آن با چگالی حالت کلی ترکیب می‌توان پی برد که کدام اتم‌ها نقش بیشتری در شکل‌گیری ترازهای انرژی داشته‌اند و از روی چگالی حالت‌های جزئی اتم‌ها حتی می‌توان سهم اوربیتالی آن‌ها در شکل‌گیری ترازهای انرژی را مشخص نمود. برای ما چگالی حالت‌های اطراف تراز فرمی از اهمیت خاصی برخوردار است، چون بسیاری از خواص از جمله رسانش الکتریکی به آن‌ها وابسته است. نمودار چگالی حالت‌های کلی الیگوتیوفن‌های خالص در شکل (۵-۵) و برای الیگوتیوفن‌های متصل به اتم سولفور در

شکل (۵-۶) رسم گردیده است.



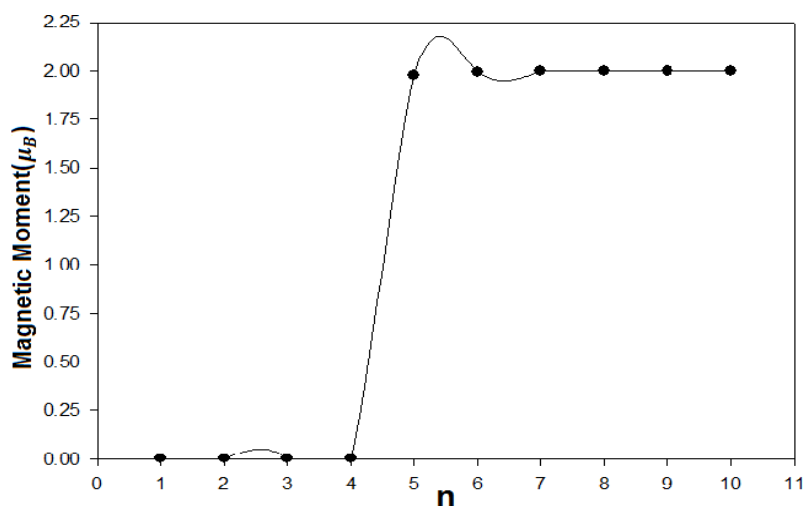
شکل ۵-۵: چگالی حالت‌های کلی الیگوتیوفن‌های خالص



شکل ۵-۶: چگالی حالت‌های کلی الیگوتیوفن‌های متصل به اتم سولفور

در همه‌ی نمودارها سطح انرژی صفر، موقعیت تراز فرمی را نشان می‌دهد که با خط چین عمودی نشان داده شده‌است. بازه‌ی انرژی، برای رسم چگالی حالت‌ها بین  $-5 \text{ eV}$  تا  $+5 \text{ eV}$  در نظر

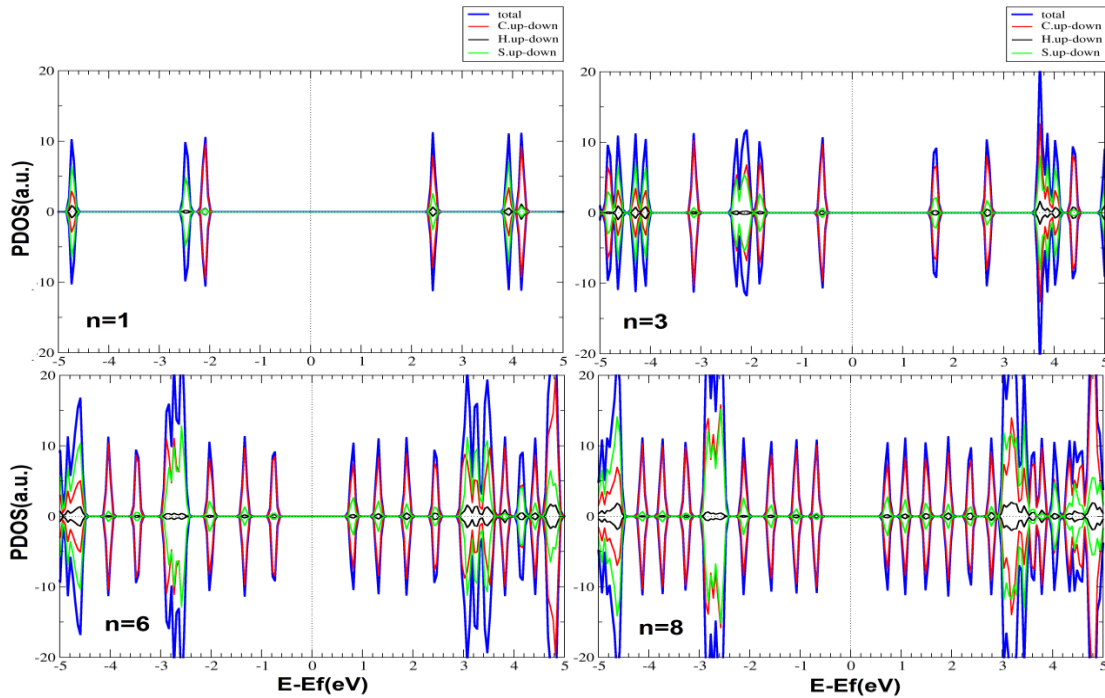
گرفته شده است. از نمودارهای (۵-۵) و (۶-۵) مشخص می‌شود، روند گاف نواری چگالی حالت‌های کلی دو گروه شبیه روند گاف نواری در ساختار نواری نمودارهای (۲-۵) و (۳-۵) می‌باشد و همچنین در دو شکل بالا، چگالی حالت‌های مثبت، مربوط به اسپین بالا و چگالی حالت‌های منفی، مربوط به اسپین پایین می‌باشند. در همه‌ی الیگوتیوفن‌های خالص، نمودار چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین، کاملاً متقارن بوده، در نتیجه هیچ قطبش اسپینی مشاهده نشده و الیگوتیوفن‌های مذکور هیچ خاصیت مغناطیسی از خود نشان نمی‌دهند. ولی در نمودار (۶-۵)، مشاهده می‌شود که از پنتا الیگوتیوفن به بعد، الیگوهای تیوفن متصل به سولفور خاصیت مغناطیسی را از خود نشان می‌دهند. که مقادیر گشتاور مغناطیسی این الیگوتیوفن‌ها در شکل (۷-۵)، نشان داده شده است.



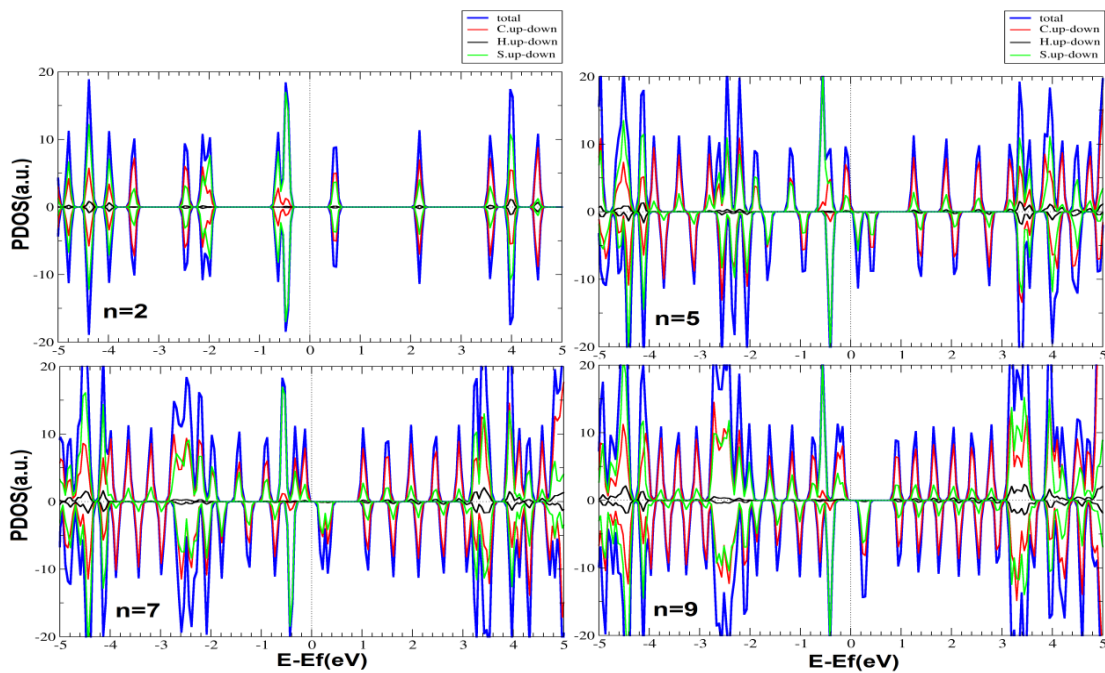
شکل ۷-۵: گشتاور مغناطیسی محاسبه شده در الیگوتیوفن‌های متصل به اتم سولفور به تابعی از طول مولکول

برای مشخص تر شدن سهم اوربیتالی تک تک اتم‌ها در شکل‌گیری چگالی حالت‌های ایجاد شده در ترازها، نیاز به رسم چگالی حالت‌های جزئی آن‌ها داریم. از آنجا که روند سهم اوربیتالی آن‌ها در تمام الیگوتیوفن‌ها به یک صورت می‌باشد، لذا نمودار چگالی حالت‌های جزئی برای سه اتم C و H و S، برای گروه الیگوتیوفن خالص به‌عنوان نمونه، برای مونوتیوفن، تری تیوفن، هگزاتیوفن و اکتاتیوفن در شکل (۸-۵) رسم شده‌اند و همچنین نمودار چگالی حالت‌های جزئی برای سه اتم C و H و S، برای

گروه الیگوتیوفن متصل به سولفور به عنوان نمونه، برای دی تیوفن، پنتاتیوفن، هپتاتیوفن و نوناتیوفن در شکل (۵-۹) رسم شده‌اند.



شکل ۵-۸: نمودار چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های C, H و S در الیگوتیوفن‌های خالص



شکل ۵-۹: نمودار چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های C, H و S در الیگوتیوفن‌های متصل به سولفور

همان طور که در نمودار (۵-۸) مشاهده می‌شود، چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین در الیگوتیوفن‌های خالص دارای تقارن مشابه‌اند و در ترازهای انرژی (HOMO و LUMO)، بیشترین سهم در چگالی حالت‌ها، مربوط به اتم C، بعد از آن اتم S و مقدار جزئی اتم H می‌باشد. و همچنین در نمودار (۵-۹) مشاهده می‌شود که چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین در الیگوتیوفن‌های متصل به سولفور از پنتا تیوفن به بعد دارای تقارن مشابه نبوده و با شکسته شدن تقارن محوری در این مولکول‌ها، می‌توان انتظار گشتاور مغناطیسی غیر صفر را داشت. همچنین مشاهده می‌شود که در ترازهای انرژی HOMO، بیشترین سهم در چگالی حالت‌ها، مربوط به اتم S، بعد از آن اتم C و مقدار جزئی اتم H می‌باشد و در ترازهای انرژی LUMO، بیشترین سهم در چگالی حالت‌ها، مربوط به اتم C، بعد از آن اتم S و مقدار جزئی اتم H می‌باشد.

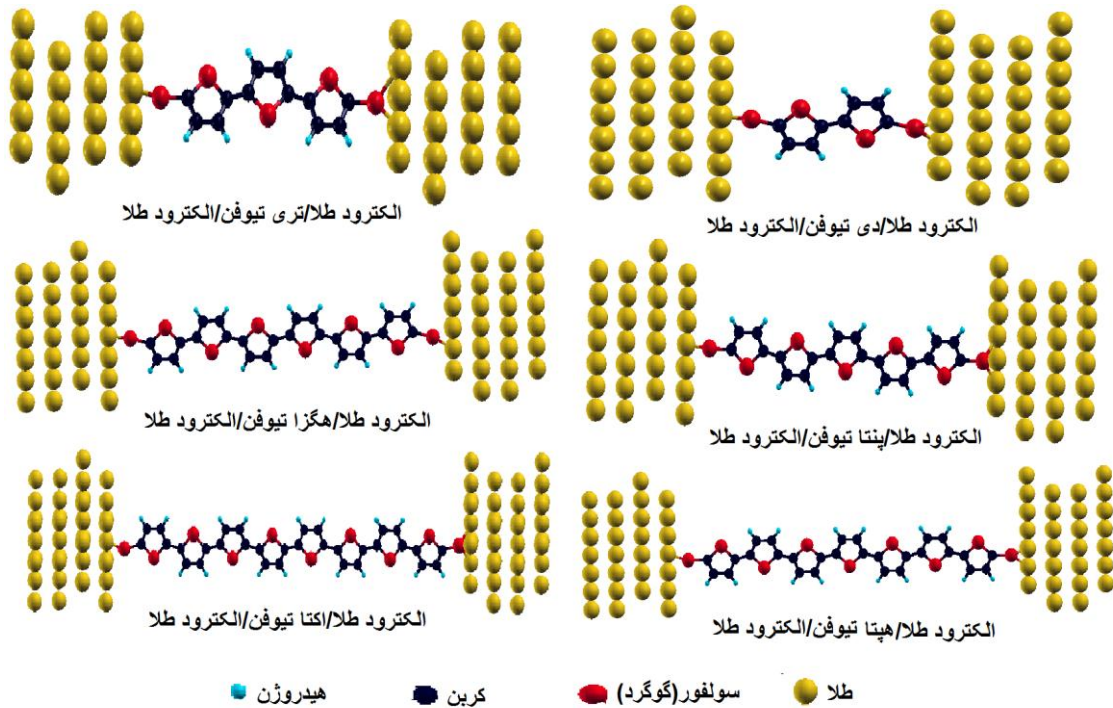
#### ۵-۷ بررسی ترابرد الکترونی مولکول $n$ -تیوفن در اتصال Au/OligoThiophene/Au

حال به بررسی ساختار الکترونی و خواص ترابردی الیگوتیوفن‌ها که توسط سولفور به الکتروود طلا متصل شده‌اند، می‌پردازیم. در محاسبات ترابرد طول پیوند S-Au،  $1/9\text{\AA}$  در نظر گرفته می‌شود [۱۳۳]. در این قسمت خواص ترابردی الیگوتیوفن‌ها را در چند حالت زیر بررسی می‌کنیم:

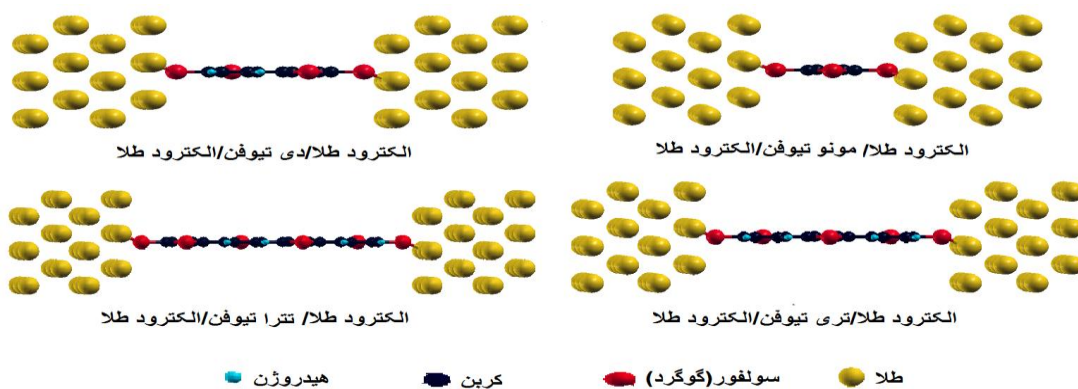
- ۱- ترابرد الکترونی الیگوتیوفن‌ها که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند.
- ۲- ترابرد الکترونی الیگوتیوفن‌ها که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند.
- ۳- ترابرد الکترونی الیگوتیوفن‌ها که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند.
- ۴- ترابرد الکترونی الیگوتیوفن‌ها که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند.

در شکل (۵-۱۰) برای نمونه ساختارهای سیم مولکولی مدل سازی شده برای الیگوتیوفن‌های (دی تیوفن، تری تیوفن، پنتاتیوفن، هگزاتیوفن، هپتاتیوفن و اکتاتیوفن)، که با زاویه صفر درجه به

صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند، نشان داده شده است. در شکل (۵-۱۱) برای نمونه ساختارهای سیم مولکولی مدل سازی شده برای الیگوتیوفن‌های (مونوتیوفن، دی تیوفن، تری تیوفن و تترا تیوفن) که با زاویه ۹۰ درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند، نشان داده شده است.



شکل ۵-۱۰: ساختارهای سیم مولکولی مدل سازی شده برای الیگوتیوفن‌های (دی تیوفن، تری تیوفن، پنتا تیوفن، هگزا تیوفن، هپتا تیوفن و اکتا تیوفن)، که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند.



شکل ۵-۱۱: ساختارهای سیم مولکولی مدل سازی شده برای الیگوتیوفن‌های (مونوتیوفن، دی تیوفن، تری تیوفن و تترا تیوفن)، که با زاویه ۹۰ درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند.

ابتدا قبل از بررسی خواص تراپردی الیگوتیوفن‌ها، ضروریست پارامترهای ورودی به منظور انجام محاسبات با دقت کافی تعیین گردد. این پارامترها در جدول ۵-۵ گردآوری شده اند.

جدول ۵-۵: پارامترهای ورودی محاسبات خواص تراپردی، الیگوتیوفن‌ها

مجموعه پایه‌ها	همگرایی نیرو	روش دینامیک مولکولی (MD)	همگرایی چگالی بار	انرژی قطع	بردار شبکه‌بندی فضای $k$	تابعی همبستگی-تبادلی	تقریب کد
یگانه قطبیده (SZP)	$\leq 0.005 \frac{eV}{\text{\AA}}$	شیب همیوگ (CG)	$10^{-5}$	۳۰۰ Ry	$1 \times 1 \times 10$	GGA(PBE)	شبه پتانسیل

### ۵-۷-۱ تراپرد الکترونی الیگوتیوفن‌ها متصل شده با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا

با توجه به فرمول لاندائور-بوتیکر که در فصل چهارم گفته شد، مقادیر جریان را برای حالت‌های مختلفی از این سیم مولکولی که در بالا اشاره شد، در بازه ولتاژ اعمالی بین ۱/۵V الی ۱/۵V- بدست آورده و نمودار جریان-ولتاژ را برای الیگوهای مختلف رسم کرده‌ایم. لازم به ذکر است که برای بدست آوردن مقادیر جریان مراحل زیر سپری شده است:

۱- برای کلیه ساختارهای مورد نظر و الکتروود طلا، محاسبات برای رسیدن به ساختار بهینه با کد Siesta انجام شده است (الیگوهای کوچکتر در حدود ۱۵ روز و الیگوهای بزرگتر در حدود ۳۰ روز)

۲- در این مرحله بعد از بهینه سازی ساختارها، از کد Transiesta استفاده شد.

۳- در این مرحله با توجه به نتایج مراحل قبل و استفاده از آنها، از کد Tbttrans استفاده شد تا جریان بر حسب ولتاژ اعمال شده به سیم مولکولی بدست آید.

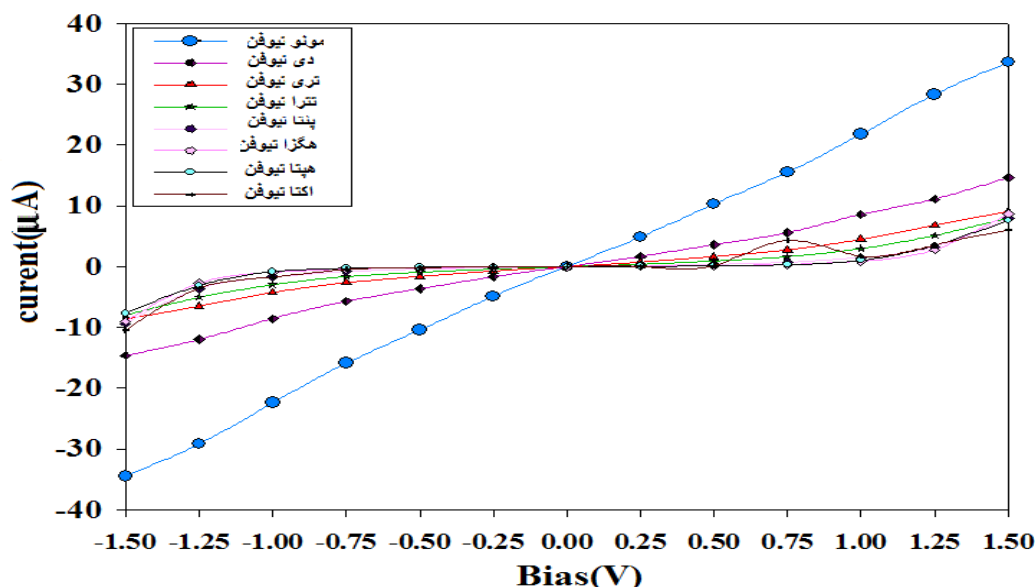
جریان‌های کلیه ساختارهای الیگوتیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند، در جدول (۶-۵) گزارش شده است. با توجه به جدول ۵-۶ نتایج زیر حاصل می‌شود:

جدول ۵-۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل‌اند.

ولتاژ (V)	جریان منو تیوفن ( $\mu A$ )	جریان دی تیوفن ( $\mu A$ )	جریان تری تیوفن ( $\mu A$ )	جریان تتراتیوفن ( $\mu A$ )	جریان پنتا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان هگزا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان هپتا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان اکتا تیوفن ( $\mu A$ )
$V=1/5$	۳۳/۵۹۰۸	۱۴/۶۴۲۰	۹/۱۰۵۴۳	۷/۹۹۰۶۶	۷/۹۵۴۰۱	۸/۷۰۴۸۱	۷/۵۳۵۷۶	۵/۹۸۸۸۸
$V=1/25$	۲۸/۳۳۱۷	۱۱/۱۱۵۲	۶/۷۸۶۵۱	۵/۰۸۸۴۷	۳/۲۴۰۳۲	۲/۷۵۰۷۱	۳/۴۵۳۲۵	۳/۵۵۷۴۰
$V=1/10$	۲۱/۸۰۴۲	۸/۵۷۶۷۰	۴/۴۶۲۰۵	۲/۹۵۷۰۲	۱/۴۹۳۴۰	۰/۹۰۱۰۸	۱/۰۱۳۶۱	۱/۶۹۱۴۷
$V=0/75$	۱۵/۵۲۹۷	۵/۵۸۹۸۱	۲/۷۵۵۱۴	۱/۶۲۶۷۳	۰/۷۱۱۸۵	۰/۳۴۷۲۳	۰/۲۹۲۹۲	۴/۳۲۱۹۹
$V=0/5$	۱۰/۳۰۳۳	۳/۶۰۳۷۶	۱/۶۶۲۱۹	۰/۹۱۹۷۱	۰/۳۷۸۵۵	۰/۱۶۵۸۲	۰/۱۱۴۷۵	۰/۱۲۶۸۲
$V=0/25$	۴/۸۵۱۶۲	۱/۶۵۹۸۰	۰/۷۳۴۱۷	۰/۳۹۲۳۷	۰/۱۵۷۹۴	۰/۰۶۴۹۷	۰/۰۳۹۸۲	۰/۰۳۴۵۹
$V=0$	.	.	.	.	.	.	.	.
$V=-0/25$	-۴/۸۸۹۳	-۱/۶۵۹۸	-۰/۷۲۱۱	-۰/۳۹۲۳	-۰/۱۶۳۸	-۰/۰۶۴۹	-۰/۰۳۷۶	-۰/۰۳۴۵
$V=-0/5$	-۱۰/۴۶۲	-۳/۶۲۷۶	-۱/۶۰۷۵	-۰/۹۱۹۷	-۰/۴۰۶۳	-۰/۱۶۵۸	-۰/۰۱۰۲۳	-۰/۱۲۶۷
$V=-0/75$	-۱۵/۸۸۲	-۵/۷۱۳۷	-۲/۶۳۶۳	-۱/۶۲۶۷	-۰/۷۸۷۶	-۰/۳۴۷۲	-۰/۲۴۵۱	-۰/۴۲۹۷
$V=-1/10$	-۲۲/۴۲۶	-۸/۵۷۷۰	-۴/۲۶۵۴	-۲/۹۵۷۳	-۱/۶۸۰۷	-۰/۹۰۱۴	-۰/۸۱۰۵	-۱/۶۸۹۱
$V=-1/25$	-۲۹/۱۹۱	-۱۲/۰۰۵	-۶/۵۳۶۷	-۵/۰۹۰۱	-۳/۶۲۱۶	-۲/۷۵۱۹	-۳/۱۱۴۳	-۳/۵۵۸۳
$V=-1/5$	-۳۴/۴۴۶	-۱۴/۶۴۵	-۸/۶۶۶۹	-۷/۹۸۳۵	-۹/۳۶۲۱	-۹/۰۱۸۵	-۷/۷۲۶۸	-۱۰/۴۶۹

(۱) در بیشتر الیگوتیوفن‌ها با افزایش ولتاژ اعمالی به سیم مولکولی، جریان افزایش می‌یابد و همچنین برای ولتاژهای معکوس هم این روند صادق هست. (۲) در یک ولتاژ مشخص شده با افزایش طول مولکول (افزایش تعداد حلقه)، جریان کاهش می‌یابد و علت آن هم این است که با افزایش طول، مقاومت زیاد شده و با افزایش مقاومت در یک ولتاژ مشخص که با جریان رابطه معکوس دارد، جریان روند کاهشی را به خود می‌گیرد. (۳) در ولتاژهای معکوس با توجه به جدول بالا، برای ولتاژهای پایین‌تر (از نظر اندازه) از  $V=-1/10$  این روند کاهشی جریان برای تمامی ساختارها صادق هست ولی در ولتاژهای بالاتر (منفی‌تر) در الیگوتیوفن‌های بزرگتر صادق نیست بلکه یک روند نوسانی از خود نشان می‌دهند.

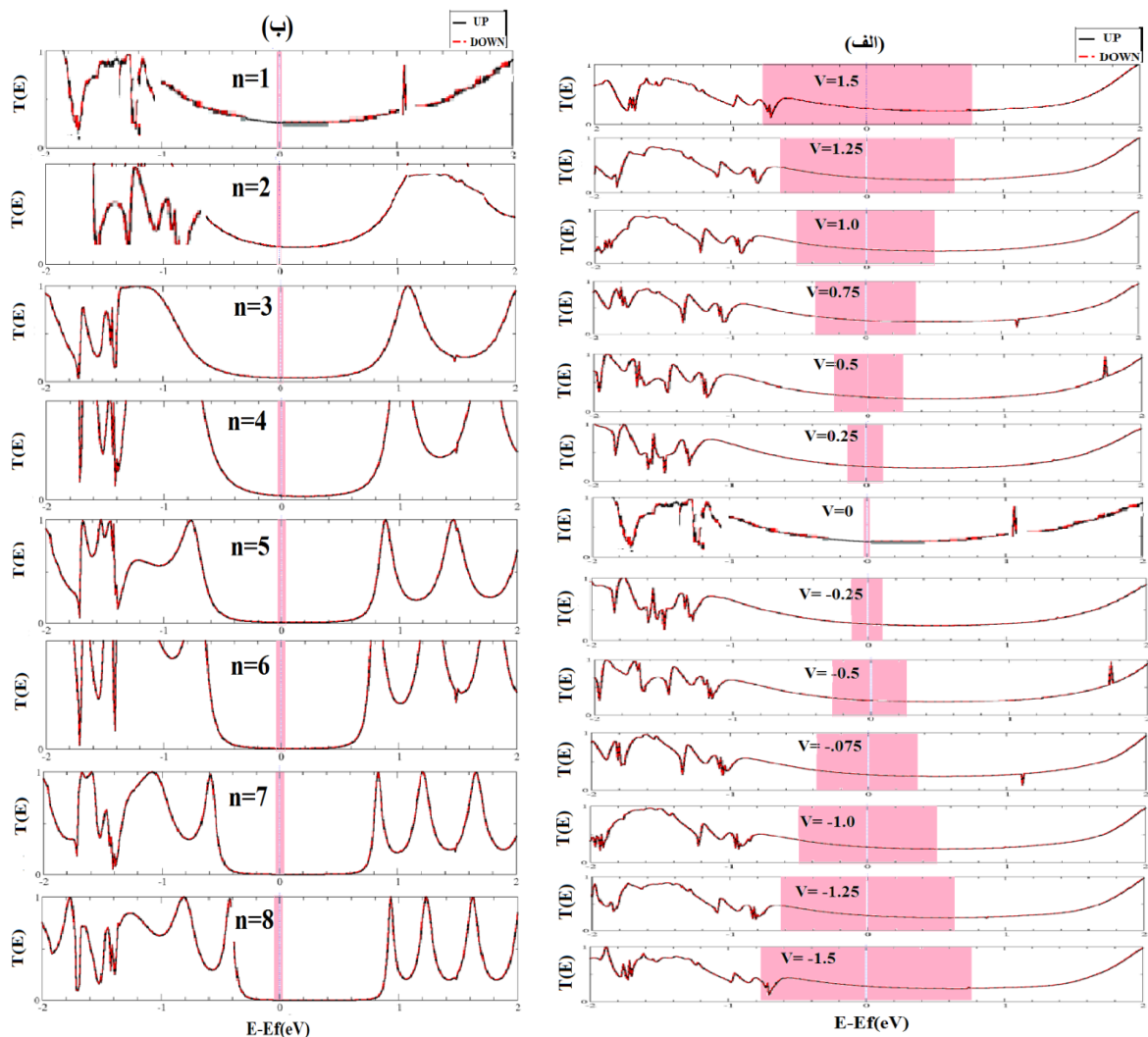




شکل ۵-۱۲: منحنی جریان-ولتاژ برای کلیه ساختارهای الیگوها که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند.

در شکل (۵-۱۲) روند تغییرات جریان برحسب ولتاژ اعمالی برای تمامی ساختارهای سیم مولکولی که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند، نشان داده شده است، با توجه به شکل (۵-۱۲) مشاهده می‌شود: (۱) در اکتا تیوفن در ولتاژ  $V=1/0$ ، مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) ظاهر شده، که در فصل قبل به طور مختصر در مورد آن بحث شده است. ولی در بقیه ساختارها با افزایش ولتاژ اعمالی به سیم مولکولی، جریان به صورت نمایی در هر الیگو افزایش یافته است. (۲) جریان‌های بدست آمده از ولتاژهای معکوس اعمالی، در اکثر الیگوها نسبت به جریان‌های بدست آمده از ولتاژهای مستقیم کمی بیشتر می‌باشد و بیشترین جریان را، ولتاژ  $1/5V$  - مونوتیوفن به خودش اختصاص داده که برابر است با  $34/4460207 \mu A$  - می‌باشد. در شکل (۵-۱۳-الف) نمودار ضریب تراپردی، تمامی ولتاژها را برای مونوتیوفن نشان داده شده است و همچنین به علت بالا بودن تعداد نمودارهای، ضریب تراپردی برای تمامی الیگوتیوفن‌های مورد بررسی، فقط در شکل (۵-۱۳-ب) به عنوان نمونه، نمودار ضریب تراپردی را برای ولتاژ صفر، تمامی الیگوها تیوفن‌ها را در بازه انرژی  $\pm 2eV$  رسم کرده‌ایم. که از مشاهده شکل (۵-۱۳) نتایج زیر حاصل می‌شود: (۱) ضریب تراپردی برای الکترون‌های اسپین بالا، برابر با ضریب تراپردی الکترون‌های اسپین پایین است. که این تقارن

منجر به این می‌شود که قطبش اسپینی در ضریب تراپردی در ولتاژهای مختلف دیده نشود. (۲) ضریب تراپردی برای ولتاژ صفر از لحاظ محل قله‌ها بسیار شبیه نمودارهای مربوط به چگالی حالات الکترونی مولکول الیگو مونو تیوفن می‌باشد. (۳) همچنین واضح است که وابستگی ضریب تراپردی به انرژی، تابع همواری نیست و قله‌های تشدیدی در آن دیده می‌شود. (۴) مقدار جریان‌های که در جدول بالا گزارش شده است، از انتگرال گیری سطح زیر نمودار ضریب تراپردی بدست می‌آید که بازه انتگرال گیری در پنجره ولتاژ تراپردی بین  $\frac{V}{2}$  و  $-\frac{V}{2}$  قرار می‌گیرد، که  $V$  مقدار ولتاژ اعمالی است. همان طور که در شکل مشاهده می‌شود با افزایش ولتاژ، مقدار سطح زیر نمودار ضریب تراپردی هم افزایش می‌یابد، که منجر به افزایش جریان می‌شود. که کاملاً با نتایج بدست آمده، تطابق کامل دارد.



شکل ۵-۱۳: الف) ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم و معکوس، مونوتیوفن که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند. ب) نمودار ضریب تراپردی برای ولتاژ صفر، تمامی الیگوهای n-تیوفن

## ۵-۷-۲ ترابرد الکترونی الیگوتیوفن‌ها متصل شده با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۰۰) طلا

جریان‌ها را برای ساختارهای سیم‌های مولکولی الیگوتیوفن‌های که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات

(۱۰۰) طلا متصل شده‌اند را بدست آورده و در جدول ۵-۷ این مقادیر را گزارش کرده‌ایم.

جدول ۵-۷: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل‌اند.

ولتاژ (V)	جریان منو تیوفن ( $\mu A$ )	جریان دی تیوفن ( $\mu A$ )	جریان تری تیوفن ( $\mu A$ )	جریان تتراتیوفن ( $\mu A$ )	جریان پنتا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان هگزا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان هپتا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان اکتا تیوفن ( $\mu A$ )
V=۱/۵	۳۴/۳۹۸۸	۱۶/۴۲۴۹	۸/۱۱۹۶۰	۶/۴۳۸۱۷	۸/۷۴۴۹۴	۱۰/۰۸۳۱	۷/۷۶۵۸۵	۴/۷۸۲۳۵
V=۱/۲۵	۲۹/۱۷۰۰	۱۳/۷۲۷۱	۶/۰۹۹۶۹	۳/۹۲۲۲۵	۳/۵۲۱۸۲	۴/۰۸۵۴۶	۳/۲۰۹۰۴	۲/۷۰۳۳۰
V=۱/۱۰	۲۲/۴۰۷۴	۹/۹۹۴۸۳	۳/۹۷۹۲۱	۲/۱۹۰۵۴	۱/۶۲۸۳۰	۱/۶۹۶۱۰	۰/۸۷۰۲۸	۰/۵۴۴۶۱
V=۰/۷۵	۱۵/۸۵۳۵	۶/۷۲۷۵۲	۲/۴۶۳۵۳	۱/۲۰۵۴۲	۰/۷۶۳۸۳	۰/۶۳۵۷۷	۰/۲۶۱۵۳	۰/۱۱۸۵۶
V=۰/۵	۱۰/۴۳۰۱	۴/۲۹۴۴۵	۱/۵۰۴۹۳	۰/۶۸۶۴۲	۰/۳۹۴۷۸	۰/۲۸۱۶۵	۰/۱۰۷۴۶	۰/۰۴۳۵۹
V=۰/۲۵	۴/۸۶۷۵۰	۱/۹۷۰۰۶	۰/۶۷۶۴۹	۰/۲۹۴۹۶	۰/۱۵۹۳۳	۰/۱۰۳۸۷	۰/۰۳۸۹۸	۰/۰۱۵۰۶
V=۰	.	.	.	.	.	.	.	.
V=-۰/۲۵	-۴/۸۱۶۸	-۱/۹۷۰۰	-۰/۶۹۱۵	-۰/۲۹۴۹	-۰/۱۵۳۹	-۰/۱۰۳۸	-۰/۰۴۱۰	-۰/۰۱۵۰
V=-۰/۵	-۱۰/۲۱۷	-۴/۲۹۴۴	-۱/۵۶۸۴	-۰/۶۸۶۳	-۰/۳۶۹۰	-۰/۲۸۱۶	-۰/۱۲۰۲	-۰/۰۴۳۶
V=-۰/۷۵	-۱۵/۳۸۳	-۶/۷۲۷۰	-۲/۶۰۳۶	-۱/۲۰۵۳	-۰/۶۹۴۱	-۰/۶۳۵۵	-۰/۳۱۲۷	-۰/۱۱۸۴
V=-۱/۱۰	-۲۱/۵۷۹	-۹/۹۹۴۶	-۴/۲۱۷۶	-۲/۱۹۰۴	-۱/۴۵۸۶	-۱/۶۹۴۵	-۱/۰۹۲۸	-۰/۵۴۳۱
V=-۱/۲۵	-۲۷/۹۹۷	-۱۳/۷۲۷	-۶/۴۰۸۲	-۳/۹۲۱۹	-۳/۱۸۰۹	-۴/۰۸۴۰	-۳/۵۳۷۶	-۲/۷۰۹۲
V=-۱/۵	-۳۳/۰۶۴	-۱۶/۴۲۵	-۸/۵۶۵۱	-۶/۴۷۴۷	-۷/۱۴۴۸	-۱۰/۱۵۰	-۷/۵۵۹۷	-۵/۰۶۸۴

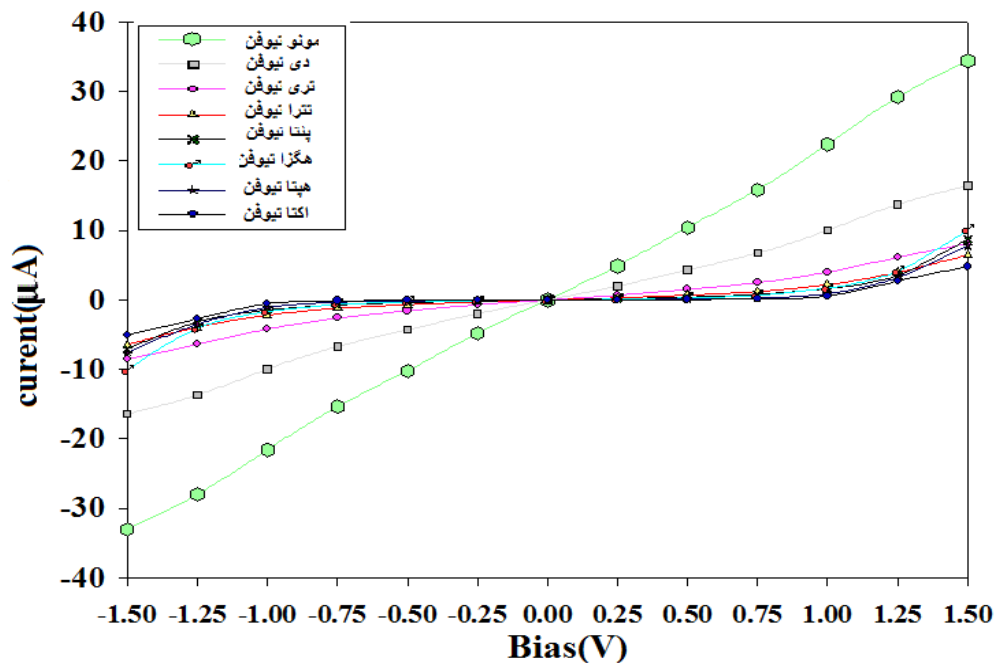
با توجه به جدول ۵-۷، نتایج زیر حاصل می‌شود:

(۱) با افزایش ولتاژ در هر الیگوتیوفن، مقادیر جریان هم افزایش می‌یابد. (۲) در هر ولتاژ خاص و مشخص با افزایش طول مولکول، جریان کاهش می‌یابد و در نتیجه در یک ولتاژ ثابت جریان با طول

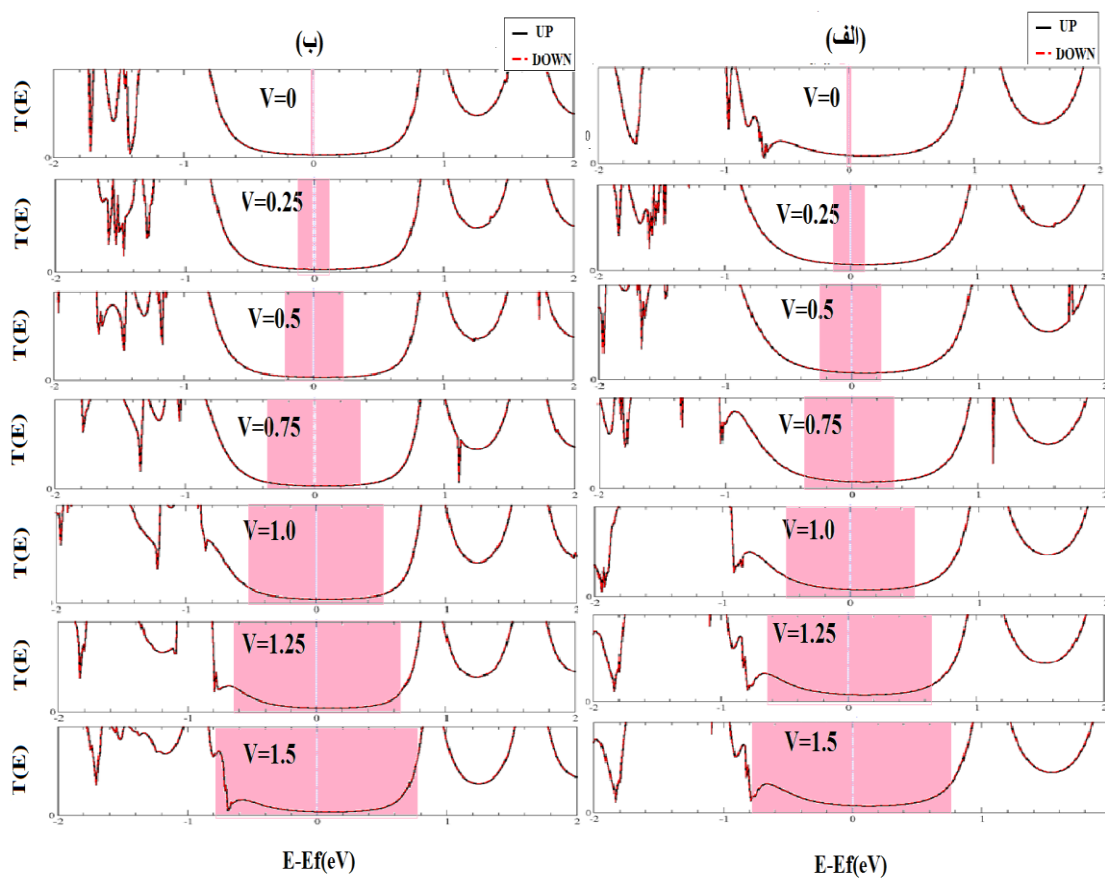
مولکول رابطه معکوس دارد. ۳) اندازه جریان، در هر الیگوتیوفن زوج (دی تیوفن، تتراتیوفن، هگزاتیوفن و اکتاتیوفن) برای همه ولتاژهای اعمالی شده (مستقیم و معکوس)، تقریباً برابر است. و برای الیگوتیوفن های فرد (تری تیوفن و هپتاتیوفن) اندازه جریان های، ولتاژهای معکوس بیشتر از ولتاژهای مستقیم هست و برای مونوتیوفن و پنتاتیوفن، اندازه جریان ها، برای ولتاژهای مستقیم بزرگتر از ولتاژهای معکوس هست.

از مقایسه دو جدول ۵-۶ و ۵-۷ به این نتیجه می رسیم که در همه ولتاژهای مستقیم و معکوس، مقادیر جریان ها برای مونوتیوفن، دی تیوفن، پنتاتیوفن و هگزاتیوفن که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده اند، کمی بیشتر از حالتی هست که با زاویه صفر درجه متصل شده است و همچنین در همه ولتاژهای مستقیم و معکوس، مقادیر جریان ها برای تری تیوفن، تتراتیوفن، هپتاتیوفن و اکتاتیوفن که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده اند، کمی کمتر از حالتی هست که با زاویه صفر درجه متصل شده است. در شکل (۵-۱۴) روند تغییرات جریان بر حسب ولتاژ اعمالی برای تمامی ساختارهای سیم مولکولی که با زاویه ۹۰ درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده اند، نشان داده شده است. با توجه به شکل (۵-۱۴) هیچ مقاومت دیفرانسیلی منفی در کلیه ساختارها دیده نشده است و اینکه روند تغییرات جریان، با ولتاژ رابطه مستقیم و با طول مولکول رابطه معکوس دارد.

در شکل (۵-۱۵) نمودارهای ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم، دی تیوفن و تری تیوفن نشان داده شده است. شکل (۵-۱۵) نشان می دهد که با افزایش طول الیگوتیوفن از دی تیوفن به تری تیوفن، سطح نمودار ضریب تراپردی در یک ولتاژ مشخص در پنجره انتگرال گیری که نشان داده شده است، کاهش می یابد، که منجر به کاهش جریان می شود.



شکل ۵-۱۴: منحنی جریان-ولتاژ برای کلیه ساختارها که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند



شکل ۵-۱۵: ضریب ترابردی ولتاژهای مستقیم، الیگوتیوفن‌های که با زاویه ۹۰ درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند. الف) دی تیوفن ب) تری تیوفن.

### ۵-۷-۳ ترا برد الکترونی الیگوتیوفن ها متصل شده با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا

جریان ها را برای ساختارهای سیم های مولکولی الیگوتیوفن های که با زاویه صفر درجه با صفحات

(۱۱۱) طلا متصل شده اند را بدست آورده و در جدول ۵-۸ این مقادیر را گزارش کرده ایم. در شکل

(۵-۱۶) روند تغییرات جریان بر حسب ولتاژ اعمالی برای تمامی ساختارهای سیم مولکولی که با زاویه

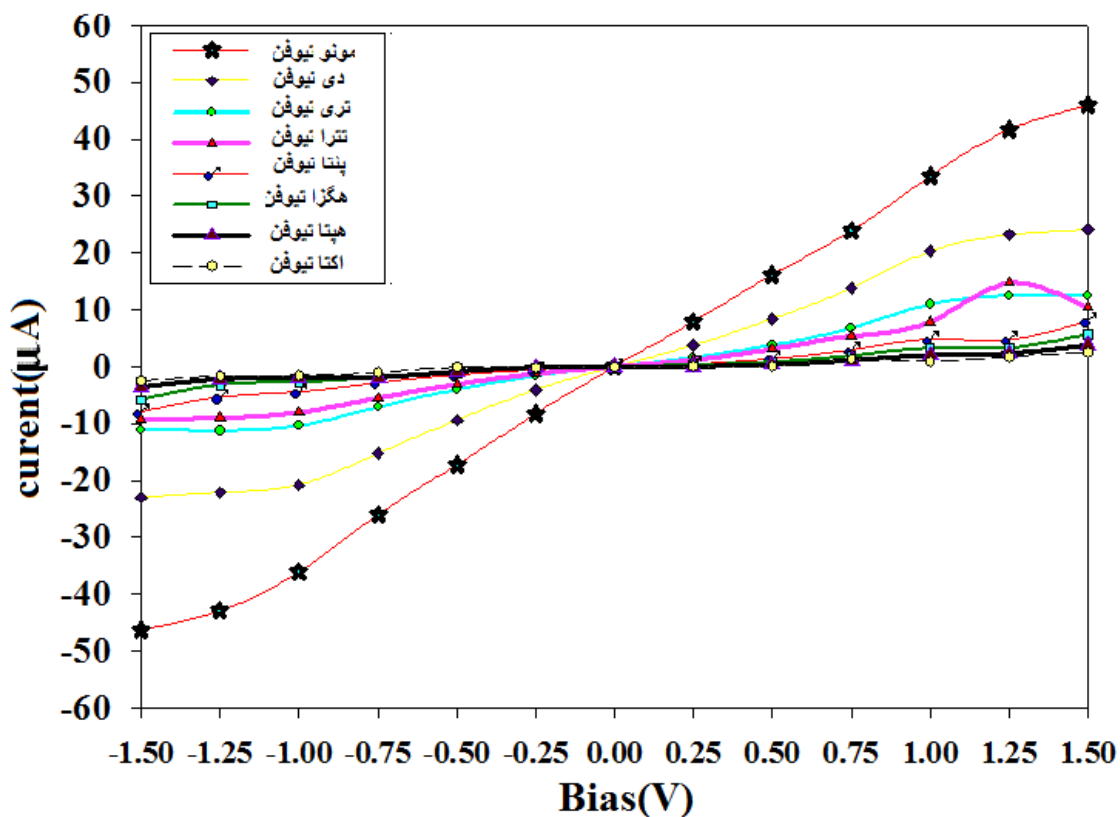
صفر درجه به صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده اند، نشان داده شده است.

جدول ۵-۸: جریان های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن هایی که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل اند.

ولتاژ (V)	جریان منو تیوفن ( $\mu A$ )	جریان دی تیوفن ( $\mu A$ )	جریان تری تیوفن ( $\mu A$ )	جریان تتراتیوفن ( $\mu A$ )	جریان پنتا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان هگزا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان هپتا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان اکتا تیوفن ( $\mu A$ )
V=۱/۵	۴۵/۹۹۶۸	۲۴/۱۰۷۶	۱۲/۴۸۱۵	۱۰/۴۰۷۵	۷/۹۷۹۹۵	۵/۷۲۲۲۸	۳/۷۸۶۴۵	۲/۵۳۸۶۳
V=۱/۲۵	۴۱/۶۴۵۱	۲۳/۲۰۲۴	۱۲/۴۴۲۱	۱۴/۷۷۲۲	۴/۷۲۸۵۷	۳/۲۳۹۰۹	۲/۳۴۸۹۵	۱/۷۹۳۲۲
V=۱/۱۰	۳۳/۴۷۲۳	۲۰/۲۷۴۹	۱۰/۹۴۱۷	۷/۸۷۱۳۴	۴/۸۲۸۳۵	۳/۱۷۶۷۰	۲/۰۱۳۸۹	۰/۹۶۲۴۸
V=۰/۷۵	۲۳/۸۴۱۵	۱۳/۷۷۴۶	۶/۷۹۷۳۹	۵/۳۹۷۱۵	۲/۹۵۳۸۵	۱/۸۶۵۸۳	۱/۱۲۷۵۴	۱/۳۵۶۷۷
V=۰/۵	۱۶/۱۳۶۶	۸/۴۱۳۳۰	۳/۷۷۹۳۲	۳/۰۷۷۸۹	۱/۴۰۷۰۹	۰/۷۷۵۶۲	۰/۳۶۵۸۳	۰/۱۸۸۵۲
V=۰/۲۵	۷/۹۰۶۴۴	۳/۷۵۴۹۱	۱/۵۷۷۶۱	۱/۲۰۶۹۵	۰/۴۹۹۲۷	۰/۲۳۳۰۴	۰/۰۷۸۴۳	۰/۰۳۴۶۷
V=۰	.	.	.	.	.	.	.	.
V=-۰/۲۵	-۸/۲۵۸۵	-۴/۰۳۶۱	-۱/۶۵۰۶	-۱/۲۰۵۸	-۰/۵۱۶۷	-۰/۲۸۴۶	-۰/۰۹۶۴	-۰/۰۶۳۸
V=-۰/۵	-۱۷/۳۵۲	-۹/۴۵۱۱	-۴/۰۵۲۴	-۳/۰۸۷۸	-۱/۴۳۷۶	-۱/۰۴۰۲	-۰/۸۳۵۷	-۰/۴۴۳۷
V=-۰/۷۵	-۲۶/۰۴۴	-۱۵/۳۱۹	-۷/۱۱۳۵	-۵/۵۱۱۲	-۲/۷۹۶۷	-۱/۸۹۱۰	-۱/۸۴۹۰	-۱/۰۱۳۲
V=-۱/۱۰	-۳۶/۱۵۰	-۲۰/۸۲۸	-۱۰/۴۴۸	-۸/۰۲۱۲	-۴/۳۷۰۹	-۲/۷۲۶۸	-۱/۹۸۶۶	-۱/۴۸۷۵
V=-۱/۲۵	-۴۲/۹۵۴	-۲۲/۱۰۲	-۱۱/۳۲۴	-۹/۰۲۸۱	-۵/۳۲۰۷	-۳/۲۰۴۱	-۲/۱۵۴۳	-۱/۶۳۵۴
V=-۱/۵	-۴۶/۲۸۱	-۲۳/۰۴۰	-۱۱/۱۳۶	-۹/۱۸۲۵	-۸/۰۰۲۵	-۵/۷۹۵۱	-۳/۶۱۳۶	-۲/۴۶۶۴

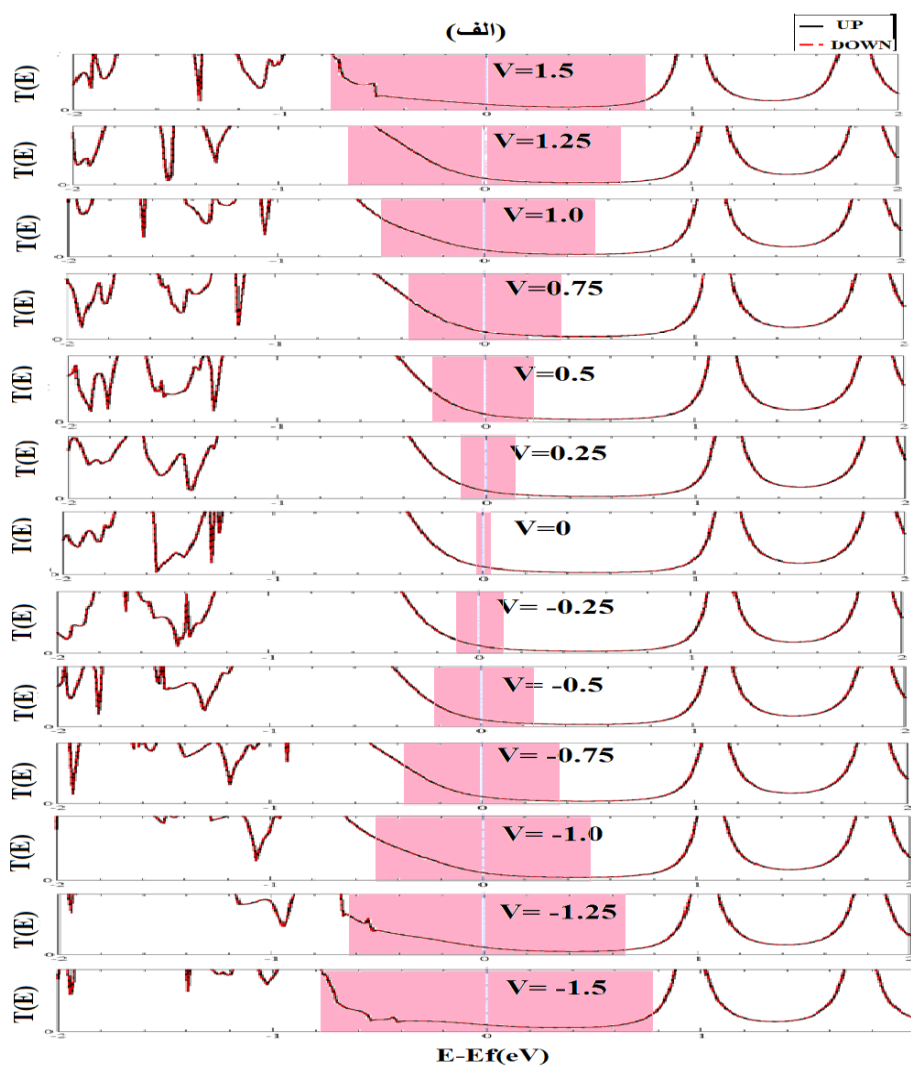
با توجه به جدول ۵-۸ و شکل (۵-۱۶) نتایج زیر حاصل می‌شود:

(۱) با افزایش ولتاژ در هر الیگوتیوفن، جریان هم افزایش می‌یابد. (۲) در ولتاژهای مشخص شده، بر حسب افزایش طول مولکول، جریان کاهش می‌یابد که این کاهش برای الیگوهای پایین‌تر مثل مونوتیوفن، دی‌تیوفن و تری‌تیوفن با روند کاهشی سریع‌تری روبه‌رو است. ولی در الیگوهای بالاتر این روند کاهشی جریان، سرعت کمتری دارد. (۳) به جز مونوتیوفن که اندازه جریان‌های ولتاژهای معکوس، بیشتر از اندازه جریان‌های ولتاژهای مستقیم هستند. در بقیه الیگوها در ولتاژهای بالاتر (مستقیم و معکوس)، اندازه جریان‌های ولتاژهای مستقیم بیشتر از اندازه جریان‌های ولتاژهای معکوس هستند. در ولتاژهای پایین‌تر، همان روند مونوتیوفن را دارا می‌باشند. (۴) در تتراتیوفن در ولتاژ  $V = 1/5$  در الیگو پنتاتیوفن در ولتاژ  $V = 1/25$  و در الیگو اکتاتیوفن در ولتاژ  $V = 1/10$ ، مقاومت دیفرانسیلی منفی نمایان می‌شود.



شکل ۵-۱۶: منحنی جریان-ولتاژ برای کلیه ساختارها که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند.

در شکل (۵-۱۷) نمودارهای ضریب تراپردی کلیه ولتاژها را برای ، تتراتیوفن نشان داده شده است که با مشاهده آن می توان نتیجه گرفت که با افزایش ولتاژ، سطح زیر نمودار ضریب تراپردی افزایش می یابد، که این افزایش، باعث افزایش جریان می شود. با توجه به شکل، در ولتاژ  $V = 1/25$  بطور واضح نشان می دهد که سطح زیر نمودار در این ولتاژ بیشتر از ولتاژ  $V = 1/5$  است که این اختلاف سطح باعث، ایجاد پدیده NDR در ولتاژ  $V = 1/5$  در این الیگو شده است.



شکل ۵-۱۷: ضریب تراپردی کلیه ولتاژها را برای ، تتراتیوفن برای حالتی که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده است.



### ۵-۷-۴ ترابرد الکترونی الیگوتیوفن‌ها متصل شده با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا

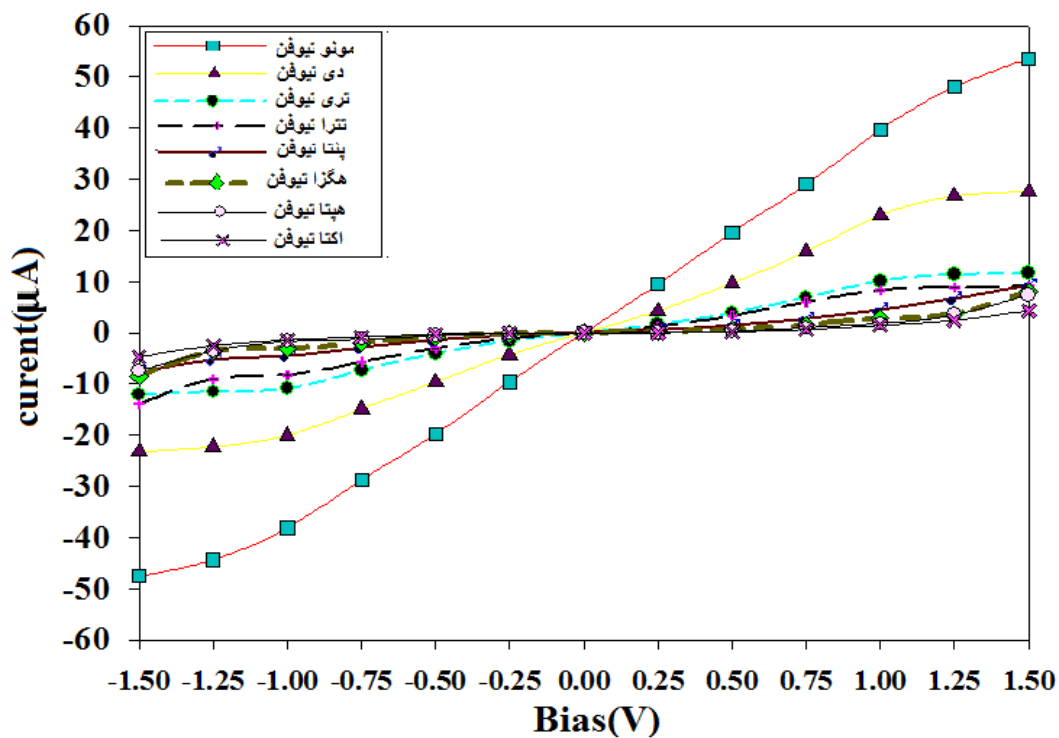
جریان‌ها را برای ساختارهای سیم‌های مولکولی الیگوتیوفن‌های که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند، را بدست آورده و در جدول ۵-۹ این مقادیر را گزارش کرده‌ایم. و همچنین در شکل (۵-۱۸) روند تغییرات جریان برحسب ولتاژ اعمالی را برای تمامی ساختارهای سیم مولکولی که با زاویه ۹۰ درجه به صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند، نشان داده شده است.

جدول ۵-۹: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل‌اند.

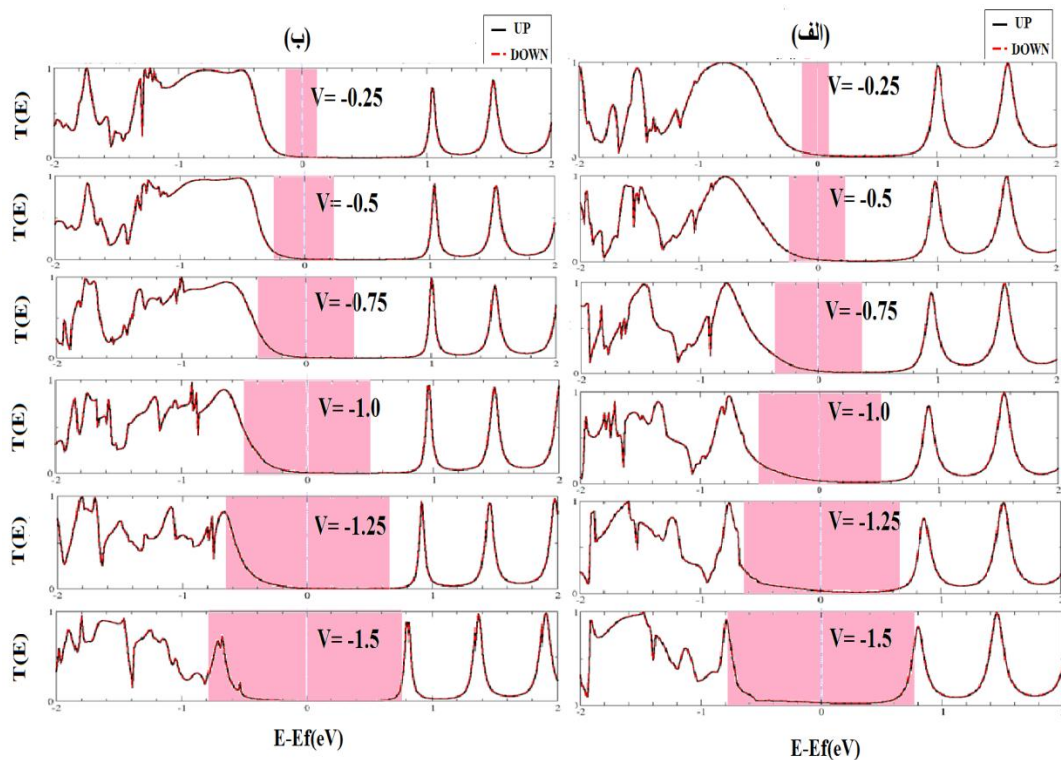
ولتاژ (V)	جریان منو تیوفن ( $\mu A$ )	جریان دی تیوفن ( $\mu A$ )	جریان تری تیوفن ( $\mu A$ )	جریان تتراتیوفن ( $\mu A$ )	جریان پنتا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان هگزا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان هپتا تیوفن ( $\mu A$ )	جریان اکتا تیوفن ( $\mu A$ )
V=۱/۵	۵۳/۵۳۷۱	۲۷/۶۰۴۷	۱۱/۶۳۷۱	۹/۱۶۱۵۰	۹/۲۱۷۲۹	۸/۰۸۳۶۶	۷/۳۵۶۴۲	۴/۳۲۷۸۲
V=۱/۲۵	۴۸/۰۳۲۹	۲۶/۷۳۱۲	۱۱/۳۶۶۳	۸/۸۳۴۲۳	۶/۶۷۴۹۶	۳/۷۳۹۳۶	۳/۴۸۷۶۲	۲/۴۵۳۷۸
V=۱/۱۰	۳۹/۶۷۲۳	۲۲/۹۵۱۷	۱۰/۱۴۳۳	۸/۳۱۷۴۶	۴/۴۶۸۹۱	۲/۷۶۷۲۳	۱/۸۴۳۵۶	۱/۴۳۸۶۶
V=۰/۷۵	۲۹/۰۰۲۶	۱۵/۸۴۱۷	۶/۹۴۸۱۶	۶/۰۱۴۹۰	۲/۷۱۴۰۸	۱/۵۵۷۵۶	۱/۰۱۳۵۶	۰/۶۴۵۸۷
V=۰/۵	۱۹/۶۴۷۷	۹/۷۱۲۰۶	۳/۹۸۳۹۴	۳/۳۷۱۴۰	۱/۴۰۱۹۹	۰/۶۶۳۷۳	۰/۲۷۸۳۲	۰/۱۹۳۳۴
V=۰/۲۵	۹/۴۶۷۶۵	۴/۲۵۰۵۰	۱/۵۹۷۰۸	۱/۲۴۵۱۸	۰/۵۱۷۸۰	۰/۱۹۹۴۸	۰/۰۹۴۳۱	۰/۰۳۳۴۵
V=۰	.	.	.	.	.	.	.	.
V=-۰/۲۵	-۹/۵۹۸۶	-۴/۲۵۷۴	-۱/۵۶۸۶	-۱/۱۲۹۱	-۰/۵۳۰۷	-۰/۲۱۸۳	-۰/۱۱۲۳	-۰/۰۵۲۶
V=-۰/۵	-۱۹/۸۴۰	-۹/۶۳۰۷	-۴/۰۱۳۶	-۳/۰۳۱۶	-۱/۴۷۲۵	-۰/۸۰۷۳	-۰/۵۴۳۷	-۰/۲۵۴۷
V=-۰/۷۵	-۲۸/۸۰۷	-۱۴/۹۶۵	-۷/۳۰۷۱	-۵/۶۴۶۶	-۲/۹۰۹۵	-۱/۹۱۱۷	-۱/۲۳۵۷	-۰/۷۷۶۹
V=-۱/۱۰	-۳۸/۱۲۱	-۲۰/۰۶۸	-۱۰/۹۰۳	-۸/۲۳۲۲	-۴/۵۴۸۵	-۳/۰۴۶۴	-۱/۶۷۳۴	-۱/۳۷۷۴
V=-۱/۲۵	-۴۴/۳۶۸	-۲۲/۲۷۱	-۱۱/۵۶۳	-۹/۰۵۷۴	-۵/۲۹۳۴	-۳/۵۵۷۰	-۳/۵۴۳۲	-۲/۵۰۲۲
V=-۱/۵	-۴۷/۵۶۹	-۲۳/۲۸۳	-۱۲/۱۲۱	-۱۳/۹۰۶	-۷/۸۱۶۵	-۸/۴۸۴۵	-۷/۴۶۶۷	-۴/۶۷۰۰

با توجه به جدول ۵-۹ و شکل (۵-۱۸) نتایج زیر حاصل می‌شود: (۱) بین چهار حالت که بررسی شده، بیشترین جریان برای مونوتیوفن در ولتاژ مستقیم  $V=1/5$ ، که برابر با  $53/5371082$  میکروآمپر می‌باشد، بدست آمده است. (۲) مشابه حالت‌های قبل با افزایش ولتاژ در هر الیگوتیوفن، جریان هم افزایش می‌یابد و همچنین با افزایش طول مولکول در هر ولتاژ مشخص، جریان کاهش می‌یابد. (۳) در بیشتر الیگوها، اندازه جریان برای این حالت نسبت به حالت قبلی (صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا) در بیشتر ولتاژهای مستقیم و معکوس و بخصوص در ولتاژهای بالاتر، بزرگتر و بیشتر بدست آمده است. (۴) هیچ مقاومت دیفرانسیلی منفی برای این حالت، به وجود نیامده است.

در شکل (۵-۱۹) نمودارهای ضریب تراپردی کلیه ولتاژها معکوس را برای، پنتاتیوفن و هگزاتیوفن نشان داده شده است. که با مشاهده آن می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش طول مولکول در یک ولتاژ مشخص شده، سطح زیر نمودار ضریب تراپردی کاهش می‌یابد، که این کاهش، باعث کاهش جریان می‌شود. به استثنا موردی که در الیگو پنتاتیوفن در ولتاژ  $V = -1/5$  اتفاق افتاده که بطور واضح نشان می‌دهد که سطح زیر نمودار ضریب تراپردی در پنجره انتگرال‌گیری در این ولتاژ کمتر از سطح زیر نمودار ضریب تراپردی ولتاژ  $V = -1/5$  هگزاتیوفن است که این باعث، ایجاد جریان بیشتر در الیگو هگزاتیوفن می‌شود که کاملاً با نتایج جدول ۵-۹ تطابق دارد.



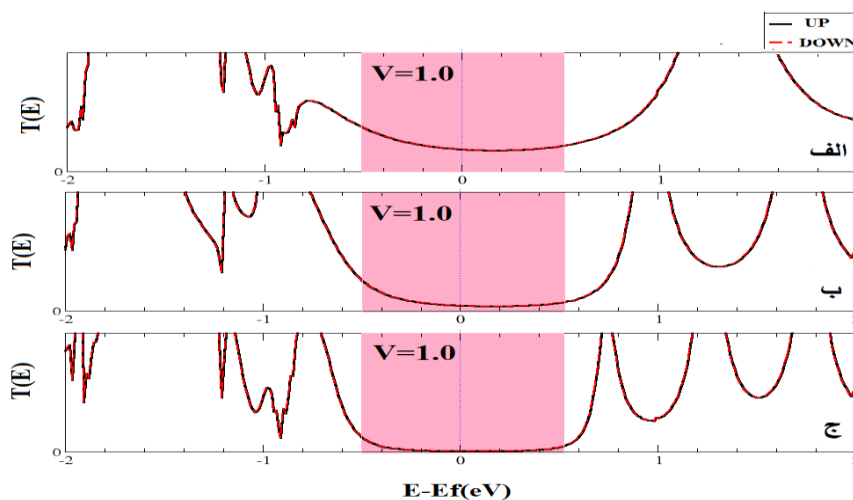
شکل ۵-۱۸: منحنی جریان-ولتاژ برای کلیه ساختارها که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند.



شکل ۵-۱۹: ضرب تراپردی ولتاژهای معکوس، الیگوتیوفن‌های که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند. الف) پنتاتیوفن ب) هگزاتیوفن.

## ۵-۸ بررسی اثر طول، زاویه و صفحات اتصال بر روی ترابرد الیگوتیوفن

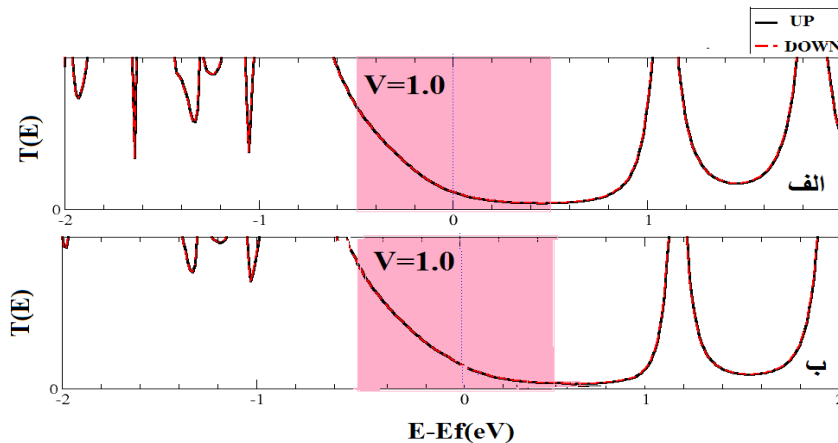
در ابتدا این بخش اثر طول را بررسی می‌کنیم. بدین منظور برای نمونه نمودارهای ضریب ترابرد الیگوتیوفن، تتراتیوفن و هگزاتیوفن را در ولتاژ  $V=1/0$ ، که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند، مورد بررسی قرار می‌دهیم. در شکل (۵-۲۰) نمودار ضریب ترابرد الیگوتیوفن، تتراتیوفن و هگزاتیوفن را نشان داده‌ایم. با توجه به شکل (۵-۲۰) مشاهده می‌شود که سطح زیر نمودار ضریب ترابرد الیگوتیوفن در پنجره انتگرال‌گیری برای الیگوتیوفن خیلی زیاد هست و هر چه طول مولکول افزایش می‌یابد، با سرعت بالای در حال کاهش هست که نشانگر کاهش سریع جریان بر حسب افزایش طول الیگوتیوفن است. با توجه به اندازه جریان‌های بدست آمده در این سه حالت اثر طول در ترابرد الیگوتیوفن‌ها، بسیار مهم و تاثیر گذاری بالای دارد.



شکل ۵-۲۰: ضریب ترابرد الیگوتیوفن‌های که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند. الف) الیگوتیوفن ب) تتراتیوفن ج) هگزاتیوفن.

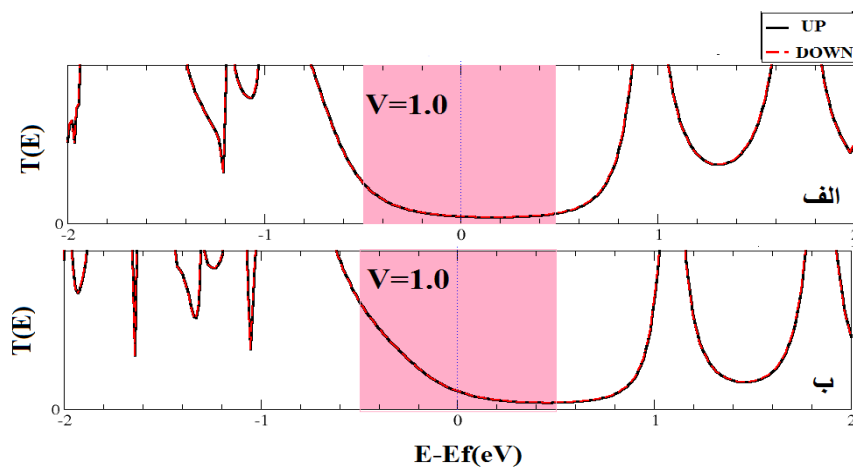
بعد از بررسی اثر طول در ترابرد، به بررسی اثر زاویه پرداخته‌ایم، برای نمونه نمودارهای ضریب ترابرد تتراتیوفن را در ولتاژ  $V=1/0$ ، که با زاویه صفر درجه و  $90^\circ$  به صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند، را در شکل (۵-۲۱) نشان داده‌ایم. در شکل (۵-۲۱) مشاهده می‌شود که سطح زیر نمودار ضریب ترابرد در

پنجره انتگرال گیری برای دو حالت ( زاویه صفر و ۹۰ درجه) نزدیک به هم هستند و حالت ۹۰ درجه کمی بیشتر از حالت صفر درجه می باشد که این اختلاف را در جریان های بدست آمده از این حالت ها، مشاهده می کنیم. پس می توان نتیجه گرفت که اثر زاویه در ترابرد الیگوتیوفن ها، تاثیر کمی دارد.



شکل ۵-۲۱: الف) ضریب تراپردی ولتاژ  $V=1/0$ ، تتراتیوفن که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده است ب) ضریب تراپردی ولتاژ  $V=1/0$ ، تتراتیوفن که با زاویه ۹۰ درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده است.

بعد از بررسی اثر طول و زاویه حال به بررسی اثر صفحات الکتروود می پردازیم، بدین منظور برای نمونه نمودارهای ضریب ترابرد تتراتیوفن را در ولتاژ  $V=1/0$ ، که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) و (۱۱۱) طلا متصل شده اند، را در شکل (۵-۲۲) نشان داده ایم.



شکل ۵-۲۲: الف) ضریب تراپردی ولتاژ  $V=1/0$ ، تتراتیوفن که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده است ب) ضریب تراپردی ولتاژ  $V=1/0$ ، تتراتیوفن که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده است.

با توجه به شکل (۵-۲۲) مشاهده می‌شود که سطح زیر نمودار ضریب ترابرد در پنجره انتگرال‌گیری برای حالتی که الیگوتیوفن‌ها با صفحات (۱۱۱) طلا متصل شده‌اند، خیلی بیشتر از حالتی است که با صفحات (۱۰۰) طلا متصل شده‌اند. پس می‌توان نتیجه گرفت که اثر صفحات بر روی ترابرد الیگوتیوفن‌ها مهم و تاثیرگذاری نسبتاً بالای دارد. با توجه بررسی‌های که در این بخش انجام داده‌ایم می‌توان نتیجه گرفت در اکثر موارد به ترتیب اثر طول، صفحات اتصال و زاویه، روی ترابرد الیگوتیوفن‌ها تاثیرگذاری بیشتری داشته‌اند.

## ۵-۹ جمع‌بندی

در این فصل ساختار الکترونی الیگوتیوفن‌ها و خواص ترابرد الکترونی الیگوتیوفن‌های که بین الکترودهای طلا قرار گرفته‌اند، مورد بررسی قرار گرفت. که مهم‌ترین نتایج بدست آمده از این فصل به صورت خلاصه بیان می‌کنیم: (۱) گاف انرژی با افزایش طول مولکول الیگوتیوفن‌ها در حالت خالص، کاهش می‌یابد و در حالت متصل به سولفور به طور نوسانی کاهش می‌یابد. (۲) در حالت الیگوتیوفن‌های خالص، خاصیت مغناطیسی مشاهده نشده است. در حالت الیگوتیوفن‌های متصل به سولفور از پنتاتیوفن به بعد خاصیت مغناطیسی مشاهده شده است. (۳) صفحات (۱۱۱) طلا نسبت به صفحات (۱۰۰) طلا اندازه جریان بزرگتری دارند و از نظر زاویه اتصال الیگوتیوفن‌ها به صفحات طلا، زاویه ۹۰ درجه بهتر است. (۴) بیشترین جریان‌های بدست آمده در مولکول‌های کوچکتر، مشاهده شده است. (۵) در بیشتر الیگوتیوفن‌ها با افزایش ولتاژ اعمالی، جریان افزایش می‌یابد. در یک ولتاژ مشخص شده با افزایش طول مولکول (افزایش تعداد حلقه)، جریان کاهش می‌یابد. (۶) تاثیرگذارترین اثر در ترابرد الیگوتیوفن‌ها، اثر طول می‌باشد. در پایان این فصل لازم به ذکر است که، کلیه مواردی که در این فصل ارائه شده است را برای مولکول‌های نوناتیوفن و دکاتیوفن، مورد بررسی قرار داده‌ایم و به علت نبودن فضایی کافی در پایان نامه از آوردن نتایج و نمودارها، این بررسی خودداری کرده‌ایم.

# فصل هشتم

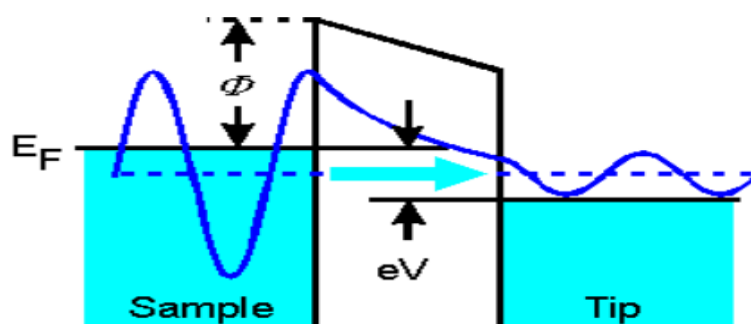
تراپرد اسپنی الیکومرهای

تیوفن در اتصال

**Fe/Oligo Thiophene/Fe**

## ۱-۶ مقدمه

تونل‌زنی الکترون یک پدیده کوانتومی است که در آن بار الکتریکی ممکن است از طریق یک سد پتانسیل نارسانا، از الکتروود اول به الکتروود دوم شارش یابد. یک راه ساده برای درک چگونگی تونل‌زنی این است که یک موج الکترونی را در مواجهه با یک سد پتانسیل مورد مطالعه قرار دهیم. همان‌طور که در شکل (۱-۶) نشان داده شده، بیشترین شدت این موج از سد پتانسیل بازتاب می‌یابد و بخشی از آن به طور نمایی در سد کاهش می‌یابد و اندکی از شدت در سمت راست ظاهر می‌شود. بنابراین الکترون با یک احتمال مشخص در آن طرف سد پتانسیل پیدا خواهد شد. پدیده‌های تونل‌زنی عموماً در ساختارهای سه لایه‌ای به فرم فلز-عایق-فلز دیده می‌شود که به این ساختارها پیوندگاه‌های تونلی می‌گویند. حال برای مطالعه تونلی‌زنی وابسته به اسپین، از فلزات فرومغناطیسی برای تولید اسپین قطبیده در این ساختار سه لایه‌ای استفاده می‌شود که منجر به تشکیل پیوندگاه‌های مغناطیسی تونلی خواهد شد. در مواد فرومغناطیسی جهت‌گیری اکثریت الکترون‌ها توسط جهت‌گیری مغناطش آن‌ها تعیین می‌شود.



شکل ۱-۶: طرح واره‌ای از تونل‌زنی یک موج الکترون از یک سد پتانسیل.

## ۲-۶ اثر $TMR^1$

امروزه مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی (TMR)، توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. علت این

<sup>1</sup> Tunneling Magneto Resistance



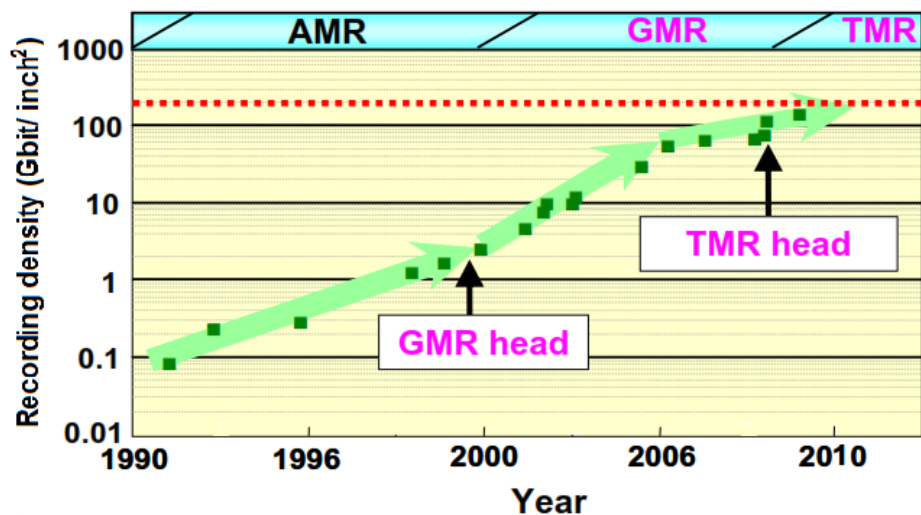
امر، کاربردهای وسیع و مهم این نوع مقاومت به عنوان حسگرهای میدان مغناطیسی<sup>۱</sup> در بسیاری از زمینه‌های مختلف می‌باشد که از جمله می‌توان به کاربردهای زیر اشاره کرد:

۱- کاربرد در کامپیوتر (حافظه‌های با دسترسی تصادفی غیر فرار<sup>۲</sup> و ضبط مغناطیسی<sup>۳</sup> و....)

۲- کاربرد پزشکی (MRI<sup>۴</sup> و تشخیص انواع مولکول‌های بیولوژیکی و....)

۳- کاربرد نظامی (خنثی سازی مین و موشک‌های هوشمند و....)

برای نشان دادن اهمیت این نوع حسگر نسبت به سایر حسگرها، کاربرد حسگر TMR در کامپیوتر را بررسی می‌کنیم. استفاده از حسگرهای بسیار حساس TMR در هد حافظه‌های جانبی<sup>۵</sup> به جای سایر حسگرها، چگالی داده‌های ذخیره شده در حافظه‌های جانبی و متعاقباً سرعت خواندن و نوشتن داده‌ها را افزایش می‌دهد. شکل (۲-۶) منحنی افزایش چگالی ذخیره سازی داده‌ها را بر حسب سال نشان می‌دهد.



شکل ۲-۶: منحنی افزایش چگالی داده‌ها بر حسب سال.

<sup>1</sup> Magnetic Field Sensors  
<sup>2</sup> Non-volatile random-access memories  
<sup>3</sup> Magnetic Recording  
<sup>4</sup> Magnetic Resonance Imaging  
<sup>5</sup> Hard drive disk

همان گونه که مشاهده می‌شود، بیش‌ترین مقدار چگالی ذخیره سازی داده‌ها مربوط به استفاده از حسگرهای مغناطیسی TMR می‌باشد. نتیجه افزایش چگالی داده‌ها، کوچک‌تر شدن اندازه‌ی حافظه‌های جانبی و همچنین افزایش سرعت خواندن و نوشتن در آن‌ها می‌باشد. علاوه بر این در حافظه‌های با دسترسی تصادفی جدید که از خصوصیت اسپینی الکترون به جای بار آن استفاده می‌شود، با قطع برق اطلاعات ذخیره نشده از بین نمی‌رود. به همین دلیل این حافظه‌ها، حافظه‌های دسترسی تصادفی غیر فرار نامیده می‌شود که به راحتی نمی‌سوزند و تقریباً عمر بی‌نهایت دارند. با توجه به مطالب بیان شده در ارتباط با اهمیت مقاومت مغناطیسی تونل زنی، در این فصل به بررسی خواص ترابرد اسپینی در اتصال الکتروود آهن / الیگوتیوفن‌ها / الکتروود آهن و محاسبه مقادیر TMR در این پیوندگاه مولکولی، می‌پردازیم.

### ۳-۶ اثر اسپین فیلترینگ ( $SFE$ )<sup>۱</sup>

اثر اسپین فیلتر برای اولین بار توسط ایساکا در سال ۱۹۷۶ میلادی از طریق تغییر در تونل‌زنی نیم‌رسانای فرومغناطیسی با قطبش اسپینی حدود ۰.۸۹٪، در ساختار سه تایی N/F/N کشف شد. وقتی دو لایه فرومغناطیسی توسط یک لایه نازک غیرمغناطیسی از هم جدا شوند به گونه‌ای که لایه غیرمغناطیسی به‌عنوان یک سد پتانسیل غیرمغناطیسی عمل می‌کند، هنگام عبور جریان اسپینی از این سد پتانسیل الکترون‌هایی با اسپین بالا و پایین نسبت به هم به دلیل شکافتگی تبادل سد غیرمغناطیس، شاهد ارتفاع سدهای متفاوت می‌باشند، در نتیجه الکترون‌هایی با یک جهت اسپینی خاص نسبت به الکترون‌هایی با جهت اسپینی دیگر به راحتی می‌توانند بدون پراکندگی از میان سد غیرمغناطیس تونل زنی کنند و شاهد یک جریان، با قطبش بالای اسپینی بعد از تونل زنی می‌باشیم. که به این اثر، اثر فیلترینگ یا جدا سازی اسپینی می‌گویند. قطعات اسپین فیلترینگ که بتوانند در دمای اتاق عمل کنند مورد توجه هستند [۱۳۴].

<sup>۱</sup> Spin Filtering Effect

## ۴-۶ بررسی مساله

حال به بررسی خواص ترابرد اسپینی الیگوتیوفن ها که توسط سولفور به الکترو د آهن متصل شده اند، می پردازیم. در محاسبات ترابرد طول پیوند S-Fe،  $2/35 \text{ \AA}$  در نظر گرفته می شود [۱۳۵]. Fe یک فلز فرومغناطیس است که دارای شبکه بلوری bcc<sup>۱</sup> با ثابت شبکه  $2/8665 \text{ \AA}$  در دمای اتاق می باشد [۱۳۶-۱۳۷]. TMR افت در مقاومت تونلی در یک اتصال با دو لایه فرومغناطیسی است که جهت گیری نسبی بردارهای مغناطش آن ها از حالت موازی P<sup>۲</sup> به حالت پادموازی AP<sup>۳</sup> تغییر می کند. میزان TMR با رابطه زیر داده می شود [۱۳۸]:

$$TMR = \frac{I_P - I_{AP}}{I_{AP}} \quad (1-6)$$

که در آن  $I_P$  و  $I_{AP}$  به ترتیب جریان موازی و جریان پادموازی می باشند که به صورت زیر بدست می آیند:

$$I_P = I_P^{\uparrow} + I_P^{\downarrow} \quad (2-6)$$

$$I_{AP} = I_{AP}^{\uparrow} + I_{AP}^{\downarrow} \quad (3-6)$$

که در آن جریان های اسپینی بالا را با ( $\uparrow$ ) و جریان های اسپینی پایین را با ( $\downarrow$ ) نشان می دهیم. در ولتاژ صفر چون جریان صفر است، میزان TMR با استفاده از رابطه زیر محاسبه می شود [۱۳۹]:

$$TMR = \frac{T_P(E_F) - T_{AP}(E_F)}{T_{AP}(E_F)} \quad (4-6)$$

که در آن  $T_P(E_F)$  برابر است با، مقدار ضریب عبوری حالت موازی در تراز فرمی و  $T_{AP}(E_F)$  برابر است با، مقدار ضریب عبوری حالت پادموازی در تراز فرمی.

<sup>1</sup> Body-centered cubic

<sup>2</sup> Parallel

<sup>3</sup> Anti Parallel

همچنین میزان فیلترینگ را از رابطه زیر بدست می‌آوریم [۱۳۹]:

$$SFE = \frac{I^{\uparrow} - I^{\downarrow}}{I^{\uparrow} + I^{\downarrow}} \quad (5-6)$$

که در آن جریان‌های اسپینی اسپین بالا را با ( $\uparrow$ ) و جریان‌های اسپینی اسپین پایین را با ( $\downarrow$ ) نشان می‌دهیم. ابتدا قبل از بررسی خواص اسپینی الیگو ترابرد تیوفن‌ها، ضروریست پارامترهای ورودی به منظور انجام محاسبات با دقت کافی تعیین گردد. این پارامترها در جدول ۱-۶ گردآوری شده‌اند.

جدول ۱-۶: پارامترهای ورودی محاسبات خواص ترابرد اسپینی، الیگوتیوفن‌ها

مجموعه پایه‌ها	همگرایی نیرو	روش دینامیک مولکولی (MD)	همگرایی چگالی بار	انرژی قطع	بردار شبکه‌بندی فضای $k$	تابعی همبستگی-تبادلی	تقریب کد
یگانه قطبیده (SZP)	$\leq 0.005 \frac{eV}{\text{\AA}}$	شیب همیوگ (CG)	$10^{-4}$	۳۰۰ Ry	$1 \times 1 \times 3$	GGA(PBE)	شبه پتانسیل

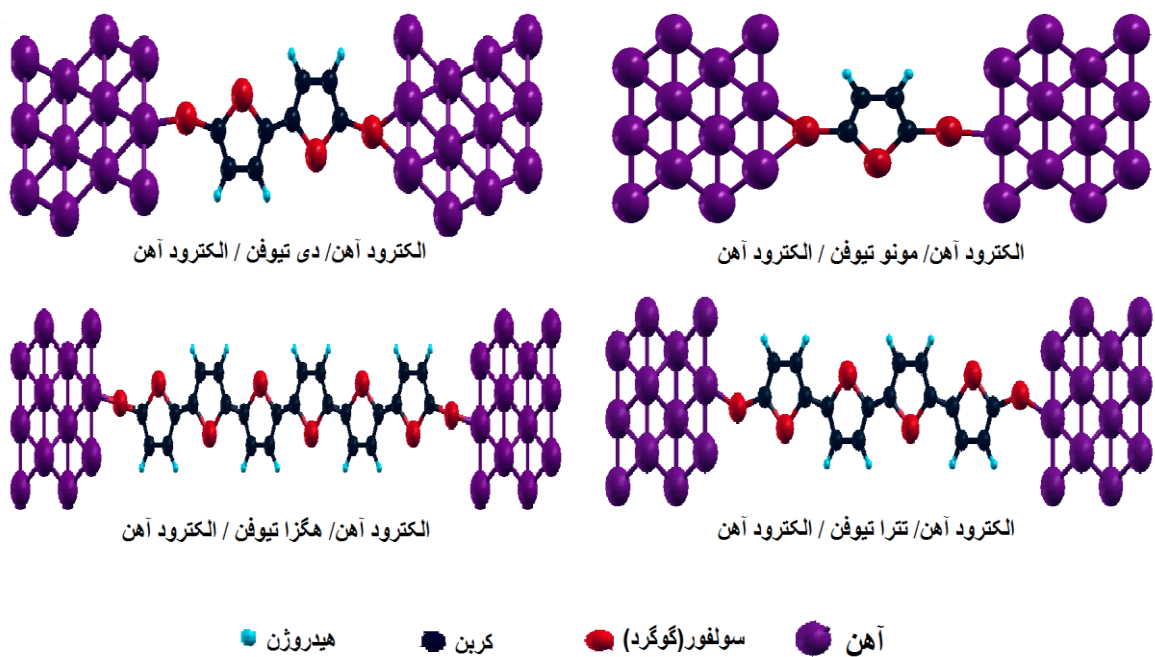
## ۵-۶ بررسی ترابرد اسپینی مولکول n-تیوفن در اتصال Fe/OligoThiophene/Fe

در این قسمت خواص ترابرد اسپینی الیگوتیوفن‌ها را در دو حالت زیر بررسی می‌کنیم:

۱- ترابرد اسپینی الیگوتیوفن‌ها که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن متصل شده‌اند.

۲- ترابرد اسپینی الیگوتیوفن‌ها که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) آهن متصل شده‌اند.

در شکل (۳-۶) برای نمونه ساختارهای پیوندگاه تونلی مولکولی مدل سازی شده برای الیگوتیوفن‌های (مونوتیوفن، دی تیوفن، تتراتیوفن و هگزاتیوفن)، که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) آهن متصل شده‌اند، نشان داده شده است.



شکل ۳-۶: ساختارهای پیوندگاه تونلی مولکولی مدل سازی شده برای الیگوتیوفن‌های (مونوتیوفن، دی تیوفن، تتراتیوفن و هگزاتیوفن)، که با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) آهن متصل شده‌اند.

قبل از ورود به محاسبات برای بعضی از حالت‌های مختلف اتم‌های الکتروُد آهن از نظر اسپین، حروف اختصاری به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

۱- اتم‌های الکتروُد‌های سمت چپ و راست آهن، که دارای اسپین بالا باشند، با  $^1UU$  (موازی) و دارای اسپین پایین باشند، با  $^2DD$  (موازی) نشان می‌دهیم.

۲- اتم‌های الکتروُد سمت چپ آهن که دارای اسپین بالا و اتم‌های الکتروُد سمت راست آهن که دارای اسپین پایین باشند، با  $^3UD$  (پادموازی) نشان می‌دهیم.

۳- اتم‌های الکتروُد سمت چپ آهن که دارای اسپین پایین و اتم‌های الکتروُد سمت راست آهن که دارای اسپین بالا باشند، با  $^4DU$  (پادموازی) نشان می‌دهیم.

<sup>1</sup> Spin(Up-Up)

<sup>2</sup> Spin(Down-Down)

<sup>3</sup> Spin(Up-Down)

<sup>4</sup> Spin(Down-Up)

۴- اتم‌های الکترودهای سمت راست و چپ آهن که دارای حالات اسپینی نباشند، با  $^1NS$  نشان می‌دهیم.

با توجه به تعاریف بالا، معادله (۶-۱) به صورت معادلات زیر تبدیل می‌شود:

$$TMR_{UU} = \frac{I_{UU} - I_{UD}}{I_{UD}} \quad (۶-۶)$$

که در آن  $I_{UU}$  و  $I_{UD}$  برابر است با:

$$I_{UU} = I_{UU}^{\uparrow} + I_{UU}^{\downarrow} \quad (۷-۶)$$

$$I_{UD} = I_{UD}^{\uparrow} + I_{UD}^{\downarrow} \quad (۸-۶)$$

و همچنین به صورت زیر خواهیم داشت:

$$TMR_{DD} = \frac{I_{DD} - I_{DU}}{I_{DU}} \quad (۹-۶)$$

که در آن  $I_{DD}$  و  $I_{DU}$  برابر است با:

$$I_{DD} = I_{DD}^{\uparrow} + I_{DD}^{\downarrow} \quad (۱۰-۶)$$

$$I_{DU} = I_{DU}^{\uparrow} + I_{DU}^{\downarrow} \quad (۱۱-۶)$$

#### ۶-۵-۱ ترابرد اسپینی الیگوتیوفن‌ها متصل شده با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن

با توجه به روش تابع گرین غیرتعادلی و فرمول بندی لاندائور-بوتیکر که در فصل چهارم گفته شد، مقادیر جریان را برای حالت‌های مختلفی از این پیوندگاه مولکولی که در بالا اشاره شد، در بازه ولتاژ اعمالی بین ۱/۵V الی ۱/۵V- بدست آورده و نمودار جریان-ولتاژ را برای الیگوهای مختلف رسم کرده‌ایم. لازم به ذکر است که برای بدست آوردن مقادیر جریان همانند فصل قبل مراحل گفته شده را

---

<sup>1</sup> Non Spin

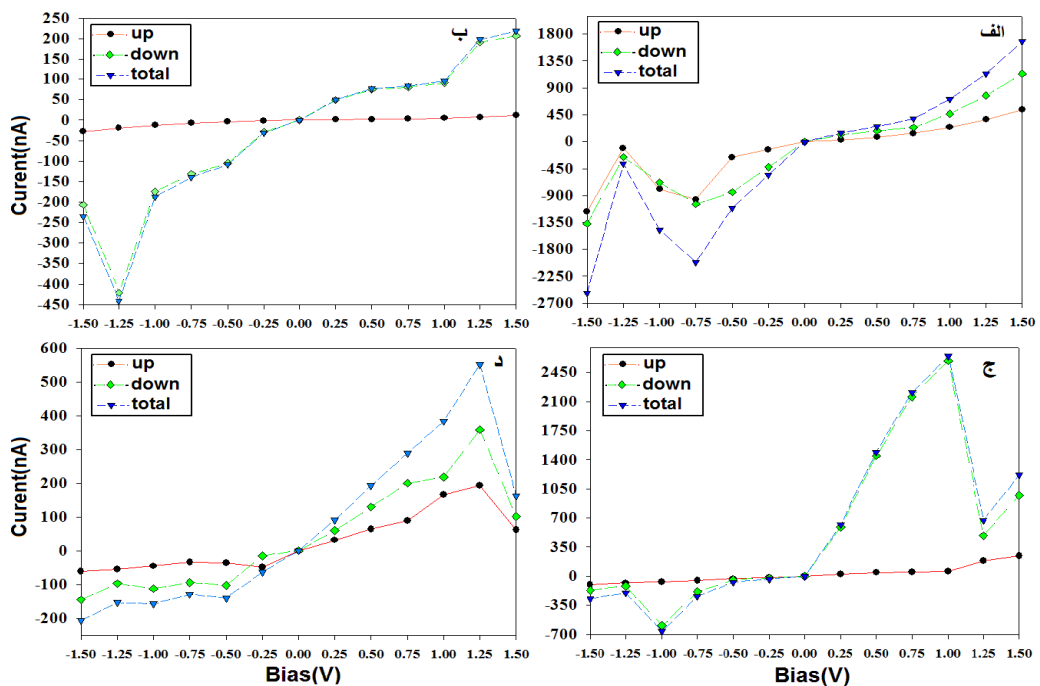
انجام داده‌ایم، با این تفاوت که به جای الکترودهای غیرمغناطیسی طلا از الکترودهای فرومغناطیسی آهن بهره برده‌ایم. جریان‌های بدست آمده از کلیه ساختارهای الیگوتیوفن‌ها که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UU متصل شده‌اند، در جدول ۲-۶ گزارش شده و در شکل (۴-۶) نمایش داده شده است.

جدول ۲-۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UU متصل‌اند.

ولتاژ (V)	جریان $I_{UU}^{\uparrow}$ منو تیوفن (nA)	جریان $I_{UU}^{\downarrow}$ مونو تیوفن (nA)	جریان $I_{UU}^{\uparrow}$ دی تیوفن (nA)	جریان $I_{UU}^{\downarrow}$ دی تیوفن (nA)	جریان $I_{UU}^{\uparrow}$ تترا تیوفن (nA)	جریان $I_{UU}^{\downarrow}$ تترا تیوفن (nA)	جریان $I_{UU}^{\uparrow}$ هگزا تیوفن (nA)	جریان $I_{UU}^{\downarrow}$ هگزا تیوفن (nA)
V=۱/۵	۵۳۴/۰۴۴	۱۱۳۶/۷۲	۱۱/۸۸۶۷	۲۰۶/۷۳۳	۲۴۴/۵۳۸	۹۷۱/۴۸۱	۶۰/۹۵۰۳	۱۰۰/۹۳۰
V=۱/۲۵	۳۶۸/۷۲۴	۷۷۱/۰۷۹	۷/۰۹۹۹۵	۱۹۱/۱۹۶	۱۸۴/۵۱۲	۴۸۵/۱۰۶	۱۹۳/۰۶۳	۳۵۸/۴۳۱
V=۱/۰	۲۴۳/۳۵۸	۴۶۵/۸۴۳	۴/۴۶۲۶۶	۹۰/۸۷۹۵	۵۴/۸۳۲۲	۲۵۸۹/۱۳	۱۶۵/۳۸۳	۲۱۸/۴۳۵
V=۰/۷۵	۱۳۹/۰۵۴	۲۳۸/۷۲۳	۲/۸۳۱۵۴	۸۰/۲۹۰۶	۵۱/۵۷۳۰	۲۱۵۶/۲۹	۸۸/۸۶۶۵	۲۰۰/۱۱۷
V=۰/۵	۷۵/۲۶۰۷	۱۸۲/۵۰۱	۱/۸۵۲۶۵	۷۴/۷۴۸۶	۴۵/۰۶۸۶	۱۴۴۷/۳۸	۶۳/۲۲۳۴	۱۲۹/۶۳۷
V=۰/۲۵	۲۸/۲۱۳۶	۱۱۴/۱۳۹	۰/۹۶۵۸۰	۴۸/۳۷۷۸	۲۷/۲۴۰۹	۵۹۲/۲۶۳	۳۱/۵۷۱۴	۵۹/۳۲۱۷
V=۰	.	.	.	.	.	.	.	.
V=-۰/۲۵	-۱۳۱/۹۷	-۴۲۳/۸۹	-۱/۴۸۰۶	-۲۹/۳۳۶	-۱۳/۶۹۷	-۲۱/۷۴۵	-۴۸/۰۸۱	-۱۴/۹۹۶
V=-۰/۵	-۲۶۱/۳۹	-۸۴۷/۵۷	-۳/۹۹۷۱	-۱۰۵/۱۱	-۳۰/۱۱۸	-۴۳/۲۵۴	-۳۷/۱۹۷	-۱۰۲/۸۹
V=-۰/۷۵	-۹۶۷/۹۸	-۱۰۴۶/۵	-۷/۵۳۰۶	-۱۳۱/۷۱	-۵۳/۸۹۵	-۱۸۷/۷۷	-۳۵/۰۲۰	-۹۳/۹۳۵
V=-۱/۰	-۷۹۷/۸۷	-۶۸۳/۲۵	-۱۲/۸۳۳	-۱۷۴/۸۲	-۶۷/۱۴۹	-۵۳۹/۹۸	-۴۵/۳۹۱	-۱۱۲/۱۸
V=-۱/۲۵	-۱۰۹/۱۵	-۲۵۷/۲۳	-۱۹/۸۳۴	-۴۲۱/۴۶	-۸۱/۳۵۹	-۱۱۹/۸۷	-۵۵/۶۴۰	-۹۷/۵۰۸
V=-۱/۵	-۱۱۶۴/۱	-۱۳۷۱/۲	-۲۸/۱۰۷	-۲۰۷/۲۵	-۱۰۱/۷۱	-۱۶۹/۹۵	-۶۲/۰۴۱	-۱۴۵/۱۱

از مشاهده جدول ۲-۶ و شکل (۴-۶) نتایج زیر حاصل می‌شود: (۱) در اکثر جریان‌های حاصل شده با افزایش ولتاژها (مستقیم و معکوس)، اندازه جریان افزایش می‌یابد. (۲) در بیشتر موارد جریان اسپین پایین بزرگتر از جریان اسپین بالا می‌باشد. (۳) در ولتاژهای  $V = -1/25$  در مونوتیوفن در حالت‌های اسپین بالا و پایین، NDR مشاهده شده است. (۴) برای دی تیوفن در ولتاژ  $V = -1/5$  اسپین پایین، NDR مشاهده شده است. (۵) برای تتراتیوفن در ولتاژ  $V = \pm 1/25$  اسپین پایین، NDR مشاهده

شده است. ۶) برای هگزاتیوفن در ولتاژهای  $V=1/5$  و  $V=-0/75$  در حالت‌های اسپین بالا و پایین، NDR مشاهده شده است. ۷) روند جریان کل به غیر از دی‌تیوفن با افزایش طول پیوندگاه تونلی (افزایش تعداد حلقه مولکول)، روند کاهشی دارد و جریان کاهش می‌یابد. ۸) برای دی‌تیوفن و تتراتیوفن اختلاف بین جریان‌های اسپین بالا و پایین بخصوص در ولتاژهای میانی زیاد است (جریان اسپین پایین بزرگتر از جریان اسپین بالا) اما در مونوتیوفن و هگزاتیوفن جریان اسپین بالا و پایین اختلاف زیادی ندارند.

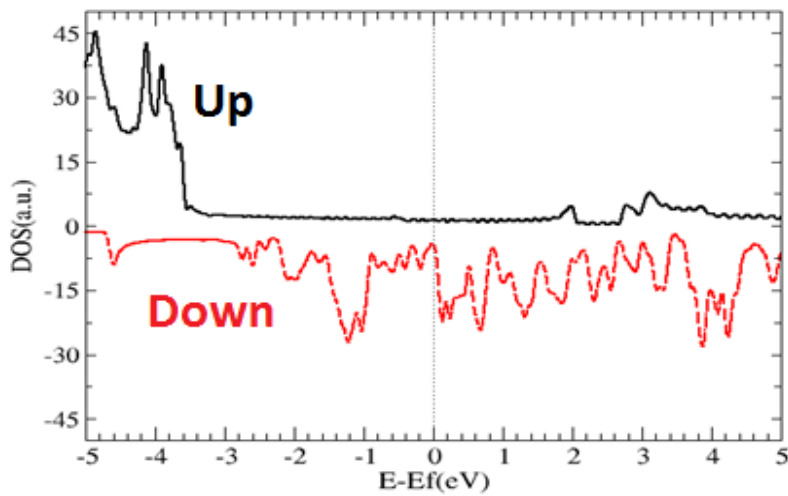


شکل ۴-۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به لیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت  $UU$  متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن ج) تتراتیوفن د) هگزاتیوفن

بررسی جریان‌های خروجی در حالت آرایش اسپینی موازی ( $UU$ )، نشان داد که جریان اسپینی پایین در اکثر ولتاژهای اعمالی بیشتر از جریان اسپینی بالا می‌باشد. با توجه به قله‌های که در پنجره ولتاژ نمودار ضریب تراپردی ایجاد شده، که ناشی از حضور چگالی حالت‌های الکتروود ناحیه پراکندگی است. شکل (۴-۵)، که مربوط به چگالی حالت‌های کلی الکتروود آهن در حالت اسپین بالا است، نشان می‌دهد که سهم چگالی حالت‌های اسپین پایین نسبت به اسپین بالا، در اطراف تراز

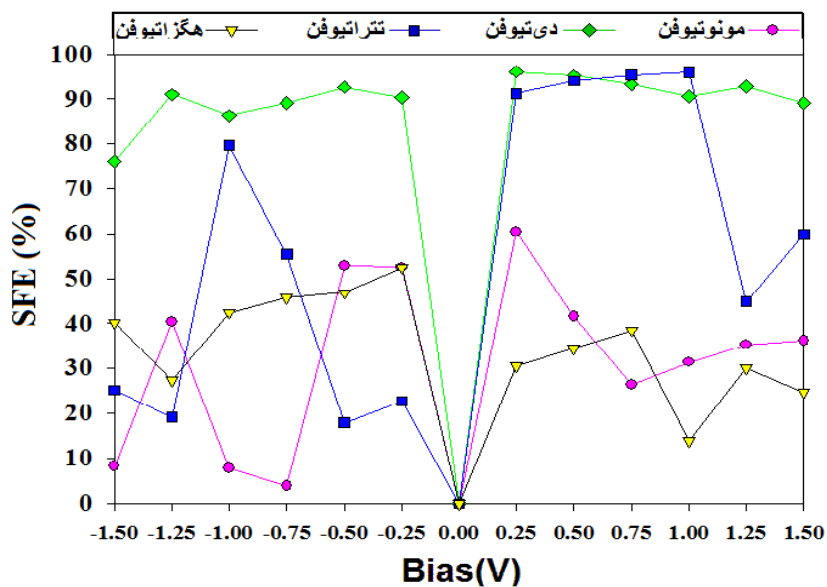


فرمی، بیشینه است که انتظار می‌رود سهم بیشتر جریان خروجی برای اسپین پایین باشد.



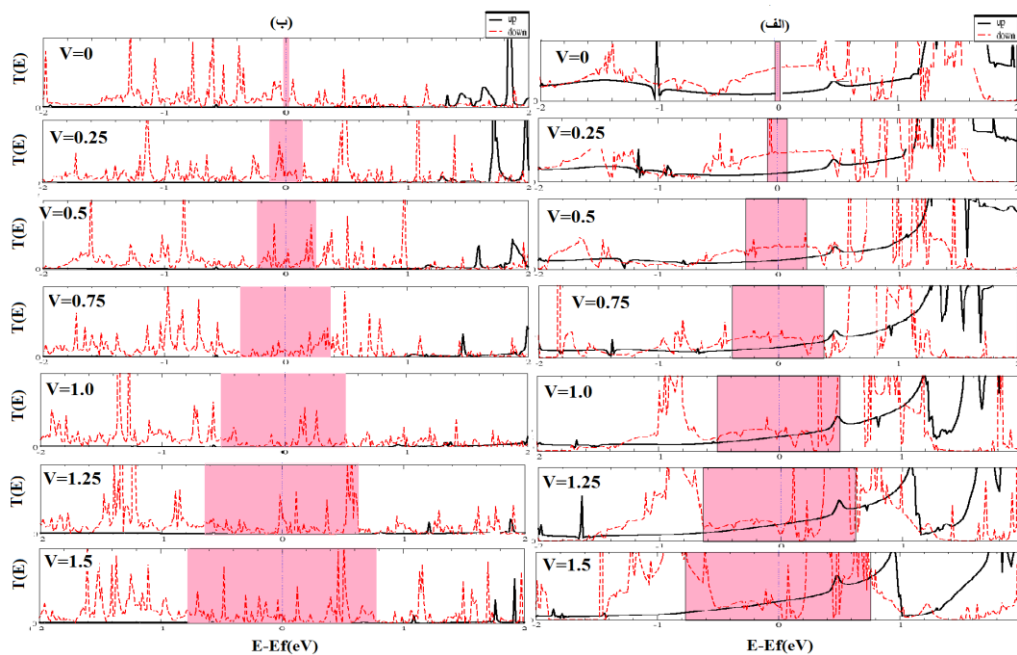
شکل ۶-۵: چگالی حالت‌های کلی الکتروآهن در حالت اسپین بالا.

درصدهای فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت UU را در شکل (۶-۶) نشان داده شده است. شکل (۶-۶) نشان می‌دهد که بیشترین درصد فیلترینگ اسپینی، مربوط به الیگو دی‌تیوفن و تتراتیوفن می‌باشد که علت آن اختلاف زیاد بین جریان اسپین بالا نسبت به جریان اسپین پایین در این دو الیگوتیوفن است.



شکل ۶-۶: درصد SFE های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UU متصل‌اند.

فیلترینگ و NDR را می‌توان با روش مشابه توجیه نمود، به این معنا که دلیل فیلترینگ‌های مختلف در ولتاژهای متفاوت و بروز NDR در یک ولتاژ خاص، ناشی از عدم تطابق ترازهای الکتروود و ناحیه پراکنده است. این عدم تطابق باعث می‌شود الکترون تراز برای فرود در ناحیه پراکنده یا در الکتروود سمت راست پیدا نکند که در هر صورت موجب فیلتر شدن یک جریان اسپینی به خصوص می‌شود. با توجه به اینکه جریان اسپین بالا در دی‌تیوفن فیلتر شده است بنابراین می‌توان پیش‌بینی نمود که همترازی بین الکتروودها و ناحیه پراکنده برای ترازهای اسپین بالا رخ نداده است. در مورد اسپین پایین پیش‌بینی برعکس است. به همین ترتیب پدیده‌ی NDR نیز ناشی از کاهش تطابق ترازها در سه ناحیه مورد بررسی است، مسئول این کاهش به وضوح جابجایی ترازها بدلیل اعمال اختلاف پتانسیل به الکتروودهاست. این تحلیل با بررسی نمودار ضریب عبور کاملاً مطابقت دارد. همانطور که قبلاً گفته شده، برای ولتاژ صفر نمودار  $T(E)$  بسیار مشابه نمودار DOS می‌باشد که ناشی از یکسان بودن هر سه ناحیه است. در شکل (۶-۷) برای نمونه، ضریب تراورد ولتاژهای مستقیم الیگوتیوفن‌های، مونوتیوفن و دی‌تیوفن را نشان داده شده است.



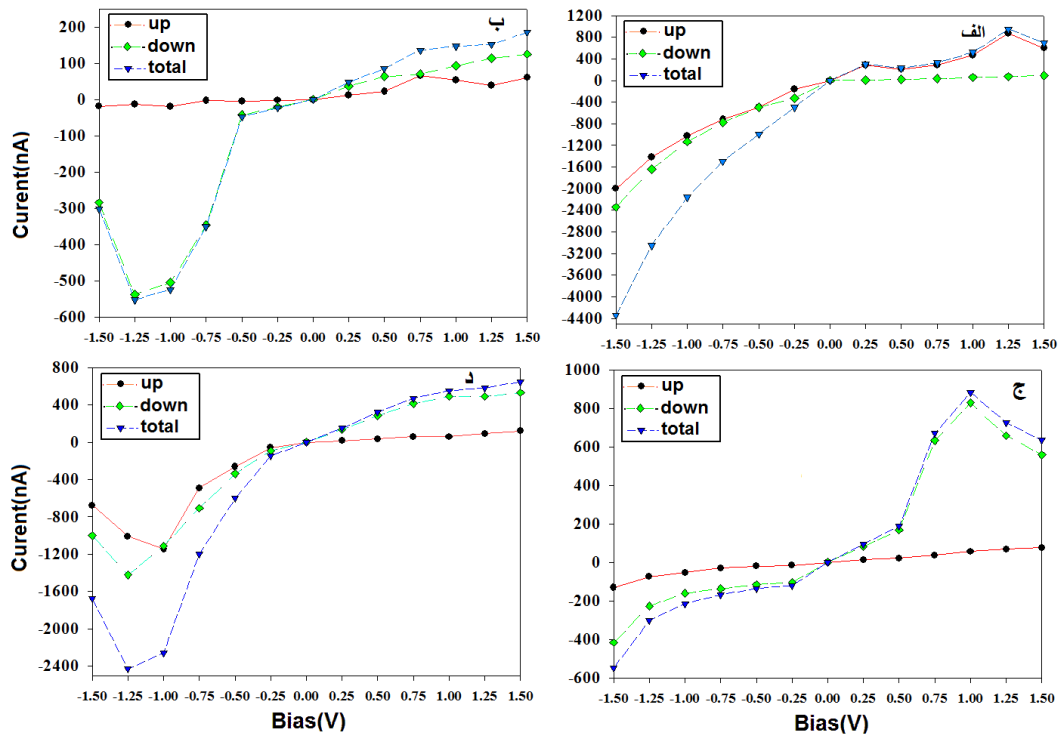
شکل ۶-۷: ضریب تراوردی ولتاژهای مستقیم، الیگوتیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت موازی UU متصل شده‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن

جریان‌های بدست آمده از کلیه ساختارهای الیگوتیوفن‌ها که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UD متصل شده‌اند، در جدول ۳-۶ گزارش شده است و در شکل (۸-۶) نمایش داده شده است.

جدول ۳-۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UD متصل‌اند.

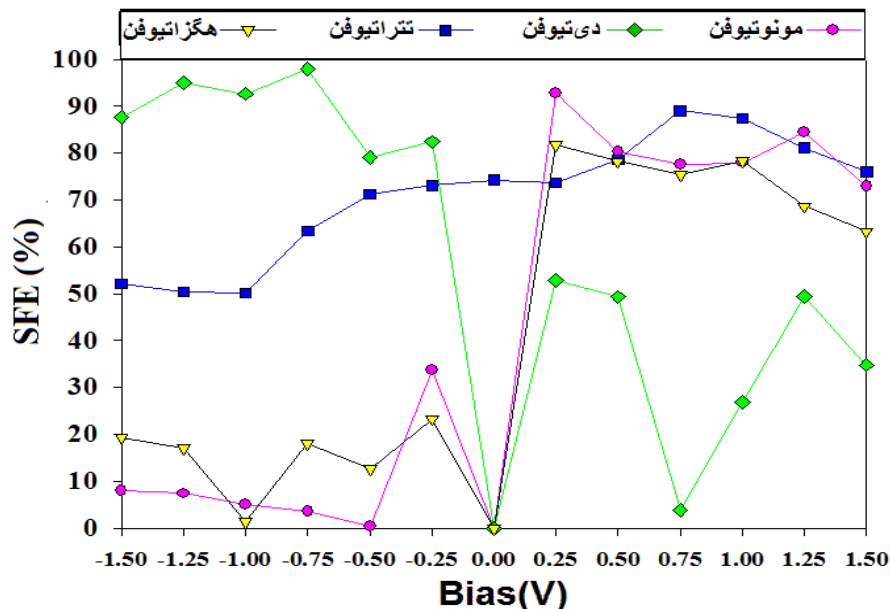
ولتاژ (V)	جریان $I_{UD}^{\uparrow}$ منو تیوفن (nA)	جریان $I_{UD}^{\downarrow}$ مونو تیوفن (nA)	جریان $I_{UD}^{\uparrow}$ دی تیوفن (nA)	جریان $I_{UD}^{\downarrow}$ دی تیوفن (nA)	جریان $I_{UD}^{\uparrow}$ تترا تیوفن (nA)	جریان $I_{UD}^{\downarrow}$ تترا تیوفن (nA)	جریان $I_{UD}^{\uparrow}$ هگزا تیوفن (nA)	جریان $I_{UD}^{\downarrow}$ هگزا تیوفن (nA)
V=۱/۵	۵۹۹/۶۳۷	۹۴/۰۳۷۱	۶۰/۵۲۶۳	۱۲۵/۱۴۷	۷۶/۱۱۴۴	۵۵۸/۵۵۷	۱۱۹/۰۶۱	۵۲۹/۴۳۳
V=۱/۲۵	۸۷۴/۹۶۶	۷۳/۷۱۸۸	۳۸/۴۵۵۹	۱۱۳/۴۸۲	۶۸/۵۹۱۵	۶۵۷/۲۸۱	۹۱/۱۲۵۷	۴۹۰/۹۶۸
V=۱/۱۰	۴۶۵/۵۹۶	۵۷/۷۰۰۲	۵۳/۶۵۰۲	۹۳/۰۴۳۸	۵۵/۴۰۶۶	۸۲۸/۱۸۲	۵۹/۹۳۱۰	۴۹۲/۹۸۰
V=۰/۷۵	۲۸۹/۰۶۷	۳۶/۵۶۸۲	۶۵/۳۲۴۲	۷۰/۶۳۸۳	۳۶/۷۸۴۲	۶۳۲/۸۷۲	۵۷/۸۲۶۰	۴۱۳/۱۱۸
V=۰/۵	۲۰۸/۴۵۴	۲۲/۸۶۲۵	۲۱/۶۳۶۵	۶۳/۷۳۰۷	۲۰/۲۲۳۹	۱۶۸/۶۲۵	۳۴/۸۳۵۹	۲۸۵/۵۶۱
V=۰/۲۵	۲۹۰/۴۰۳	۱۰/۷۹۵۲	۱۱/۲۸۴۶	۳۶/۶۴۵۸	۱۲/۴۳۱۳	۸۲/۲۶۶۰	۱۳/۵۶۷۳	۱۳۵/۵۳۶
V=۰	.	.	.	.	.	.	.	.
V=-۰/۲۵	-۱۶۲/۴۵	-۳۲۸/۴۴	-۱۹۷۵۸	-۲۰/۴۸۰	-۱۶/۱۶۶	-۱۰۴/۲۴	-۵۶/۷۳۳	-۹۱/۱۲۲
V=-۰/۵	-۴۹۳/۳۶	-۴۹۷/۵۳	-۴/۹۶۹۶	-۴۲/۵۱۸	-۱۹/۵۰۳	-۱۱۶/۰۱	-۲۶۲/۵۲	-۳۳۸/۸۰
V=-۰/۷۵	-۷۱۹/۸۲	-۷۷۳/۱۲	-۳/۷۰۹۴	-۳۴۶/۸۴	-۳۰/۸۶۳	-۱۳۷/۵۴	-۴۹۰/۹۰	-۷۰۶/۴۶
V=-۱/۱۰	-۱۰۲۵/۱	-۱۱۳۲/۹	-۱۹/۲۵۲	-۵۰۵/۵۳	-۵۳/۴۸۵	-۱۶۱/۲۲	-۱۱۴۳/۹	-۱۱۱۰/۹
V=-۱/۲۵	-۱۴۱۱/۷	-۱۶۳۷/۴	-۱۳/۸۱۳	-۵۳۸/۴۶	-۷۴/۹۷۸	-۲۲۷/۲۲	-۱۰۰۸/۲	-۱۴۲۲/۴
V=-۱/۵	-۱۹۹۹/۸	-۲۳۴۶/۴	-۱۸/۶۸۲	۲۸۵/۰۱۷	-۱۳۱/۱۵	-۴۱۷/۱۲	-۶۷۷/۷۷	-۱۰۰۰/۹

از مشاهده جدول ۳-۶ و شکل (۸-۶) به نتایج زیر می‌رسیم: (۱) در اکثر موارد با افزایش ولتاژ در هر الیگو خاص، جریان نیز روند افزایشی دارد. (۲) در بیشتر جریان‌ها، اندازه جریان اسپین پایین بیشتر از جریان اسپین بالا است، به استثنا جریان‌های مونوتیوفن در حالت ولتاژهای مستقیم. (۳) در موارد زیر پدیده NDR مشاهده شد: دی تیوفن ( $V = \pm 1/25$ ) در اسپین بالا و  $V = -1/5$  در اسپین پایین) و تترا تیوفن ( $V = 1/25$ ) در اسپین پایین).



شکل ۶-۸: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UD متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن ج) تتراتیوفن د) هگزاتیوفن

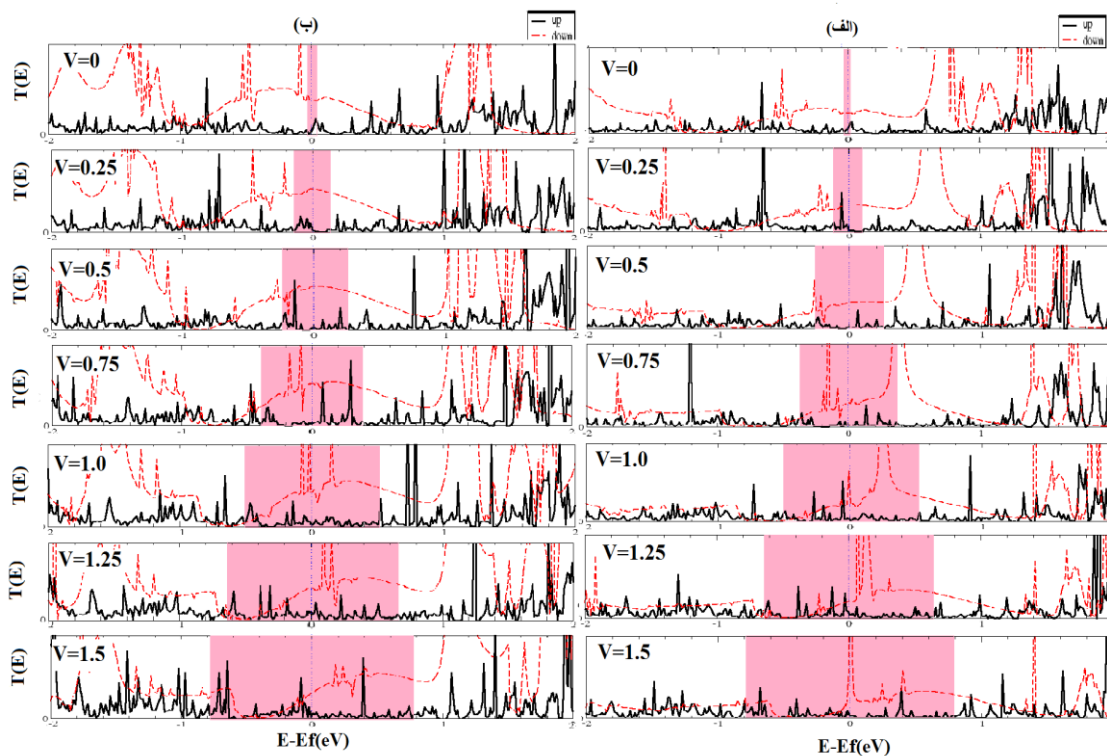
درصدهای فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت UD را در شکل (۶-۹) نشان داده می‌شود.



شکل ۶-۹: درصد SFEهای بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت UD متصل‌اند.

شکل (۶-۹) نشان می‌دهد که بیشترین درصد فیلترینگ اسپینی در ولتاژ معکوس، مربوط به دی‌تیوفن

و تتراتیوفن می‌باشد و اینکه در بیشتر مقادیر (به جز دی‌تیوفن) درصد فیلترینگ اسپینی ولتاژهای مستقیم در هر الیگو بیشتر از ولتاژهای معکوس می‌باشد. بیشترین درصد فیلترینگ اسپینی در ولتاژ مستقیم، مربوط به تتراتیوفن و مونوتیوفن می‌باشد. در شکل (۶-۱۰) بدلیل نبود فضای کافی در پایان نامه، از ۸ حالت بدست آمده (۴ حالت ولتاژ مستقیم و ۴ حالت ولتاژ معکوس)، برای نمونه ضریب ترابرد ولتاژهای مستقیم الیگوتیوفن‌های، تتراتیوفن و هگزاتیوفن را نشان داده‌ایم.

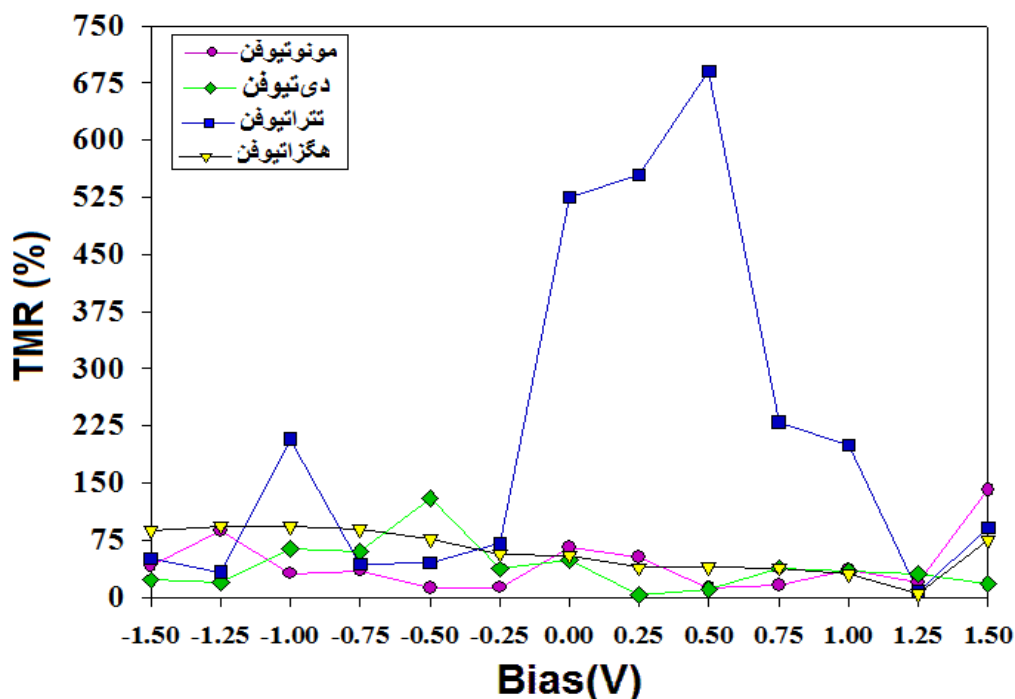


شکل ۶-۱۰: ضریب ترابرد ولتاژهای مستقیم، الیگوتیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت موازی UD متصل شده‌اند. الف) تتراتیوفن ب) هگزاتیوفن

شکل (۶-۱۰) نشان می‌دهد که در اکثر موارد سطح زیر نمودار ضریب ترابرد اسپین پایین نسبت به اسپین بالا در پنجره انتگرال‌گیری بزرگتر است (سهام عمده‌ای از کانال‌ها در پنجره ولتاژ مربوط به اسپین پایین است) که نشانگر جریان بیشتر اسپین پایین می‌باشد. با توجه به جدول‌های ۶-۲ و ۶-۳ و با استفاده از معادلات (۶-۴ و ۶-۶ و ۶-۷ و ۶-۸) مقادیر  $TMR_{UU}$  بدست آمده را در جدول ۶-۴ گزارش کرده‌ایم و در شکل (۶-۱۱) نشان داده شده است.

جدول ۶-۴: مقادیر  $TMR_{UU}$  بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن متصل‌اند.

ولتاژ (V)	$TMR_{UU}$ منو تیوفن (%)	$TMR_{UU}$ دی تیوفن (%)	$TMR_{UU}$ تترا تیوفن (%)	$TMR_{UU}$ هگزا تیوفن (%)
V=۱/۵	۱۴۰/۸۵۸۲	۱۷/۷۴۴	۹۱/۵۹۹۱	۷۵/۰۳۷۴
V=۱/۲۵	۲۰/۱۴۵۷	۳۰/۴۴۵۲	۷/۷۴۹۹	۵/۲۵۶۸
V=۱/۰	۳۵/۵۲۵۷	۳۵/۰۰۶۱	۱۹۹/۲۳۰۲	۳۰/۵۸۲۲
V=۰/۷۵	۱۶/۰۱۲۸	۳۸/۸۶۳۹	۲۲۹/۷۰۲۱	۳۸/۶۳۷۴
V=۰/۵	۱۱/۴۳۲۶	۱۰/۲۶۸۶	۶۹۰/۲۸۷۶	۳۹/۸۰۵۸
V=۰/۲۵	۵۲/۷۳۷۹	۲/۹۴۸۶	۵۵۴/۱۹۳۸	۳۹/۰۴۰۴
V=۰	۶۶/۰۱۵۸	۴۹/۴۸۲۸	۵۲۵/۳۸۵	۵۵/۱۴۴۵
V=-۰/۲۵	۱۳/۲۳۳۱	۳۷/۲۳۲۹	۷۰/۵۶۵۹	۵۷/۳۳۷۵
V=-۰/۵	۱۱/۹۱۶۶	۱۲۹/۷۶۳۴	۴۵/۸۵۵۹	۷۶/۷۰۳۵
V=-۰/۷۵	۳۴/۹۳۷۸	۶۰/۲۷۸۲	۴۳/۴۰۹۶	۸۹/۲۳۰۱
V=-۱/۰	۳۱/۳۶۷۵	۶۴/۲۲۸۳	۲۰۷/۹۱۲۵	۹۳/۰۱۱۷
V=-۱/۲۵	۸۷/۹۸۳۸	۲۰/۰۹۵۴	۳۳/۴۰۹۶	۹۳/۶۹۹۲
V=-۱/۵	۴۱/۶۶۵۱	۲۲/۵۰۱۱	۵۰/۴۵۱۳	۸۷/۶۵۹۹



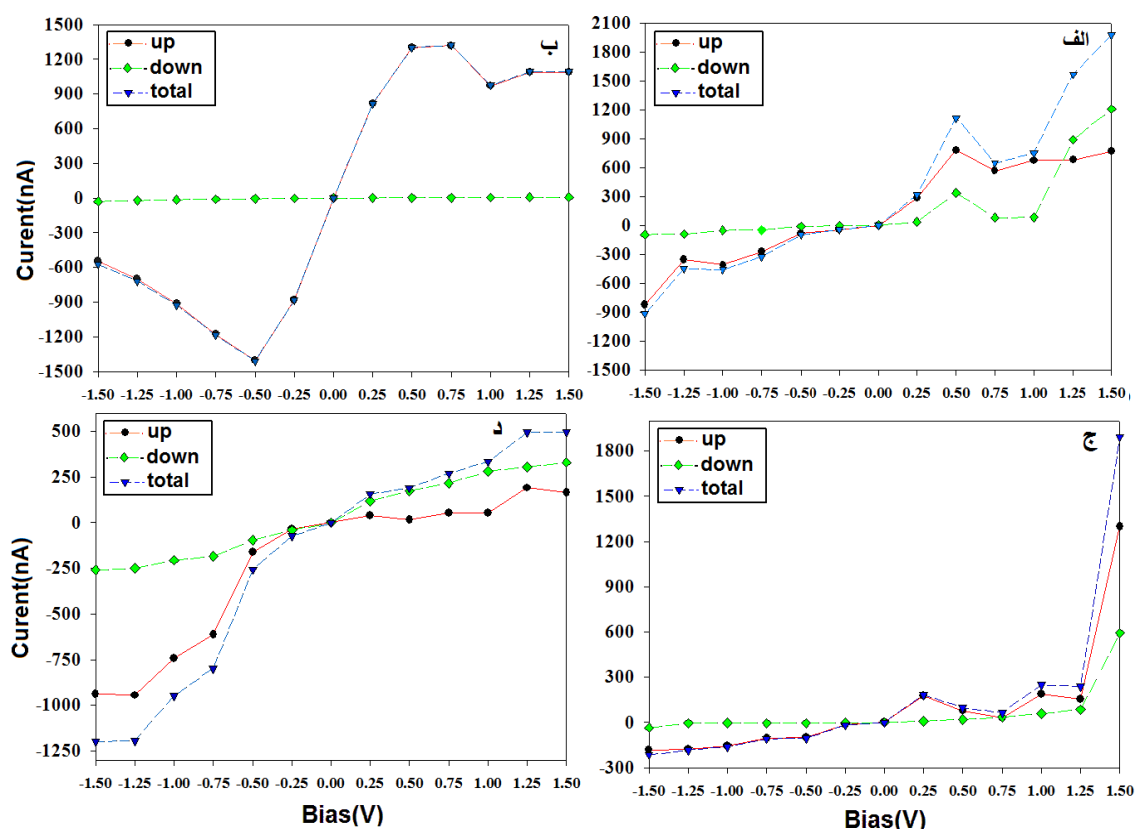
شکل ۶-۱۱:  $TMR_{UU}$  های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن متصل‌اند.

جدول و شکل صفحه قبل، نشان می‌دهند که بیشترین مقادیر TMR مربوط به تتراتیوفن در ولتاژهای مستقیم است که بیشترین مقدار TMR در این حالت مربوط به ولتاژ  $V=0/5$  که برابر ۶۹۰ درصد می‌باشد که مقدار نسبتاً خوب و بالایی هست که منجر به این می‌شود که این الیگو کاندید مناسبی برای بکاربردن در سلول‌های حافظه‌های مغناطیسی، حسگرها، هد خواندن داده‌ها و وسایل اسپینترونیکی در مقیاس نانو باشد و بیشتر مقادیر TMR در این حالت زیر ۱۰۰ درصد می‌باشند. جریان‌های کلیه ساختارهای الیگوتیوفن‌های که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت DD متصل شده‌اند، در جدول ۵-۶ گزارش شده است و در شکل (۶-۱۲) نشان داده شده است.

جدول ۵-۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت DD متصل‌اند.

ولتاژ (V)	جریان $I_{DD}^{\uparrow}$ منو تیوفن (nA)	جریان $I_{DD}^{\downarrow}$ مونو تیوفن (nA)	جریان $I_{DD}^{\uparrow}$ دی تیوفن (nA)	جریان $I_{DD}^{\downarrow}$ دی تیوفن (nA)	جریان $I_{DD}^{\uparrow}$ تترا تیوفن (nA)	جریان $I_{DD}^{\downarrow}$ تترا تیوفن (nA)	جریان $I_{DD}^{\uparrow}$ هگزاتیوفن (nA)	جریان $I_{DD}^{\downarrow}$ هگزاتیوفن (nA)
$V=1/5$	۷۶۶/۰۴۶	۱۲۰۵/۹۳	۱۰۸۷/۷۸	۸/۷۱۰۷۳	۱۳۰۰/۳۱	۵۹۱/۹۷۳	۱۶۴/۸۳۰	۳۲۹/۲۴۵
$V=1/25$	۶۷۸/۱۷۰	۸۸۸/۰۰۲	۱۰۸۶/۹۲	۶/۵۷۶۵۵	۱۵۳/۴۵۰	۸۵/۳۸۸۸	۱۹۱/۱۳۱	۳۰۴/۰۲۹
$V=1/0$	۶۷۴/۳۷۶	۸۰/۳۰۱۷	۹۷۰/۶۸۹	۵/۰۱۱۴۵	۱۹۰/۷۳۲	۵۸/۲۴۶۳	۵۳/۴۰۰۲	۲۸۱/۱۱۲
$V=0/75$	۵۶۲/۲۰۳	۷۸/۸۰۳۰	۱۳۱۷/۴۹	۳/۶۹۰۶۰	۲۹/۷۲۸۶	۳۵/۶۴۷۴	۵۳/۶۱۳۰	۲۱۶/۹۲۳
$V=0/5$	۷۷۹/۰۰۵	۳۳۵/۶۳۷	۱۲۹۸/۵۴	۲/۶۷۳۴۸	۷۷/۸۶۳۲	۱۹/۵۸۸۴	۱۵/۴۷۹۸	۱۷۵/۱۲۹
$V=0/25$	۲۸۱/۲۶۲	۳۴/۷۹۰۳	۸۱۳/۹۹۷	۱/۴۳۴۴۷	۱۷۵/۶۷۷	۷/۲۳۱۴۰	۳۹/۳۵۸۵	۱۱۷/۹۶۰
$V=0$	.	.	.	.	.	.	.	.
$V=-0/25$	-۴۳/۱۶۹	-۴/۸۳۱۷	-۸۷۸/۷۷	-۲/۰۰۲۱	-۱۳/۶۹۶	-۳/۳۹۷۱	-۴۱/۰۶۲	-۳۲/۳۵۰
$V=-0/5$	-۸۶/۶۶۳	-۱۳/۰۸۹	-۱۴۰۴/۳	-۵/۰۳۰۱	-۱۰/۱/۳۲	-۵/۰۴۸۲	-۱۶۰/۹۹	-۹۵/۹۴۹
$V=-0/75$	-۲۷۲/۷۳	-۴۹/۷۷۵	-۱۱۷۶/۷	-۸/۸۴۰۵	-۱۰/۲/۸۱	-۵/۲۵۳۴	-۶۱۳/۴۹	-۱۸۴/۴۷
$V=-1/0$	-۴۱۰/۰۶	-۵۲/۵۵۱	-۹۱۱/۳۱	-۱۴/۱۴۶	-۱۵۴/۸۵	-۴/۵۳۴۱	-۷۴۱/۴۵	-۲۰۵/۶۸
$V=-1/25$	-۳۵۶/۲۲	-۹۳/۵۰۰	-۶۹۸/۵۹	-۲۰/۴۲۱	-۱۷۷/۷۳	-۵/۸۹۸۷	-۹۴۵/۱۹	-۲۴۹/۰۳
$V=-1/5$	-۸۲۴/۱۷	-۹۷/۲۸۸	-۵۴۵/۲۹	-۲۸/۱۱۹	-۱۸۰/۷۸	-۳۴/۲۹۵	-۹۳۹/۳۴	-۲۵۸/۷۹

از مشاهده جدول ۵-۶ و شکل (۶-۱۲) به نتایج زیر می‌رسیم: (۱) در بیشتر جریان‌ها، اندازه جریان اسپین بالا بیشتر از جریان اسپین پایین است، به استثنا جریان‌های مونوتیوفن در حالت ولتاژهای مستقیم بالا و جریان‌های هگزاتیوفن در حالت ولتاژهای مستقیم. (۲) در موارد زیر پدیده NDR مشاهده شد: مونوتیوفن ( $V = -1/25$  در اسپین بالا و  $V = 0/75$  در اسپین پایین)، تتراتیوفن ( $V = 1/0$  در اسپین بالا) و هگزاتیوفن ( $V = 0/5$  در اسپین بالا). (۳) در دی‌تیوفن اختلاف جریان بین اسپین بالا و پایین خیلی زیاد می‌باشد که این اختلاف، منجر به فیلترینگ اسپینی در حدود ۱۰۰ درصد می‌شود.

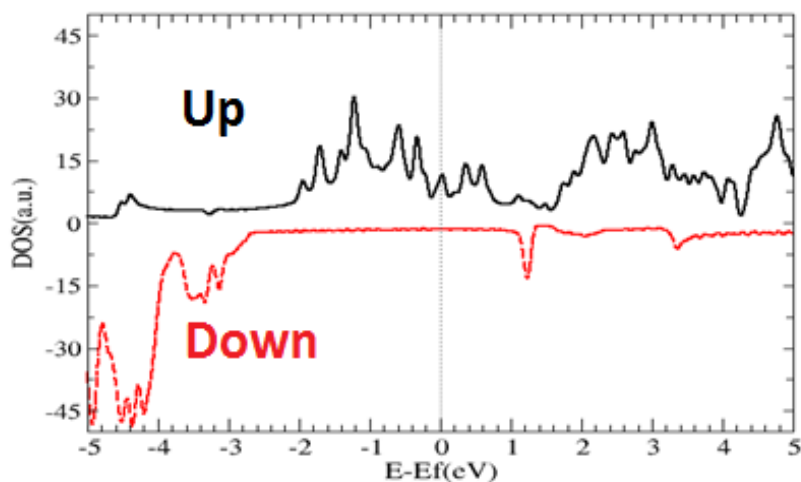


شکل ۶-۱۲: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت DD متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن ج) تتراتیوفن د) هگزاتیوفن

بررسی جریان‌های خروجی در حالت آرایش اسپینی موازی (DD)، نشان داد که جریان اسپینی پایین در اکثر ولتاژهای اعمالی بیشتر از جریان اسپینی بالا می‌باشد. با توجه به قله‌های که در پنجره ولتاژ نمودار ضریب تراپردی ایجاد شده، که ناشی از حضور چگالی حالت‌های الکترونی و ناحیه

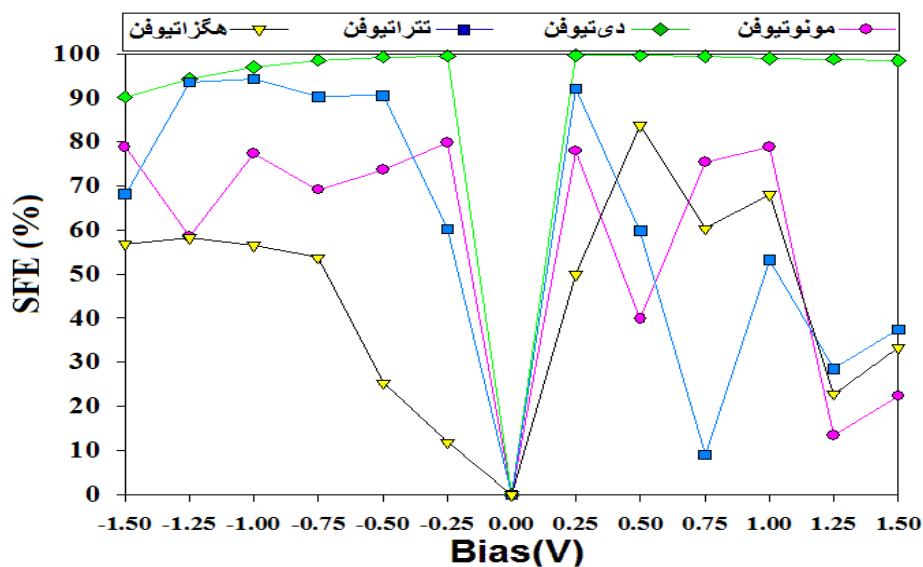


پراکندگی است. با توجه به شکل (۶-۱۳)، که مربوط به چگالی حالت‌های کلی الکتروده آهن در حالت اسپین پایین است. مشاهده می‌شود که سهم چگالی حالت‌های اسپین بالا نسبت به اسپین پایین، در اطراف تراز فرمی، بیشینه است که انتظار می‌رود سهم بیشتر جریان خروجی برای اسپین بالا باشد.



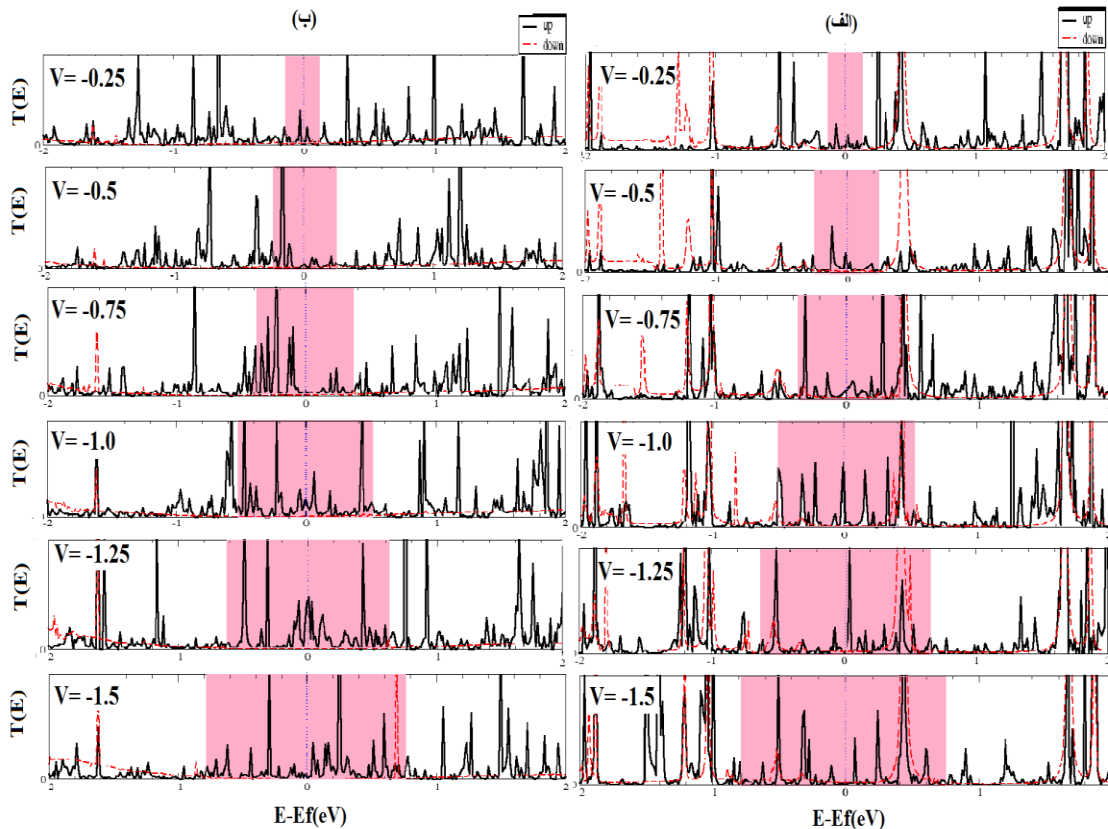
شکل ۶-۱۳: چگالی حالت‌های الکتروده آهن در حالت اسپین پایین.

مقادیر فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت DD را در شکل (۶-۱۲) نشان داده می‌شود.



شکل ۶-۱۴: درصد SFE های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت DD متصل‌اند.

شکل (۶-۱۴) نشان می‌دهد که بیشترین درصد فیلترینگ اسپینی، مربوط به دی‌تیوفن که در حدود ۹۹/۶۶ درصد می‌باشد. بدلیل بالا بودن درصد جریان فیلتر شده در این الیگو، دی‌تیوفن انتخاب بسیار خوبی برای استفاده در قطعات اسپینترونیکی می‌باشد. بدلیل محدود بودن تعداد صفحات پایان نامه، برای نمونه ضریب ترابرد ولتاژهای معکوس، مونوتیوفن و تتراتیوفن را در شکل (۶-۱۵) نشان داده‌ایم.



شکل ۶-۱۵: ضریب ترابرد ولتاژهای معکوس، الیگوتیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت

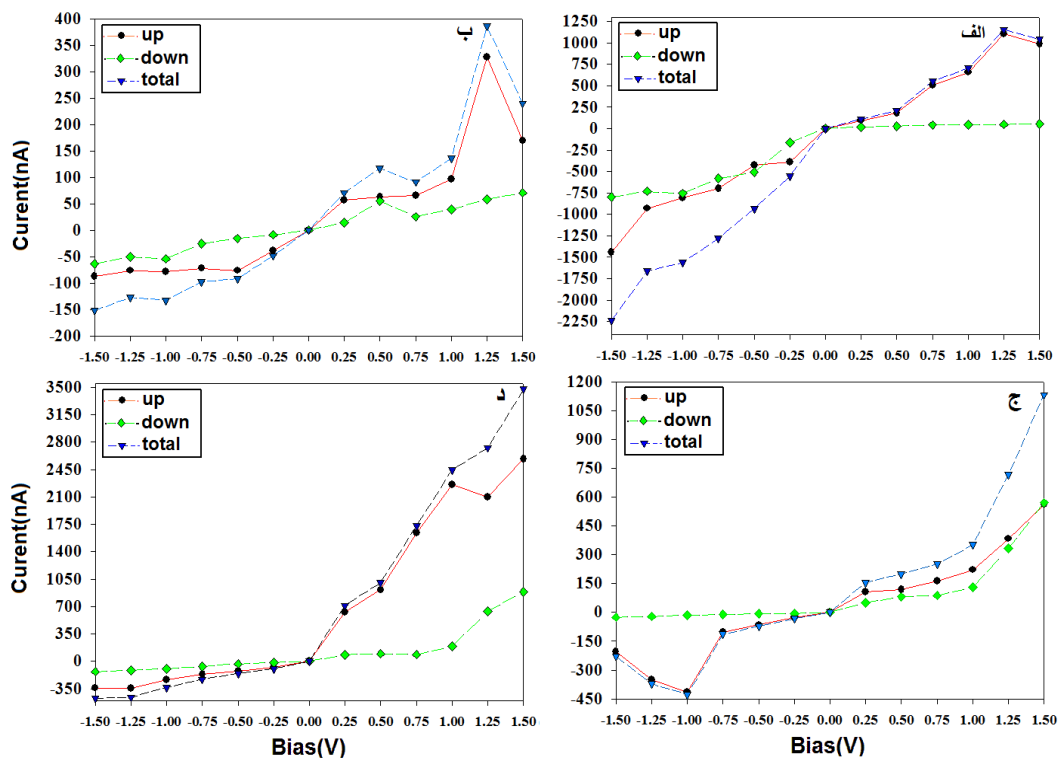
موازی DD متصل شده‌اند. الف) مونوتیوفن ب) تتراتیوفن

شکل (۶-۱۵) نشان می‌دهد که سهم اسپین بالا، اسپین اکثریت است و سهم عمده‌ای از کانال‌ها در پنجره ولتاژ را به خودش اختصاص داده است که نشانگر جریان بیشتر اسپین بالا می‌باشد و با جدول ۶-۵ کاملاً مطابقت دارد. جریان‌های کلیه ساختارهای الیگوتیوفن‌های که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت DU متصل شده‌اند، در جدول ۶-۶ گزارش شده است و در شکل (۶-۱۶) نشان داده شده است.

جدول ۶-۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت  $DU$  متصل‌اند.

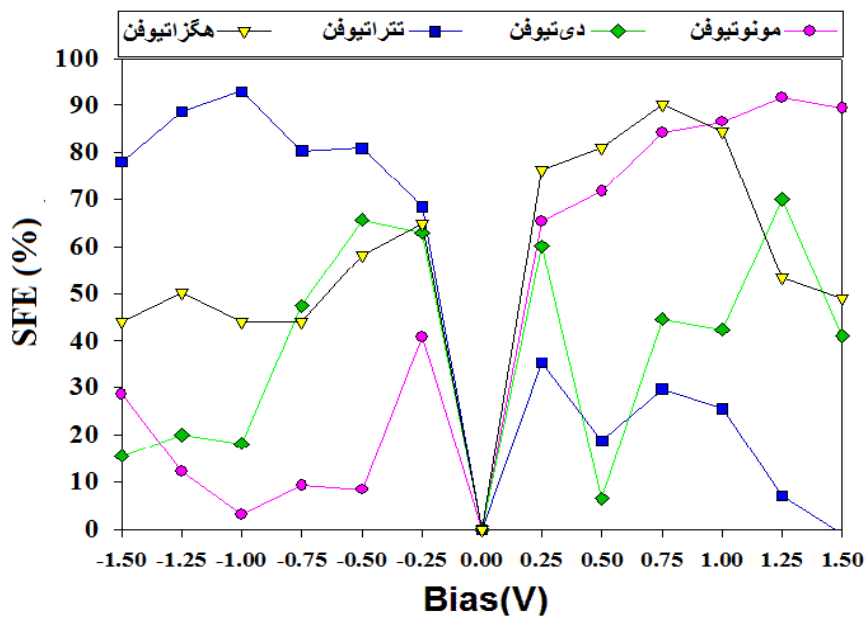
ولتاژ ( $V$ )	جریان $I_{DU}^{\uparrow}$ منو تیوفن ( $nA$ )	جریان $I_{DU}^{\downarrow}$ مونو تیوفن ( $nA$ )	جریان $I_{DU}^{\uparrow}$ دی تیوفن ( $nA$ )	جریان $I_{DU}^{\downarrow}$ دی تیوفن ( $nA$ )	جریان $I_{DU}^{\uparrow}$ تترا تیوفن ( $nA$ )	جریان $I_{DU}^{\downarrow}$ تترا تیوفن ( $nA$ )	جریان $I_{DU}^{\uparrow}$ هگزاتیوفن ( $nA$ )	جریان $I_{DU}^{\downarrow}$ هگزاتیوفن ( $nA$ )
$V=1/5$	۹۸۸/۱۵۸	۵۵/۱۲۹۹	۱۶۹/۴۰۳	۷۰/۷۲۰۶	۵۶۱/۰۶۲	۵۷۰/۷۸۰	۲۵۸۷/۲۰	۸۸۶/۶۸۹
$V=1/25$	۱۱۰۷/۱۳	۴۸/۹۸۲۵	۳۲۷/۷۸۷	۵۷/۹۵۹۸	۳۸۳/۶۹۳	۳۳۳/۱۳۵	۲۰۹۳/۰۷	۶۳۵/۸۲۸
$V=1/0$	۶۵۶/۹۴۳	۴۷/۳۷۶۹	۹۶/۶۹۲۸	۳۹/۱۲۵۴	۲۲۱/۱۲۲	۱۳۱/۰۲۰	۲۲۵۴/۹۹	۱۸۹/۸۷۵
$V=0/75$	۵۱۰/۰۷۲	۴۳/۵۶۵۳	۶۵/۹۵۶۴	۲۵/۲۵۷۰	۱۶۲/۸۰۴	۸۸/۳۱۰۴	۱۶۴۳/۱۱	۸۵/۵۱۸۸
$V=0/5$	۱۸۲/۴۸۴	۲۹/۹۹۷۹	۶۲/۳۸۴۹	۵۴/۸۶۱۶	۱۱۸/۴۸۶	۸۰/۹۲۳۱	۹۱۱/۱۱۱	۹۵/۱۰۲۴
$V=0/25$	۹۳/۹۱۵۳	۱۹/۶۸۲۰	۵۶/۶۸۲۳	۱۴/۱۲۴۰	۱۰۵/۶۴۸	۵۰/۴۹۷۶	۶۲۸/۶۸۰	۸۴/۲۹۸۸
$V=0$	.	.	.	.	.	.	.	.
$V=-0/25$	-۳۹۰/۶۳	-۱۶۴/۳۳	-۳۹/۲۵۳	-۸/۹۰۳۷	-۲۶/۹۹۹	-۵/۰۵۱۳	-۷۷/۸۵۸	-۱۶/۶۰۵
$V=-0/5$	-۴۲۷/۴۵	-۵۰۵/۳۹	-۷۶/۲۰۸	-۱۵/۷۸۵	-۶۵/۲۴۶	-۶/۸۷۶۲	-۱۲۳/۲۸	-۳۲/۵۷۶
$V=-0/75$	-۷۰۰/۰۷	-۵۸۱/۲۲	-۷۱/۹۰۷	-۲۵/۶۸۴	-۱۰/۱۹۳	-۱۱/۰۸۶	-۱۶۵/۷۱	-۶۴/۵۰۰
$V=-1/0$	-۸۰۶/۲۹	-۷۵۶/۹۱	-۷۸/۴۲۸	-۵۴/۳۰۹	-۴۱۲/۷۹	-۱۵/۱۵۸	-۲۳۹/۱۰	-۹۳/۱۳۵
$V=-1/25$	-۹۳۱/۲۱	-۷۳۰/۶۵	-۷۶/۲۱۷	-۵۰/۷۹۸	-۳۵۰/۴۲	-۲۱/۲۱۱	-۳۴۵/۹۲	-۱۱۵/۰۶
$V=-1/5$	-۱۴۳۹/۸	-۸۰۰/۳۲	-۸۷/۵۱۱	-۶۴/۰۷۰	۲۰۴/۶۴۸	-۲۵/۲۰۸	-۳۳۹/۶۳	-۱۳۲/۰۶

از مشاهده جدول ۶-۶ و شکل (۶-۱۶) به نتایج زیر می‌رسیم: (۱) در بیشتر جریان‌ها، اندازه جریان اسپین بالا بیشتر از جریان اسپین پایین است. (۲) در موارد زیر پدیده NDR مشاهده شد: دی تیوفن ( $V = -0/75$  در اسپین بالا و  $V = 0/75$  و  $V = -1/25$  در اسپین پایین)، تترا تیوفن ( $V = -1/25$  در اسپین بالا) و هگزاتیوفن ( $V = 1/25$  و  $V = -1/25$  در اسپین بالا). (۳) مقادیر جریان کل در هگزاتیوفن نسبت به دیگر الیگوها بیشتر است.



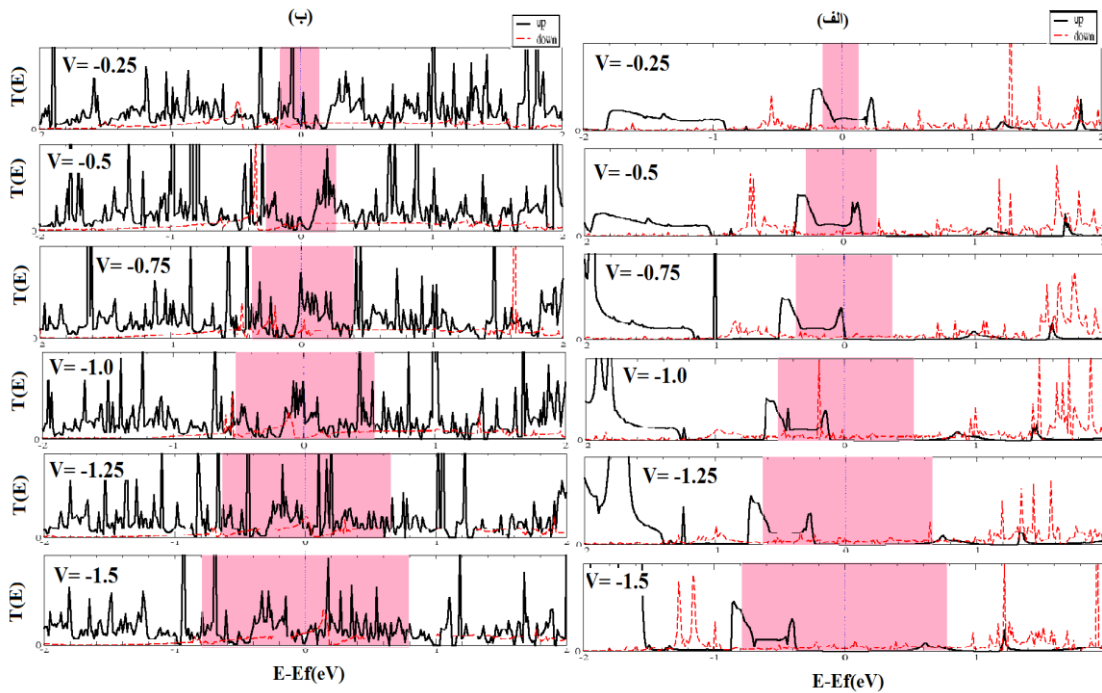
شکل ۶-۱۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت DU متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن ج) تتراتیوفن د) هگزاتیوفن

مقادیر فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت DU را در شکل (۶-۱۷) نشان داده می‌شود.



شکل ۶-۱۷: درصد SFE های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت DU متصل‌اند.

از مشاهده شکل (۶-۱۷) نشان می‌دهد که بیشترین درصد فیلترینگ اسپینی در ولتاژ معکوس، مربوط به تتراتیوفن می‌باشد که علت آن، اختلاف زیاد بین جریان اسپین بالا و پایین است. بیشترین درصد فیلترینگ اسپینی در ولتاژ مستقیم، مربوط به مونتیوفن و هگزاتیوفن می‌باشد. برای نمونه ضرب ترابرد ولتاژهای معکوس، دی تیوفن و هگزاتیوفن را در شکل (۶-۱۸) نشان داده شده است.

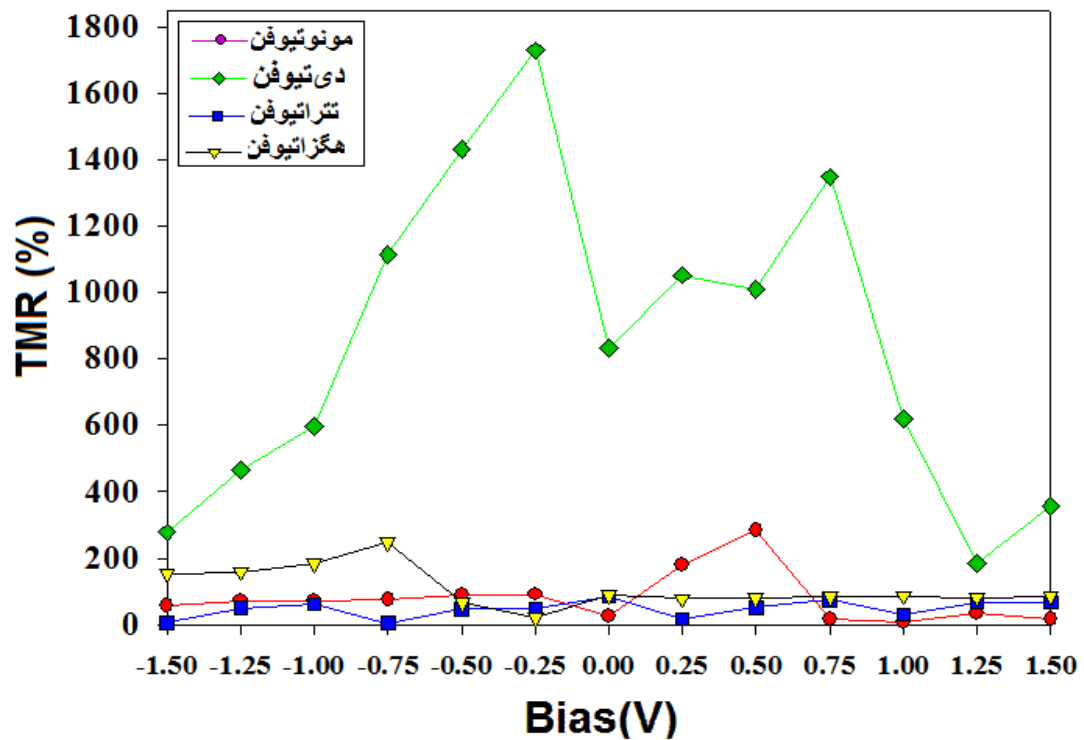


شکل ۶-۱۸: ضرب ترابرد ولتاژهای معکوس، الیگوتیوفن‌های که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت موازی DU متصل شده‌اند. الف) دی تیوفن ب) هگزاتیوفن

شکل (۶-۱۸) نشان می‌دهد که در ولتاژهای معکوس پایین (مثل ولتاژ  $V = -0.5$  دی تیوفن، اسپین بالا، اسپین اکثریت است که نشانگر جریان بیشتر اسپین بالا می‌باشد و هر چه به ولتاژهای بالاتر (منفی‌تر) نزدیک می‌شویم اختلاف بین اسپین بالا و پایین در پنجره انتگرال‌گیری کمتر می‌شود. که با جدول ۶-۶ و ۶-۵ و با استفاده از معادلات (۶-۴ و ۶-۹ و ۶-۱۰ و ۶-۱۱) مقادیر  $TMR_{DD}$  بدست آمده را در جدول ۶-۷ گزارش کرده‌ایم و در شکل (۶-۱۹) نشان داده شده است.

جدول ۶-۷: مقادیر  $TMR_{UU}$  بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن متصل‌اند.

ولتاژ (V)	$TMR_{DD}$ منو تیوفن (%)	$TMR_{DD}$ دی تیوفن (%)	$TMR_{DD}$ تترا تیوفن (%)	$TMR_{DD}$ هگزا تیوفن (%)
V=۱/۵	۱۵/۰۱۴۹	۳۵۶/۶۳۷۴	۶۷/۱۸۶۳	۸۵/۷۷۷۵
V=۱/۲۵	۳۳/۶۵۹۵	۱۸۳/۴۷۵۲	۶۶/۶۸۱۱	۸۱/۸۵۴۹
V=۱/۰	۷/۱۴۹۹	۶۱۸/۳۸۶۹	۲۹/۳۱۷۸	۸۶/۳۱۷۸
V=۰/۷۵	۱۵/۷۸۰۸	۱۳۴۸/۴۵	۷۳/۹۶۵۷	۸۴/۳۴۹۷
V=۰/۵	۲۸۲/۴۱۶۳	۱۰۰۹/۸۱۱	۵۱/۱۲۹۹	۸۱/۰۵۶۸
V=۰/۲۵	۱۷۸/۲۲۱۶	۱۰۵۱/۶۳۶	۱۷/۱۳۹۳	۷۷/۹۳۵
V=۰	۲۵/۴۷۸۴	۸۳۳/۸۶۳۳	۸۳/۸۸۱۳	۸۹/۰۹۳۲
V=-۰/۲۵	۹۱/۳۵۰۸	۱۷۲۸/۹۳۹	۴۶/۶۶۷	۲۲/۳۳۳۸
V=-۰/۵	۸۹/۳۰۶۷	۱۴۳۲/۰۴	۴۷/۴۸۳۶	۶۴/۸۵۶۴
V=-۰/۷۵	۷۴/۸۲۹۱	۱۱۱۴/۷۸۸	۴/۳۸۴۳	۲۴۶/۶۱۱۳
V=-۱/۰	۷۰/۴۰۵۹	۵۹۷/۲۱۲۹	۶۲/۷۵۴۸	۱۸۵/۰۷۰۴
V=-۱/۲۵	۷۲/۹۳۸۵	۴۶۶/۰۹۸۶	۵۰/۵۸۶۱	۱۸۵/۰۵۵۱
V=-۱/۵	۵۸/۸۶۶۵	۲۷۸/۲۸۷۲	۶/۴۳۰۶	۱۵۴/۰۰۳



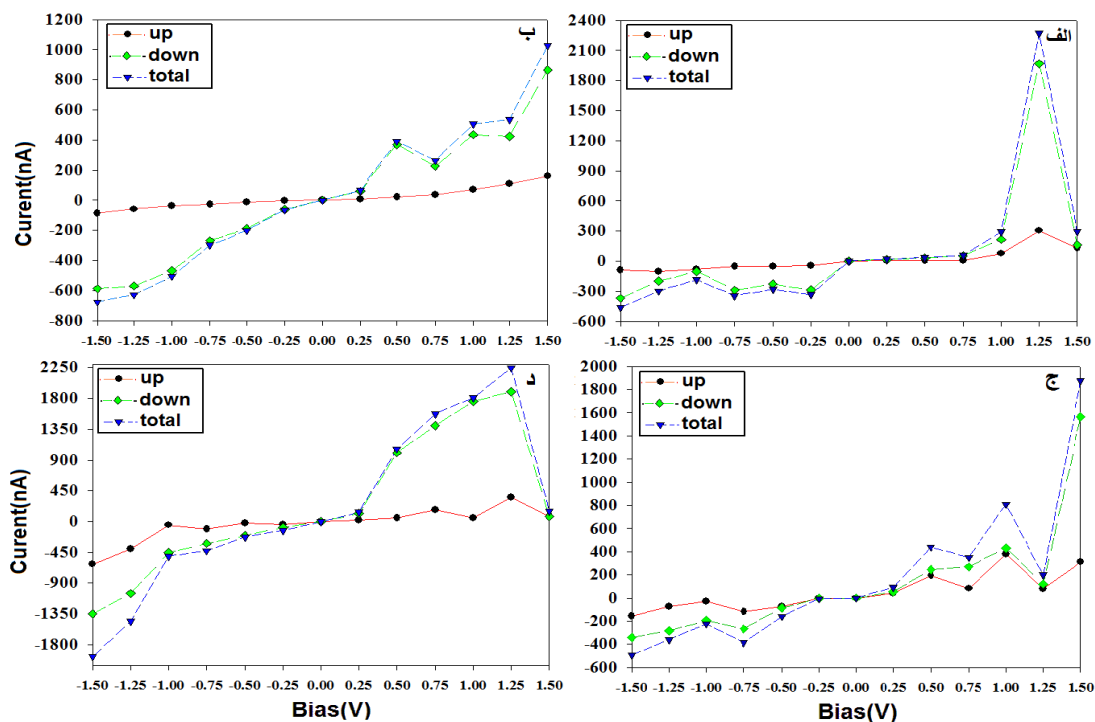
شکل ۶-۱۹:  $TMR_{DD}$  های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن متصل‌اند.

با توجه به جدول و شکل صفحه قبل، بیشترین مقادیر TMR مربوط به دی تیوفن در ولتاژهای مختلف است که بیشترین مقدار TMR در این حالت مربوط به ولتاژ  $V = -0.25$  که برابر ۱۷۳۰ درصد می باشد که مقدار بسیار عالی هست که منجر به این می شود که این الیگو دی تیوفن انتخاب بسیار مناسبی برای بکاربردن در سلول های حافظه های مغناطیسی، حسگرها، هد خواندن داده ها و وسایل اسپینترونیکی در مقیاس نانو باشد و بیشتر مقادیر TMR در این حالت زیر ۲۰۰ درصد می باشند. جریان های کلیه ساختارهای الیگو تیوفن های که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت NS متصل شده اند، در جدول های ۶-۸ گزارش شده است و در شکل (۶-۲۰) نشان داده شده است.

جدول ۶-۸: جریان های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگو تیوفن هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت NS متصل اند.

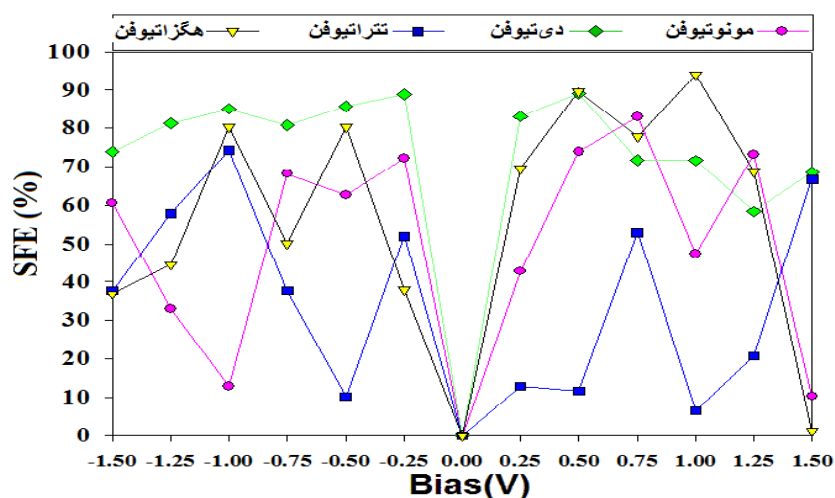
ولتاژ (V)	جریان $I_{NS}^{\uparrow}$ منو تیوفن (nA)	جریان $I_{NS}^{\downarrow}$ مونو تیوفن (nA)	جریان $I_{NS}^{\uparrow}$ دی تیوفن (nA)	جریان $I_{NS}^{\downarrow}$ دی تیوفن (nA)	جریان $I_{NS}^{\uparrow}$ تترا تیوفن (nA)	جریان $I_{NS}^{\downarrow}$ تترا تیوفن (nA)	جریان $I_{NS}^{\uparrow}$ هگزاتیوفن (nA)	جریان $I_{NS}^{\downarrow}$ هگزاتیوفن (nA)
$V=1/5$	۱۳۲/۴۰۳	۱۶۲/۸۳۹	۱۶۱/۵۹۲	۸۶۴/۴۴۵	۳۱۲/۰۹۲	۱۵۶۴/۶۸	۷۴/۵۲۵۷	۷۶/۱۹۵۵
$V=1/25$	۳۰۵/۰۰۶	۱۹۶۷/۹۸	۱۱۱/۴۴۴	۴۲۴/۶۷۱	۷۹/۰۳۲۱	۱۲۰/۵۰۰	۳۵۱/۳۷۶	۱۸۹۴/۸۴
$V=1/10$	۷۷/۳۱۲۶	۲۱۶/۵۰۵	۷۱/۹۱۹۱	۴۳۵/۱۱۲	۳۷۸/۲۱۳	۴۳۱/۳۷۹	۵۳/۳۲۷۱	۱۷۵۶/۶۱
$V=0/75$	۵/۰۵۹۲۸	۵۴/۱۰۷۰	۳۷/۳۲۷۴	۲۲۶/۴۲۱	۸۲/۴۴۵۶	۲۶۸/۵۲۵	۱۷۳/۹۴۹	۱۴۰۰/۶۰
$V=0/5$	۴/۸۷۹۲۲	۳۲/۶۹۶۱	۲۱/۲۶۴۳	۳۷۰/۸۸۶	۱۹۳/۳۶۳	۲۴۴/۳۶۱	۵۴/۸۹۱۵	۱۰۰۵/۷۱
$V=0/25$	۵/۹۵۰۳۷	۱۴/۷۹۹۱	۵/۴۸۱۹۹	۵۹/۴۵۲۲	۴۰/۵۲۴۳	۵۲/۵۱۰۲	۲۱/۰۳۱۴	۱۱۷/۲۴۶
$V=0$	.	.	.	.	.	.	.	.
$V=-0/25$	-۴۶/۳۹۹	-۲۸۶/۷۶	-۳/۵۸۶۳	-۶۰/۶۵۴	-۱/۳۴۲۲	-۴/۲۵۵۴	-۳۹/۷۲۱	-۸۸/۰۰۶
$V=-0/5$	-۵۲/۳۶۳	-۲۲۸/۴۸	-۱۴/۴۰۸	-۱۸۷/۷۱	-۷۱/۴۲۱	-۸۷/۷۱۱	-۲۲/۳۷۸	-۲۰۴/۲۸
$V=-0/75$	-۵۴/۶۳۶	-۲۸۸/۶۳	-۲۸/۶۲۱	-۲۶۹/۷۹	-۱۲۰/۵۹	-۲۶۶/۱۷	-۱۰۶/۰۴	-۳۱۹/۹۱
$V=-1/10$	-۸۰/۶۳۸	-۱۰۴/۴۱	-۳۷/۷۸۲	-۴۶۸/۴۶	-۲۸/۷۹۶	-۱۹۵/۴۳	-۵۰/۰۲۹	-۴۵۵/۷۶
$V=-1/25$	-۹۹/۸۶۶	-۱۹۸/۱۲	-۵۸/۵۹۸	-۵۶۹/۳۴	-۷۵/۳۵۲	-۲۸۲/۶۳	-۴۰۴/۳۵	-۱۰۵۰/۵
$V=-1/5$	-۹۰/۹۵۷	-۳۷۰/۴۹	-۸۸/۱۳۷	-۵۸۷/۸۵	-۱۵۴/۱۴	-۳۴۰/۲۶	-۶۲۳/۱۲	-۱۳۴۹/۴

از مشاهده جدول بالا و شکل صفحه بعد، نتیجه می شود: (۱) در همه الیگوها، جریان اسپین پایین بزرگتر از اسپین بالا است. (۲) جریان کل هگزاتیوفن نسبت به الیگوهای دیگه خیلی بزرگتر است.



شکل ۶-۲۰: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت NS متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن ج) تتراتیوفن د) هگزاتیوفن

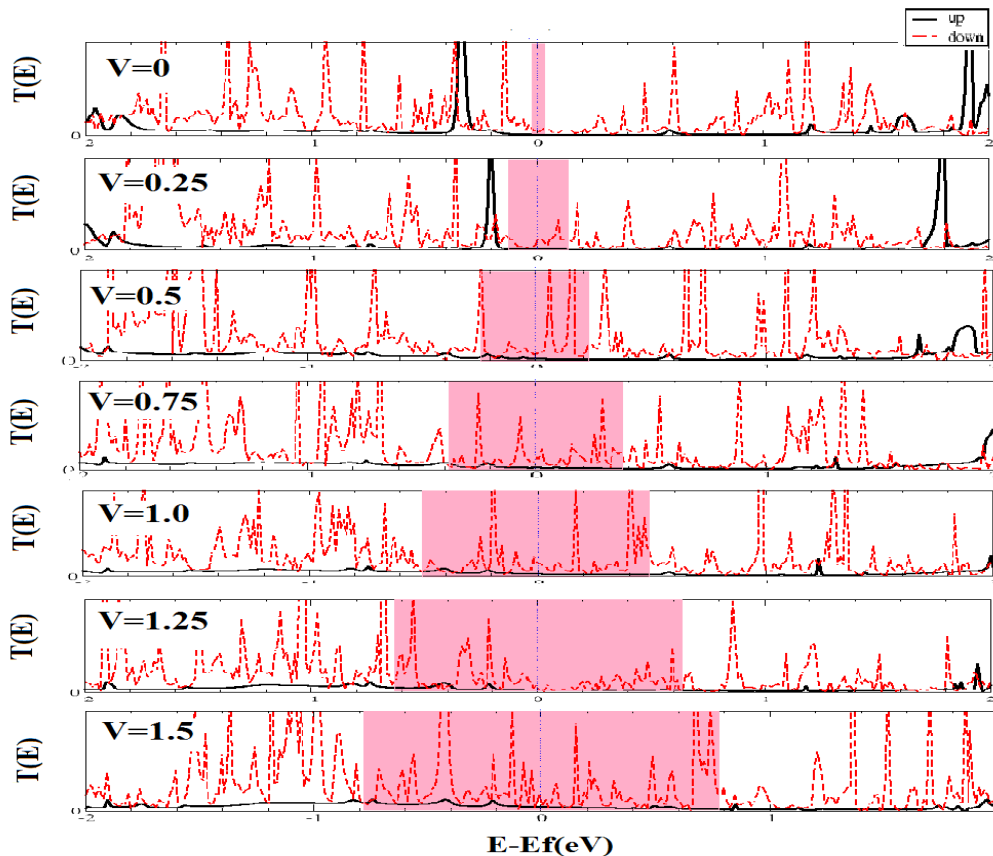
مقادیر فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت NS را در شکل (۶-۲۱) نشان داده شده است. شکل (۶-۲۱) نشان می‌دهد که بیشترین درصد فیلترینگ اسپینی در ولتاژهای معکوس، مربوط به دی‌تیوفن می‌باشد. بیشترین درصد فیلترینگ اسپینی در اکثر ولتاژهای مستقیم، هگزاتیوفن و مونوتیوفن می‌باشد.



شکل ۶-۲۱: درصد SFEهای بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت NS متصل‌اند.



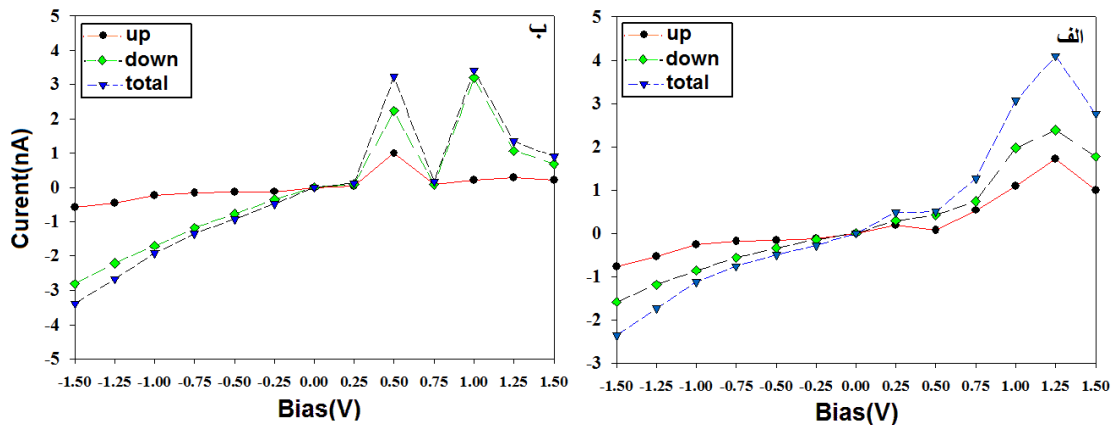
برای نمونه نمودار ضریب ترابرد ولتاژهای مستقیم، دی تیوفن را در شکل (۶-۲۲) نشان داده شده است. که نشان می‌دهد که در دی تیوفن، اسپین پایین بیشترین سهم را در جریان دارد.



شکل ۶-۲۲: ضریب ترابرد ولتاژهای مستقیم، الیگو دی تیوفن که با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۰۰) آهن در حالت موازی NS متصل شده است.

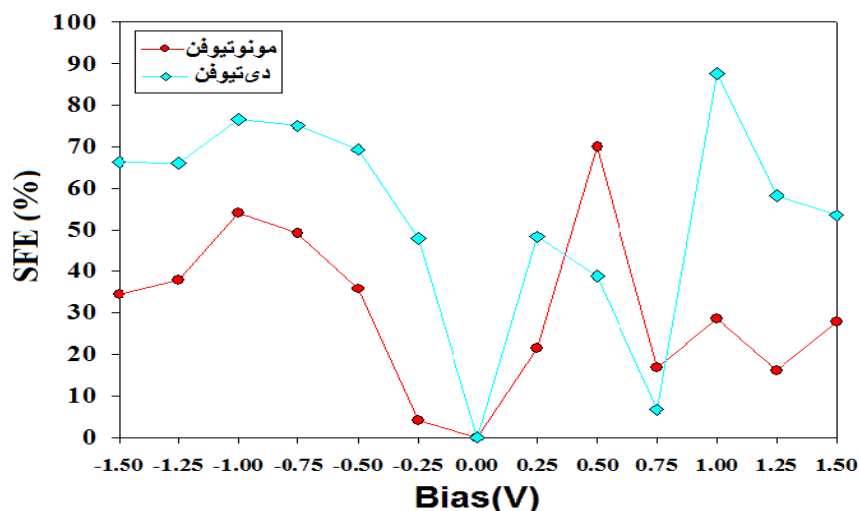
### ۶-۵-۲ ترابرد اسپینی الیگوتیوفن‌ها متصل شده با زاویه صفر درجه با صفحات (۱۱۱) آهن

با توجه به محدود بودن فضای پایان نامه در این بخش از آوردن جدول‌های جریان مربوط به حالات مختلف خوداری کرده‌ایم. جریان‌های ساختارهای الیگوتیوفن‌های، مونوتیوفن و دی تیوفن که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UU، متصل شده‌اند، را در شکل (۶-۲۳) نشان داده شده است.



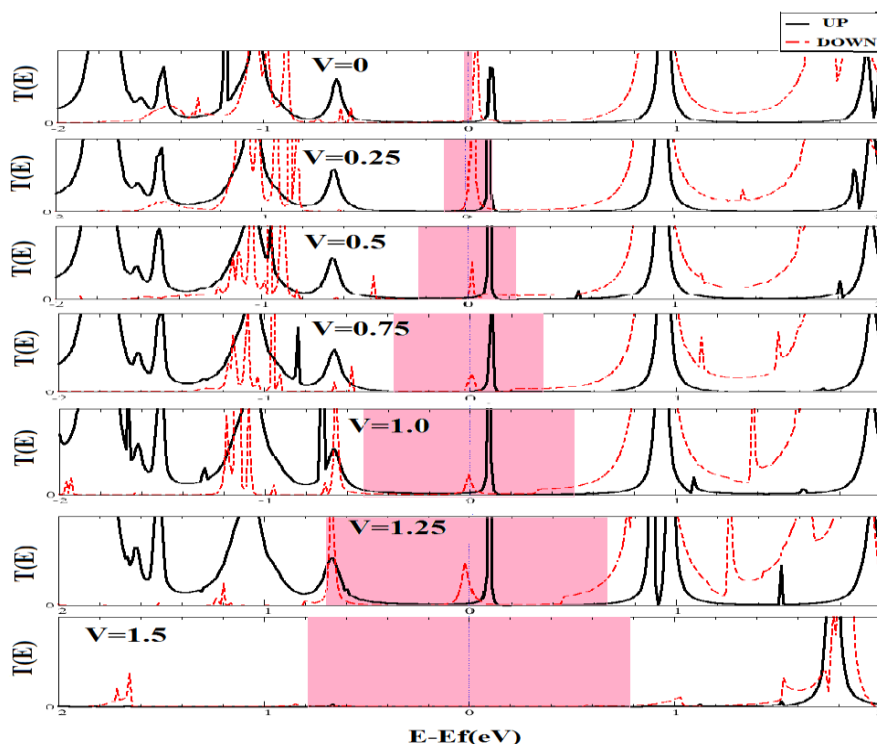
شکل ۶-۲۳: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UU متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن

از مشاهده شکل بالا نتیجه می‌شود: (۱) که جریان‌های مربوط به صفحات (۱۱۱) آهن نسبت به صفحات (۱۰۰) آهن خیلی کوچکتر و کمتر هستند و دلیل آن به ساختار bcc آهن مربوط می‌شود. چون در صفحات (۱۰۰) آهن تعداد اتم بیشتر از تعداد اتم در صفحات (۱۱۱) آهن است که این تعداد بیشتر اتم‌ها باعث جریان بیشتر می‌شود. (۲) در هر دو الیگوتیوفن، جریان‌های اسپین پایین بیشتر از جریان‌های اسپین بالا است. (۳) با افزایش اندازه ولتاژ، اندازه جریان افزایش می‌یابد. (۴) با توجه به شکل بالا، پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی در بعضی از ولتاژها دیده می‌شود. مقادیر فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت UU را در شکل (۶-۲۴) نشان داده شده است.



شکل ۶-۲۴: درصد SFEهای بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UU متصل‌اند.

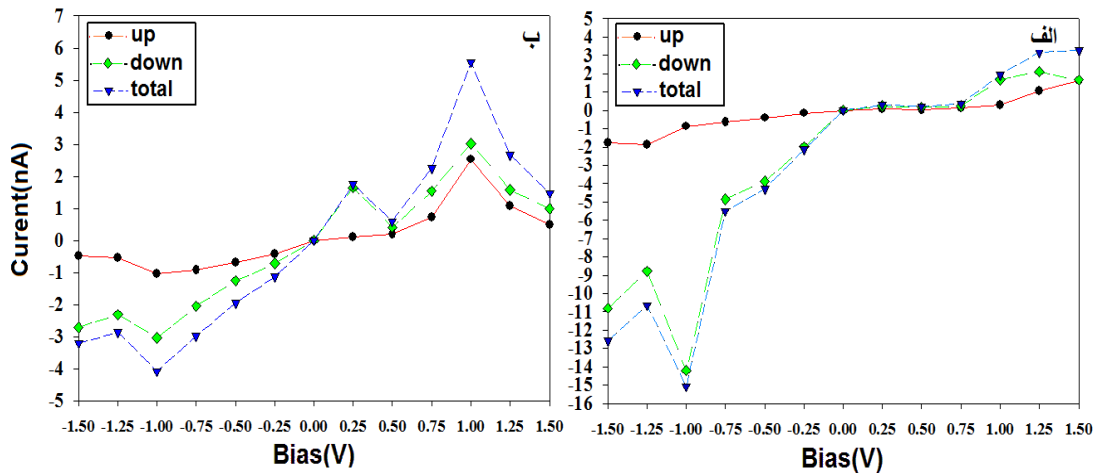
از مشاهده شکل (۶-۲۴) نتیجه می‌شود که بیشترین درصدهای فیلترینگ مربوط به ولتاژهای دی‌تیوفن می‌باشد و اینکه بیشترین فیلترینگ در حالت UU مربوط به ولتاژ  $V=1/0$  الیگو دی‌تیوفن که برابر با ۸۷٪ می‌باشد. برای نمونه نمودار ضریب ترابرد ولتاژهای مستقیم، مونوتیوفن را در شکل (۶-۲۵) نشان داده شده است.



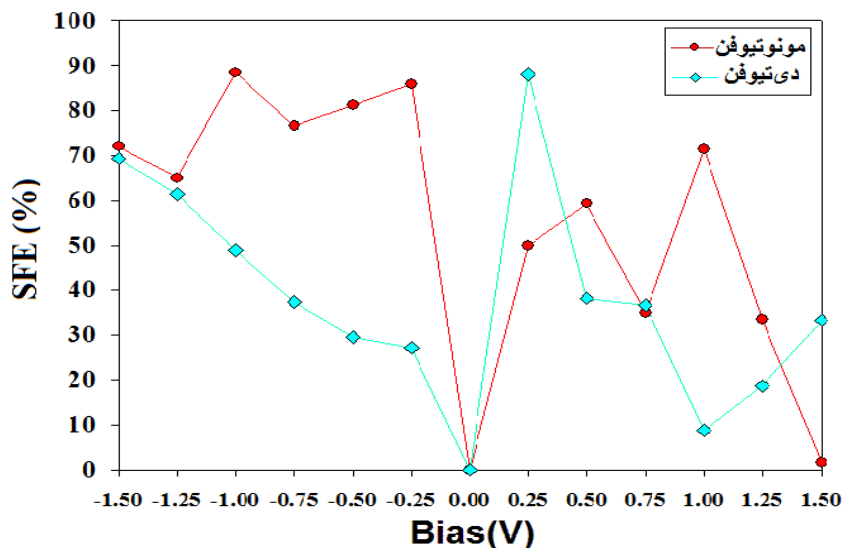
شکل ۶-۲۵: ضریب تراپردی ولتاژهای مستقیم، مونوتیوفن که به صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UU متصل شده‌اند.

از مشاهده شکل (۶-۲۵) نتیجه می‌شود که در ولتاژهای مختلف، قله‌های از اسپین پایین در پنجره ولتاژ قرار می‌گیرد که نشان دهنده بیشتر بودن جریان اسپین پایین نسبت به جریان اسپین بالا است. جریان‌های ساختارهای پیوندگاه تونلی الیگوتیوفن‌های که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UD، متصل شده‌اند، را در شکل (۶-۲۶) نشان داده شده است. با توجه به شکل صفحه بعد می‌توان نتیجه گرفت که در ولتاژهای مستقیم در دو الیگو، اختلاف بین جریان اسپین بالا و پایین بسیار کم است ولی در ولتاژهای معکوس، این روند صادق نیست و اختلاف جریان بزرگ بخصوص در مونوتیوفن دیده می‌شود که این اختلاف به درصد فیلترینگ بالا منجر می‌شود که در شکل (۶-۲۷) نشان داده شده

است. در شکل زیر مقادیر پدیده NDR کاملا مشهود است. مقادیر فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت UD را در شکل (۶-۲۷) نشان داده شده است.

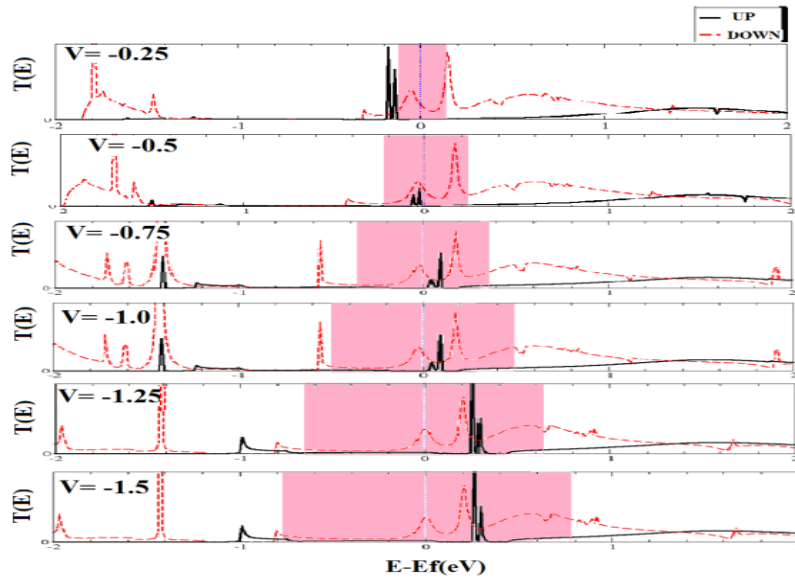


شکل ۶-۲۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UD متصل‌اند. الف) مونوتیوفن (ب) دی‌تیوفن



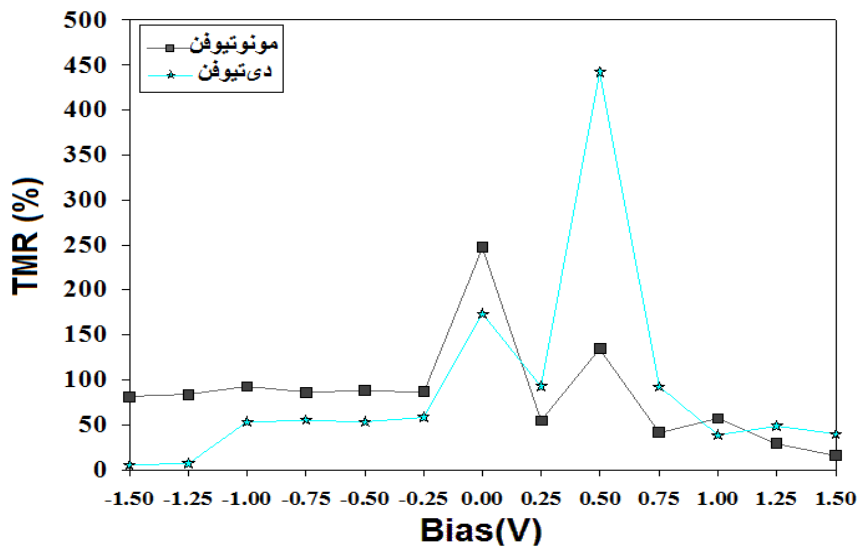
شکل ۶-۲۷: درصد SFEهای بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UD متصل‌اند.

شکل بالا نشان می‌دهد در اکثر ولتاژها، مونوتیوفن بیشترین درصدهای فیلترینگ را نسبت به دی‌تیوفن (به استثنا ولتاژ ۰/۲۵ V) دارا می‌باشد. برای نمونه نمودار ضریب ترابرد ولتاژهای معکوس، مونوتیوفن را در شکل (۶-۲۸) نشان داده شده است.



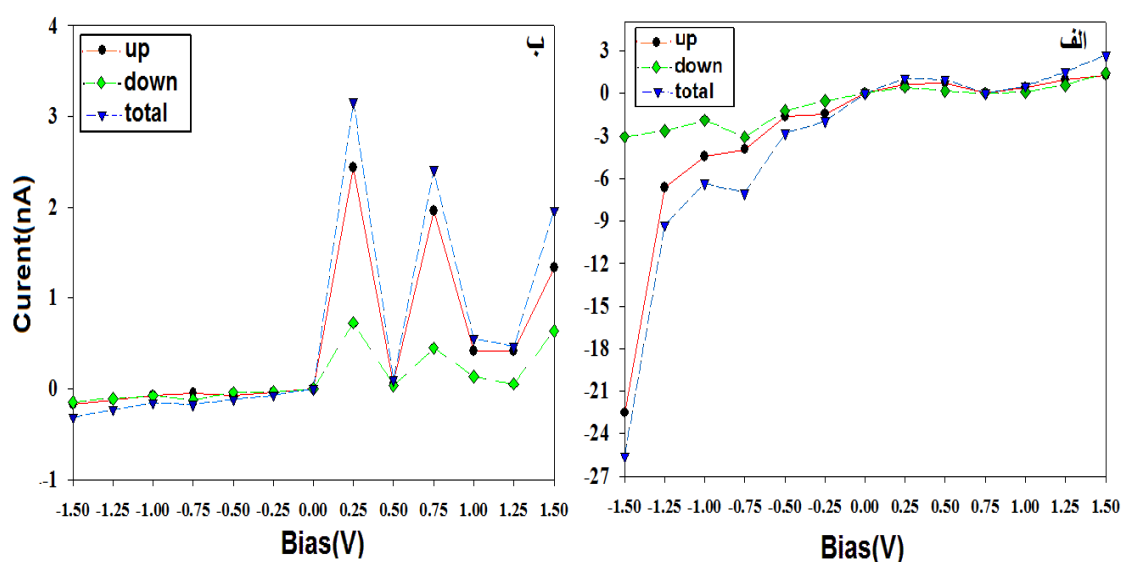
شکل ۶-۲۸: ضریب تراپردی ولتاژهای معکوس، مونوتیوفن که به صفحات (۱۱۱) آهن در حالت UD متصل شده‌اند.

با مشاهده شکل (۶-۲۸) نتیجه می‌شود که تعداد قله‌های نمودار ضریب تراپردی اسپین پایین بیشتر و همچنین بزرگتر از قله‌های اسپین بالا در پنجره بایاس است که این باعث اختلاف زیاد بین جریان‌های بالا و پایین می‌شود که نشانگر این است که اسپین پایین سهم بیشتری در تراپرد دارد. با توجه به جریان‌های بدست آمده در شکل‌های (۶-۲۳ و ۶-۲۶) و با استفاده از معادلات (۶-۴ و ۶-۶ و ۶-۷ و ۶-۸) مقادیر  $TMR_{UU}$  بدست آمده را در شکل (۶-۲۹) نشان داده شده است.

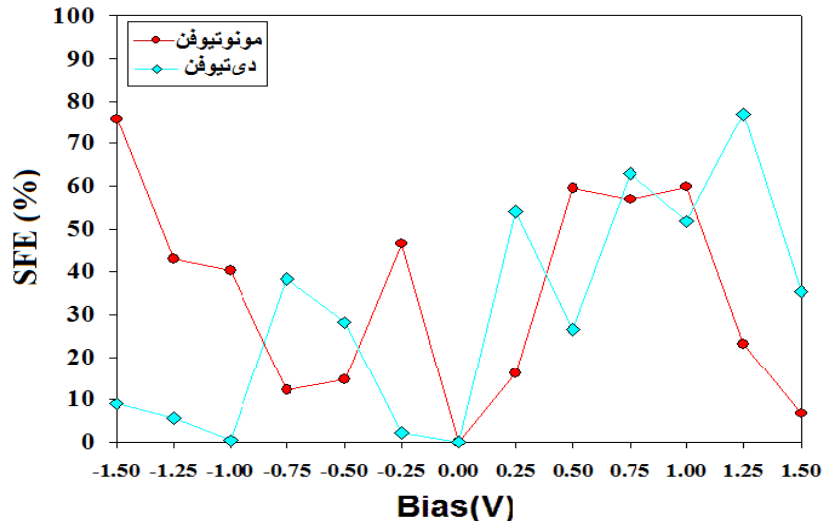


شکل ۶-۲۹:  $TMR_{UU}$  های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن متصل‌اند.

شکل (۶-۲۹) نشان می‌دهد که در اکثر موارد، درصد مقادیر  $TMR_{UU}$  مونوتیوفن بیشتر از دی‌تیوفن است و بیشترین مقدار  $TMR_{UU}$  مربوط به ولتاژ  $V=0/5$  الیگو دی‌تیوفن مربوط می‌شود که در حدود ۴۴٪ می‌باشد که مقدار نسبتاً خوبی هست. جریان‌های ساختارهای الیگوتیوفن‌های، مونوتیوفن و دی‌تیوفن که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DD، متصل شده‌اند، را در شکل (۶-۳۰) نشان داده شده است. از مشاهده شکل (۶-۳۰) نتیجه می‌شود: (۱) که برای مونو تیوفن در ولتاژهای مستقیم و دی تیوفن در ولتاژهای معکوس، اختلاف بین جریان اسپین بالا و پایین بسیار کم است. (۲) در ولتاژهای مستقیم دو الیگوتیوفن، جریان اسپین بالا بزرگتر و بزرگتر جریان اسپین پایین هست. (۳) مقادیر پدیده NDR بخصوص در ولتاژهای مستقیم دی تیوفن مشهود است. (۴) در بیشتر حالت‌های که بررسی شده، مشاهده شده که با افزایش طول پیوندگاه از مونوتیوفن به دی تیوفن، جریان کل و جریان‌های اسپین بالا و پایین کاهش یافت و این روند کاهشی در این حالت ولتاژ معکوس در این حالت بسیار بزرگتر و بیشتر می‌باشد. مقادیر درصد‌های فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت DD را در شکل (۶-۳۱) نشان داده شده است.

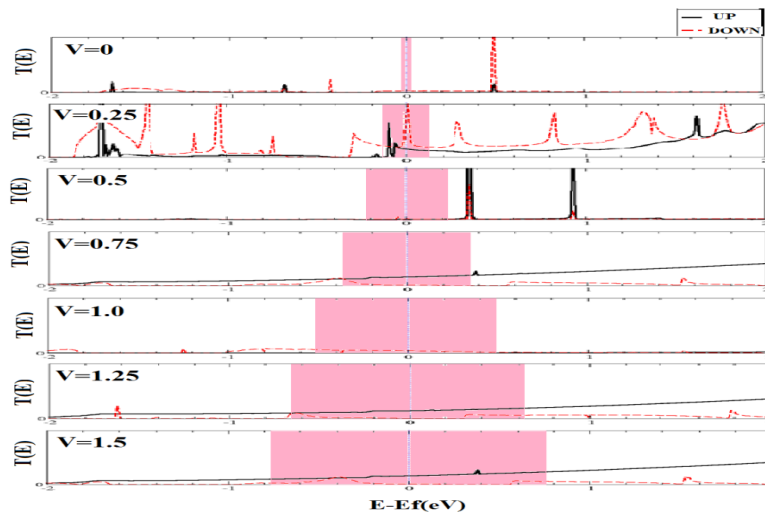


شکل ۶-۳۰: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DD متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن



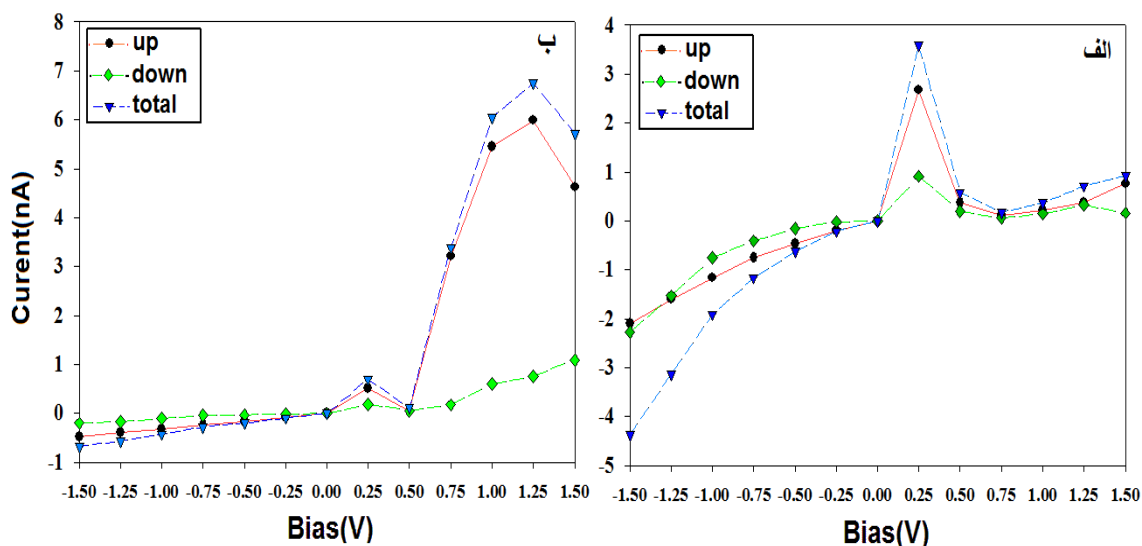
شکل ۶-۳۱: درصد SFE های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DD متصل‌اند.

با توجه به شکل بالا، مشاهده می‌شود که در ولتاژهای مستقیم، بیشترین درصد‌های فیلترینگ مربوط به دی‌تیوفن می‌باشد و در ولتاژهای معکوس بیشترین درصد‌های فیلترینگ اسپینی مربوط به مونوتیوفن می‌باشد و همچنین اینکه در اکثر مقادیر این حالت اثر فیلترینگ اسپینی برای دو الیگو در حد پایین (زیر ۵۰ درصد) است که نشانگر این است این حالت DD برای الکتروود آهن با صفحات (۱۱۱) اثر فیلترینگ اسپینی خوبی ندارد. برای نمونه نمودار ضریب ترابرد ولتاژهای مستقیم، دی‌تیوفن را در شکل (۶-۳۲) نشان داده شده است.



شکل ۶-۳۲: ضریب ترابرد ولتاژهای مستقیم، مونوتیوفن که به صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DD متصل شده‌اند.

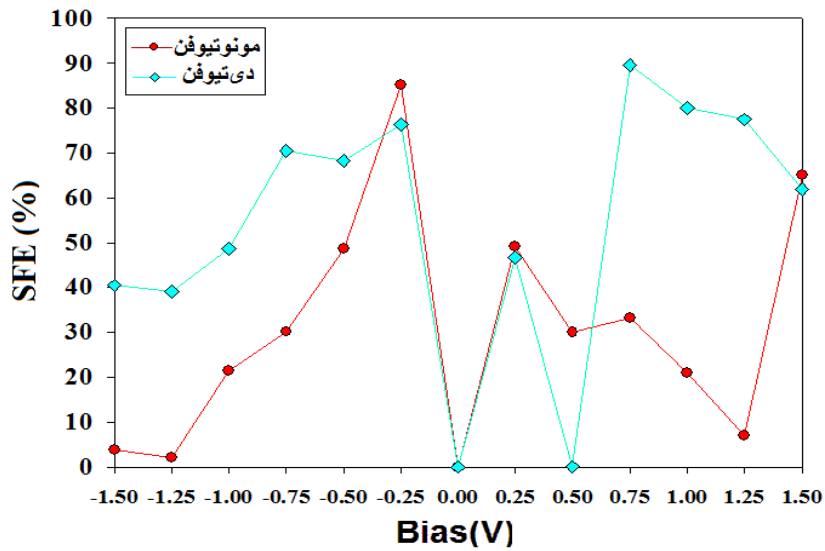
جریان‌های ساختارهای الیگوتیوفن‌های، مونوتیوفن و دی‌تیوفن که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DU، متصل شده‌اند، را در شکل (۳۳-۶) نشان داده شده است.



شکل ۳۳-۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DU متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن

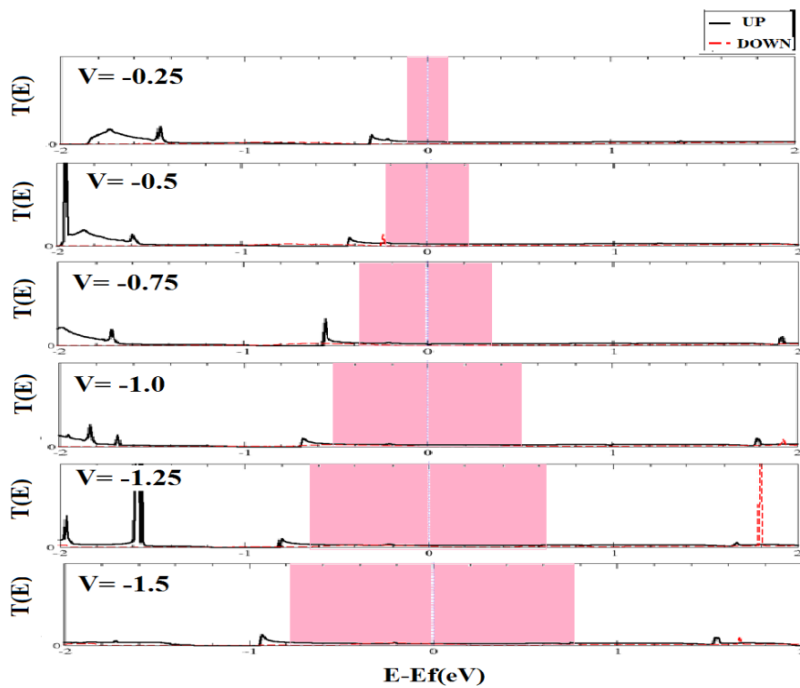
با توجه به شکل (۳۳-۶) می‌توان نتیجه گرفت: (۱) در مونوتیوفن در همه ولتاژها به استثنا ولتاژ  $V=0/25$ ، اختلاف بین جریان اسپین بالا و پایین بسیار کم است و پدیده NDR برای مونوتیوفن فقط در این ولتاژ اتفاق می‌افتد. (۲) در دی‌تیوفن در اکثر ولتاژهای مستقیم اختلاف جریان بین اسپین بالا و پایین زیاد است که این منجر به مقادیر درصد‌های فیلترینگ اسپینی بالای برای دی‌تیوفن در ولتاژهای مستقیم می‌شود. (۳) در بیشتر ولتاژهای دو الیگو، جریان اسپین بالا بیشتر از جریان اسپین پایین است. مقادیر درصد‌های فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت DU را در شکل (۳۴-۶) نشان داده شده است.





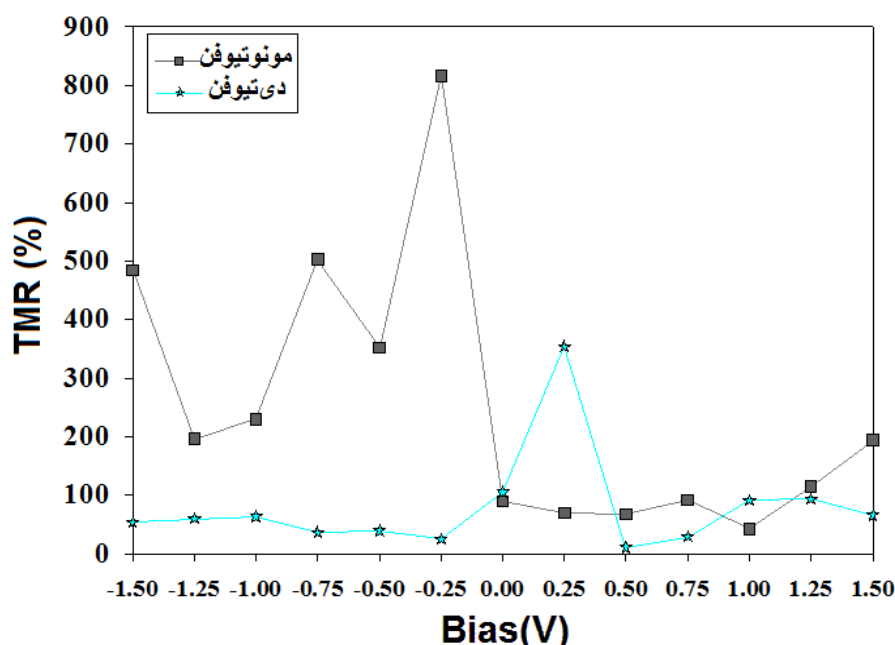
شکل ۶-۳۴: درصد SFE های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DU متصل‌اند.

شکل بالا نشان می‌دهد که بیشترین مقادیر فیلترینگ اسپینی مربوط به ولتاژهای مستقیم بالا در دی‌تیوفن است. بیشترین مقدار آن در ولتاژ  $V=0/75$  است که برابر با ۸۹٪ می‌باشد. برای نمونه نمودار ضریب تراپردی ولتاژهای معکوس، دی‌تیوفن را در شکل (۶-۳۵) نشان داده شده است.



شکل ۶-۳۵: ضریب تراپردی ولتاژهای معکوس، مونوتیوفن که به صفحات (۱۱۱) آهن در حالت DU متصل شده‌اند.

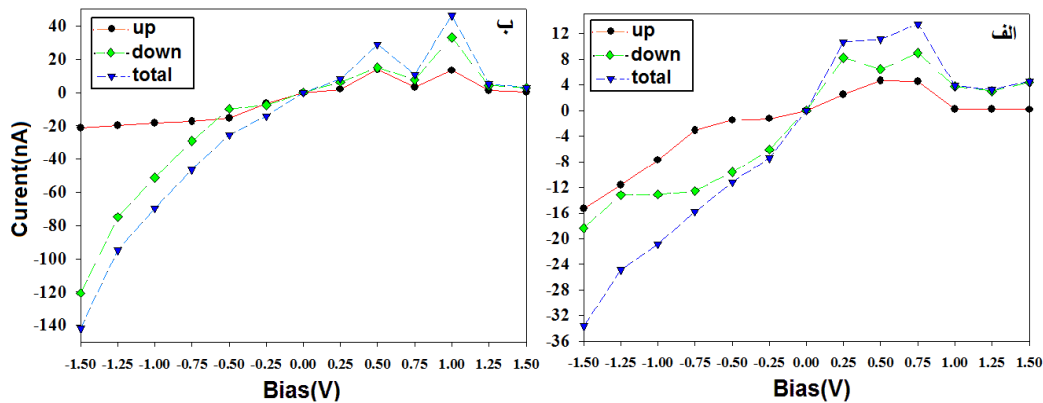
از مشاهده شکل (۳۵-۶) نتیجه می‌شود که در همه ولتاژها سهم عمده‌ای از کانال‌ها در پنجره ولتاژ مربوط به اسپین بالا است و با توجه به پایین بودن سطح نمودار ضریب تراپردی، انتظار جریان بسیار کمی خواهیم داشت، که در شکل (۳۳-۶) در ولتاژهای معکوس، جریانی در حدود کمتر از یک نانو آمپر را نشان می‌دهد. با توجه به جریان‌های بدست آمده در شکل‌های (۳۰-۶ و ۳۳-۶) و با استفاده از معادلات (۴-۶ و ۹-۶ و ۱۰-۶ و ۱۱-۶) مقادیر  $TMR_{DD}$  بدست آمده را در شکل (۳۶-۶) نشان داده شده است.



شکل ۳۶-۶:  $TMR_{DD}$  های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن متصل‌اند.

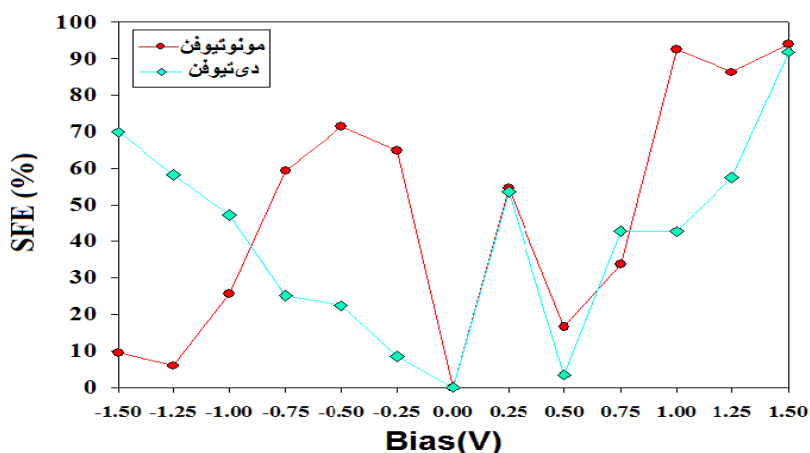
شکل (۳۶-۶) نشان می‌دهد که در اکثر موارد، درصد مقادیر  $TMR_{UU}$  مونوتیوفن بیشتر از دی‌تیوفن است و بیشترین مقدار  $TMR_{UU}$  مربوط به ولتاژهای معکوس مونوتیوفن می‌باشد که در ولتاژ  $V = -0.25$  مقدار بدست آمده برابر با ۸۱۶٪ می‌باشد که مقدار نسبتاً خوبی هست. جریان‌های ساختارهای الیگوتیوفن‌های، مونوتیوفن و دی‌تیوفن که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت NS، متصل

شده‌اند، را در شکل (۳۷-۶) نشان داده شده است.



شکل ۳۷-۶: جریان‌های بدست آمده از ولتاژ اعمالی به الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت NS متصل‌اند. الف) مونوتیوفن ب) دی‌تیوفن

با توجه به شکل بالا می‌توان نتیجه گرفت: (۱) در اکثر جریان‌های بدست آمده، اندازه جریان اسپین پایین بیشتر از اندازه جریان اسپین بالا است. (۲) در دی‌تیوفن در ولتاژهای معکوس بالا (منفی‌تر)، اندازه جریان اسپین بالا بزرگتر از اندازه جریان اسپین پایین است ولی در ولتاژهای مستقیم کاملاً یک روند ثابت را طی نمی‌کند. (۳) در دو الیگوتیوفن پدیده NDR بطور مشهود در بعضی از ولتاژها اتفاق افتاده است که در شکل بالا قابل مشاهده است. مقادیر درصدی فیلترینگ اسپینی بدست آمده از حالت NS را در شکل (۳۸-۶) نشان داده شده است.



شکل ۳۸-۶: درصد FES های بدست آمده از الیگوتیوفن‌هایی که با صفحات (۱۱۱) آهن در حالت NS متصل‌اند.

شکل صفحه قبل نشان می‌دهد که بیشترین مقادیر فیلترینگ اسپینی مربوط به ولتاژهای بالا مستقیم در مونوتیوفن است. که بیشترین مقدار آن در ولتاژ  $V=1/5$  است که برابر با ۹۴٪ می‌باشد

## ۶-۶ جمع‌بندی

در این فصل به بررسی ترابرد اسپینی الیگوتیوفن در پیوندگاه تونلی آهن/ الیگوتیوفن / آهن با صفحات (۱۰۰) و (۱۱۱)، برای پنج پیکربندی راستاهای مغناطش (موازی و پادموازی) الکترودها پرداخته‌ایم. مشخصه جریان- ولتاژ، ضریب ترابرد و مقادیر مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی (TMR) و اثر اسپین فیلترینگ (SFE) را برای پیوندگاه در بازه ولتاژ  $\pm 1/5V$  محاسبه کرده‌ایم. که مهم‌ترین نتایج بدست آمده از این فصل زمانی که الیگوتیوفن‌ها با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) آهن متصل‌اند، را به صورت خلاصه بیان می‌کنیم: (۱) در اکثر حالت‌های بررسی شده، ترابرد در این الیگوتیوفن‌ها با افزایش طول مولکول کاهش می‌یابد. (۲) در حالت‌های UU و UD، در بیشتر موارد جریان اسپین پایین بیشتر از جریان اسپین بالا در هر الیگوتیوفن می‌باشد. (۳) در حالت‌های DD و DU، در بیشتر موارد جریان اسپین بالا بیشتر از جریان اسپین پایین در هر الیگوتیوفن می‌باشد. (۴) در حالت UU بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=0/25$ ، دی‌تیوفن است که برابر با ۹۶٪ می‌باشد. (۵) در حالت UD بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=-0/75$ ، دی‌تیوفن است که برابر با ۹۸٪ می‌باشد. (۶) در حالت DD بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=-0/25$ ، دی‌تیوفن است که برابر با ۹۹/۶۶٪ می‌باشد. (۷) در حالت DU بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=-1/0$ ، تتراتیوفن است که برابر با ۹۳٪ می‌باشد. (۸) در حالت NS بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=1/0$ ، دی‌تیوفن است که برابر با ۹۴٪ می‌باشد. (۹) بیشترین درصد  $TMR_{UU}$  در ولتاژ  $V=0/5$ ، تتراتیوفن است که برابر با ۶۹۰٪ می‌باشد. (۱۰) بیشترین درصد  $TMR_{DD}$  در ولتاژ  $V=-0/25$ ، دی‌تیوفن است که برابر با ۱۷۳۰٪ می‌باشد و مهم‌ترین نتایج بدست آمده از این فصل زمانی که الیگوتیوفن‌ها با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۱۱) آهن متصل‌اند، را به صورت خلاصه بیان می‌کنیم:

(۱) در حالت‌های UU و UD، در بیشتر موارد جریان اسپین پایین بیشتر از جریان اسپین بالا در هر الیگوتیوفن می‌باشد. (۲) در حالت‌های DD و DU، در بیشتر موارد جریان اسپین بالا بیشتر از جریان اسپین پایین در هر الیگوتیوفن می‌باشد. (۳) در حالت UU بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=1/0$ ، دی‌تیوفن است که برابر با ۸۷٪ می‌باشد. (۴) در حالت UD بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=-1/0$ ، مونوتیوفن است که برابر با ۸۹٪ می‌باشد. (۵) در حالت DD بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=1/25$ ، دی‌تیوفن است که برابر با ۷۷٪ می‌باشد. (۶) در حالت DU بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=0/75$ ، دی‌تیوفن است که برابر با ۸۹٪ می‌باشد. (۷) در حالت NS بیشترین درصد اسپین فیلترینگ در ولتاژ  $V=1/5$ ، مونوتیوفن است که برابر با ۹۴٪ می‌باشد. (۸) بیشترین درصد  $TMR_{UU}$  در ولتاژ  $V=0/5$ ، دی‌تیوفن است که برابر با ۴۴٪ می‌باشد. (۹) بیشترین درصد  $TMR_{DD}$  در ولتاژ  $V=-0/25$ ، مونوتیوفن است که برابر با ۸۱٪ می‌باشد. (۱۰) جریان‌های بدست آمده از حالتی که الیگوتیوفن‌ها با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۰۰) آهن متصل شده‌اند خیلی بزرگتر از حالتی هست که الیگوتیوفن‌ها با زاویه صفر درجه به صفحات (۱۱۱) آهن متصل شده‌اند. (۱۱) در بیشتر حالت‌های بررسی شده پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی مشاهده شده است.

در پایان این فصل لازم به ذکر است که، کلیه مواردی که در این فصل ارائه شده است را برای حالتی که الیگوتیوفن‌ها با زاویه ۹۰ درجه به صفحات (۱۰۰) و (۱۱۱) آهن متصل شده‌اند، مورد بررسی قرار داده‌ایم و به علت نبودن فضایی کافی و محدود بودن تعداد صفحات پایان نامه از آوردن شکل‌ها و نتایج و نمودارها، این بررسی خودداری کرده‌ایم.

## پیشنهادات برای کارهای آینده

- ۱) بررسی خواص اپتیکی الیگوتیوفن خالص و متصل به سولفور.
- ۲) استفاده از مولکول‌های آلی و غیرآلی دیگر به جای الیگوتیوفن.
- ۳) بررسی ترابرد الکترونی و اسپینی در ولتاژها بالاتر از ۱/۵۷.
- ۴) تغییر آرایش اتصال الیگوتیوفن به الکتروود طلا و آهن و بررسی تاثیر آن روی ترابرد الکترونی و اسپینی.
- ۵) استفاده از الکتروودهای فرومغناطیس دیگر مثل نیکل و کبالت به جای الکتروود آهن در ترابرد اسپینی.
- ۶) استفاده از کد اسمیگل در ترابرد و مقایسه نتایج این دو کد.
- ۷) استفاده از تقریب LDA در محاسبات و مقایسه نتایج این دو تقریب.
- ۸) اثر اتصال بعضی از گروه شیمیایی (مثل گروه فنیل) بر خواص الکترونی و تراپردی الیگوتیوفن‌ها.

- [1] G. E. Moore, (1965). "Cramming more components onto integrated circuits.", *Electronics.*, Vol.38, pp 114.
- [2] M. Lundstrom, (2003). "Moor's law forever?.", *Science.*, Vol.299, pp 210-211.
- [3] H. S. P. Wong, D. J. Frank, P. M. Solomon, C. H. J. Wann, and J. J. Welser, (1999). "Nanoscale CMOS.", *Proceedings of the IEE.*, Vol.87, pp 537-570.
- [4] J. R. Powell, (2008). "The quantum limit to Moor's law. ", *Proceedings of the IEE.*, Vol.96, pp 1247-1248.
- [5] S. E. Thompson, S. Parthasarathy, (2006). "Moor's law: the future of Simicroelectronic." *Materials Today.* , Vol.9, pp 20-25.
- [6] M. T. Bohr, (2002). "Nanotechnology goals and challenges for electronic applications. ", *IEEE Transactions on Nanotechnology.*, Vol.1, pp 56-62.
- [7] G. Cuniberti, G. Fagas, and K. Richter, (2005). "Introducing Molecular Electronic.", Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- [8] J. A. Fabian, C. Ertler, P. Stano, and I. Zutic, (2007). "Semiconductor Spintronic.", *Acta Phys. Slov.*, Vol.57, pp 565.
- [9] S.A. Wolf, D.D. Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S. Molnar, M. Von, L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, and D.M. Treger, (2001). " Spintronics: A spin-based electronics vision for the future.", *Science.*, Vol.294, pp 1488-1495.
- [10] G.A. Prinz, (1998). "Magnetoelectronics. ", *Science.*, Vol.282, pp1660.
- [11] I. Zutic, J. Fabian, Das S. Sarma, (2004). "Spintronic: Fundamentals and applications.", *Rev. Mod. Phys.*, Vol.76, pp 323.
- [12] Z. Wang, Y. Nakamura, (1996). "A Spin-Valve memory cell.", *Journal of Magnetism and Materials.*, Vol.159, pp 133-135.
- [13] J. Wang, L. Malkinski, Y. Hao, C. Roos, A. Wiemann, J. Cornnor, J. Chales, (2000). "Fabrication of pseudo-spin-valve and 100 nm sized peripdc elements for magnetic memory application.", *Materials Science and Engineering B.*, Vol.76, Issue1, pp 1-5.
- [14] S. Sugahara, M. Tanaka, (2004). "A novel Spin Transistor based on Spin-Filtering in Ferromagnetic Barrier: a spin-filter transistor.", *Physica E.*, Vol. 21 , pp 996-1001
- [15] L. C. Hsieh, Y. W. Lo, Y. D. Huang, And D. R. Hung. (2006). "Magneto-current study in a silicon base spin vave transistor.", *Journal of Magnetism and magneto Materials.*, Vol.304, pp.e270-e272.
- [16] R. L. White, (1994). "Giant Magnetoresistance Materials and Their Potential as

Read Head Sensors.", IEEE Trans Magn., Vol.30, pp. 346-352.

[17] J. Park, H. C. Lee, (2007). "An Impurity spin in one-dimensional antisymmetric spin filter.", Journal of Magnetism and magneto Materials., Vol.310, pp. 2049-2051.

[18] A. Saffarzadeh, (2004). "Spin-filter magnetoresistance in magnetic barrier junctions.", Journal of Magnetism and magneto Materials., Vol.269, pp. 327-332.

[19] C. Joachim, J. K. Gimzewski, and A. Aviram, (2000). "Electronics using hybrid-molecular and mono-molecular devices. Nature., Vol.408, pp.541-548.

[20] S. J. Xie, K. H. Ahn, D. L. Smith, A. R. Bishop, and A. Saxena, (2003). "Ground-state properties of ferromagnetic metal/conjugated polymer interfaces.", Phys. Rev. B., Vol.67, pp. 125202.

[21] V. Dediu, M. Murgia, F. C. Matocotta, C. Taliani, and S. Barbaner, (2002). "Room temperature spin polarized injection in organic Semiconductor." , Solid State Com., Vol.122, pp. 181.

[22] Z. H. Xiong, D. Wu, Z. V. Vardeny, and J. Shi, (2004). "Gaint Magnetoresistance in organicspin-valve." Nature., Vol.427, pp. 821.

[23] www.nano.ir

[24] M. C. Petty, (2007). "Molecular Electronics: From Principles to Practice.", John Wiley & Sons.

[25] M. C. Petty, M. R. Bryce & D. Bloor. (1995). "introduction to molecular electronic.", New York: Oxford University Prss.

[26] James M. Tour, (1998). "Recent advances in molecular scale electronics.", Annals of the New York Academy of Sciences. 852, 197.

[27] R. S. Mulliken, (1947). "Quantum-mechanical Methods and the Electronic Spectra and Structure of Molecules." Chem. Rev., Vol.41, pp. 201.

[28] R. Marcus, and N. Sutin, (1985). "Electron transfers in chemistry and biology." Biochem Biophys Acta., Vol.811, pp. 265.

[29] J. R. Heath, and M. A. Ratner, (2003). " Improvement in our understanding of how molecules transport charges, and how they interface to the macroscopic world, are fueling new divices and applications.", physics Today., Vol.8, pp. 43.

[30] R. Steen, (2010). "Molecular Electronic Devices Based on RU(II)." Sweden: Malardaen University press 86.

[۳۱] م. مانو، "طراحی دیجیتال: مدارهای منطقی"، مترجم: ق. سپیدنام، ویرایش سوم، ناشر: خراسان، ۱۳۹۱.

[32] C. R. Physique, (2002). "Molecular-scale electeronics.", Dominique., Vol.9, pp. 78.

[33] Y. Ye, M. Zaang, J. Zaho, (2007). "Ab initio investigations on three isomers of polyacetylene under the interaction of external electric field.", Journal of Molecular



Structuer: THEOCHM., Vol.822, pp. 12.

[34] W. J. M. Naber, S. Faez and W. G. van der Wiel, (2007). "Organic spintronics.", J. Phys. D: Appl. Phys., Vol.40, pp. 205.

[35] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, (1998). "Resonant Spin Amplification in n-Type GaAs.", Phys. Rev.Lett., Vol.80, pp. 4313.

[36] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, (1999). "Lateral drag of spin coherence in gallium arsenide.", Nature., Vol.397, pp. 139.

[37] R. Farchioni, and G. Grosso, (2001). Organic Electronic Materials., Berlin: springer.

[38] H. Klauk, (2006). Organic Electronics: Materials, Manufacturing and Applications. Weinheim: Wiley-VCH

[39] G. A. Prinz, (1995). "Spin-Polarized Transport.", Phys.Today., Vol.48, pp. 58.

[40] J. F. Gregg, I. Petej, E. Jouguelet, and C. Dennis, (2002). "Spin electronics." Phys. D. Appl.Phys., Vol.35, pp. R121.

[41] X. Lou, C. Adelman, S. A. Crooker, E. S. Garlid, J. Zhang, K. S. Madhukar Reddy, S. D. Flexner, C. J. Palmstrom, and P. A. Crowell, (2007). "Electrical Detection of Spin Transport in Lateral Ferromagnet-Semiconductor Devices.", Nature Physics., Vol. 3, pp. 197.

[42] W. J. M. Naber, S. Faez, and W. G. vander Wiel, (2007). "Organic Spintronics.", J. Phys. D:Appl.Phys., Vol. 40, pp. R205-R228.

[43] A. Fert, and H. Jaffrès, (2002). "Conditions for efficient spin injection from a ferromagneticmetal into a semiconductor.", Phys. Rev. B., Vol. 64, pp. 184420.

[44] A. Fert, J. M. George, H. Jaffres, R. Mattana, (2007). "Semiconductors between spin-polarized source and drain.", Jornal. IEEE., Vol. 54, pp. 921-932.

[45] E. Arisi, I. Bergenti, V. Dediu, M. A. Loi, M. Muccini, M. Murgia, G. Ruani, C. Taliani, and R. Zamboni, (2003). "Organic Light Emitting Diodes With Spin Polarized Electrode.", Appl.Phys., Vol.93, pp. 7682.

[46] I. Bergenti, V. Dediu, M. Murgia, A. Riminucci, G. Ruani, and C. Taliani, (2004). "Transparent Manganite Films as hole Injectors for Organic light Emitting Diodes.", Luminesance., Vol.110, pp. 384.

[47] A. Hayer, A. Kohler, E. Arisi, I. Bergenti, A. Dediu, C. Taliani, M. Al-Suti, and S. Khan, (2004). " Polymer light-emitting diodes with spin-polarised chargeinjection." , Synt.Met., Vol.147, pp. 155.

[48] R. Pati, L. Senapati, P. M. Ajayan, and Sa. K. Nayak, (2003). "First-principles calculations of spin-polarized electron transport in a molecular wire: Molecular spin valve.", Phys.Rev.B., Vol.68, pp. 100407.

- [49] E. G. Emberly, and G. Kirczenow, (2002). "Molecular spintronics: spin-dependent transport in molecular wires.", *Chem. Phys. Rev. Lett.*, Vol.281, pp. 311.
- [50] J. H. Shim, K. V. Raman, Y. J. Park, T. S. Santos, G. X. Miao, B. Satpati, and J. S. Moodera, (2008). "Large Spin Diffusion Length in an Amorphous Organic Semiconductor.", *Phys. Rev. Lett.*, Vol.100, pp. 226603.
- [51] M. Ouyang, and D. D. Awschalom, (2003). "Coherent Spin Transfer Between Molecularly Bridged Quantum Dots.", *Science.*, Vol.301, pp. 1074.
- [52] J. R. etta, S. K. Slater, and D. C. Ralph, (2004). "Spin-Dependent Transport in Molecular Tunnel Junctions.", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 93, pp. 136601.
- [53] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. D. Fert, Van. Nguyen, and F. Petroff, (1988). "Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001) Cr Magnetic Superlattices.", *Phys. Rev Lett.*, Vol.54, pp. 225.
- [54] G. Binasch, P. Grunberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, (1989). "Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange.", *Phys. Rev. B.*, Vol. 39, pp. 4828.
- [55] A. Cebollada, J. L. Martinez, J. M. Gallego, J. J. Miguel, R. Ferrer. Miranda, F. Batallan, G. Fillion, and J. P. Rebouillat, (1989). *Phys. Rev. B.*, Vol.39, pp. 4828
- [56] M. Jullière, (1975). "Tunneling between ferromagnetic films." , *Phys. Rev. Lett.*, Vol.54, pp. 225.
- [57] T. Miyazaki, N. Tezuka, (1995). *J. Magn. Mgn. Mater.* 139, L231.
- [58] J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong and R. Meservey, (1995). *Phys. Rev. Lett.* 74. 3273.
- [59] R. Srinivasan, (2005). *Spintronics Devices and materials. Resonance .*
- [60] P. M. Tedrow and R. Meservey, (1971). *Phys. Rev. Lett.* 26 192 ; (1973). *Phys. Rev. B* 7 318.
- [61] S. Datta, and B. Das (1990). "Electronic analog of the electro-optic modulator." *Appl. Phys., Lett.*, Vol.56, pp. 665.
- [۶۲] ام . پی . استیونز، (۱۳۸۵). " شیمی پلیمر "، ع. شکروی و ا. خزایی، چاپ دوم، انتشارات دانشگاه تربیت معلم، تهران.
- [63] T. A . Skotheim, (2002). "Handbook of Conducting Polymers (Conjugated Polymers Processing and Applications)." 3<sup>rd</sup> Ed, CRC-Press, Arizona.
- [64] A . k . Bakhshi, and G . Bahalla,(2004). "Electrically Conducting Polymers: Material of the twenty first century.", *J . Scientific & Industrial Research.*, 63, pp.715.

[۶۵] م. غلامی، (۱۳۹۱). پایان نامه کارشناسی ارشد، "بررسی نظری خواص ساختاری و الکترونی لیگوتیوفن های بسته شده با فنیل و مشتقات آن"، دانشگاه صنعتی شاهرود، دانشکده شیمی، گروه شیمی فیزیک.

[66] G . Hadziioannou, and G . G . Malliaras, (2006). "Semiconducting Polymers: Chemistry, Physics and Engineering .", Volume 1, 2<sup>nd</sup>, John Wiley & Sons, Weinhem.

[67] Available at [www.rcs.org](http://www.rcs.org).

[۶۸] ن. ارسلائی، ع. ا. انتظامی، (۱۳۸۰). "کاربردهای پلیمرهای رسانای الکتریسته"، مجله علوم و تکنولوژی پلیمر، سال چهارم، شماره دوم، صفحه ۹۴.

[69] B . L . Eunt, A . F . Diaz, (1991). "Organic Electrochemistry: an Introduction and Guide.", Marcel Dekker, New York, 1337.

[70] Available at [www.nature.com](http://www.nature.com).

[۷۱] ع. سعیدی، (۱۳۷۵). پایان نامه کارشناسی ارشد، "شیمی تهیه غشاهای پلیمرهای هادی و کاربرد آن در جداسازی اسیدهای معدنی"، دانشکده شیمی، دانشگاه تبریز.

[72] K . Kaneto, K. Yoshino, Y. Inuishi, (1983). "Characteristics of Electro-Optic Device Using Conducting Polymers, Polythiophene and Polypyrrole Films.", Jp.Appl. Phys.,22,pp. 142.

[۷۳] م. خرمی، (۱۳۸۹). پایان نامه کارشناسی ارشد، "بررسی اثرات استخلاف آلکیل بر خواص ساختاری و الکترونی لیگوتیوفن با استفاده از روش های آغازین"، دانشکده شیمی، دانشگاه شاهرود.

[74]D . Kumar, R. C. Sharam, (1998). "Advances in conductive Polymers,(Review Article).", Eur.Polym, 34, 8, pp. 1053.

[75] A. Malinauskas, (2007). "Chemical Deposition of Conducting Polymers.", polymer,42, pp. 3957.

[۷۶] علی اشرفی، (۱۳۸۶). پایان نامه دکتری، "بررسی الکتروپلیمرشدن پیروول بر روی فولاد ساده کربنی و ارزیابی رفتار خوردگی آن"، دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه صنعتی اصفهان.

[77] J. Rodriguez, H. J. Grande, T. F. Otere, (1997). "Handbook of Organic Conductive Molecules and Polymers.", H. S. Ed. Nalwa, Johan Wiley & Sons, New.York, pp. 475.

[78] M. J. Miles, W. T. Smith, J. S. Shapiro, (2002). "Morphological Investigation by atomic force microscopy and light microscopy of Electro Polymerized Polypyrrolerm.", polymer, 41, pp. 3349.

[79] Available at [www.msds.chem.ox.ac.uk](http://www.msds.chem.ox.ac.uk).

[80] W. C. Sumpte, (1994). "The Chemistry of Isatin.", Chemical Reviews,34,3, pp.

393-434.

[۸۱] ت. گیل کریست، (۱۳۸۰). "شیمی هتروسکیل"، ع. شفیع، ب. فرزامفر، ه. حامدیفر، ف. هادی زاده، چاپ اول، انتشارات دانشگاه تهران، تهران.

[82] Available at [www.wikipedia.com/thiophene](http://www.wikipedia.com/thiophene)

[83] J. Roncali, (1992). "Conjugated poly thiophenes: Synthesis, Functionalization and Applications." , Chemical Reviews, 92 , 4, pp. 111-738.

[84] J. Roncali, (1992). "Synthetic Principles for Band gap control in linear  $\pi$  –Conjugated Systems ." , Chemical Reviews, 97 , pp. 173.

[85] R. T. Sugimoto, S. Takeda, H. B. Gu, K. Yoshin, (1986). "Preparation of soluble polythiophene derivatives utilizing transition metal halides as catalysts and their property." Chem. Express., Vol.1., pp. 635.

[86] S. Hasiah, K. Ibrahim, H. B. Senin, & F. S. Mohamed, (2007, May). "A Preliminary Study of Cyclic Voltammetry of a Conducting Polymer.", Solid State Science and Technology,. Vol. 909, pp. 238-242.

[87] A. D. Sidotov, A. A. Pud, (2010). "In situ spectorelectrochemical study of dissolved oligomer products formed in the electrochemical polymerization of 3-methylthiophene.", Theoretical and Experimental Chemistry., Vol. 46, No. 3, pp. 158-162.

[88] M. Ak, (2006). "Synthesis of polythiophene and polypyrrol derivatives and their application in electrochromic deviecs."

[89] S. R. Kwang, L. Youngil, H. Kyoo-Seung, G.K. Min, (2004). " The electrochemical performance of polythiophene synthesized by chemical method as the polymer battery electrode." Mater. Chem. Phys., Vol. 84, pp. 380-384.

[90] S. Richard Prabhu Gnanakan, M. Rajasekhar, A. Subramania, (2009). "Synthesis of Polythiophene Nanoparticles by Surfactant-Assisted Dilute Polymerization Method for High Performance Redox Supercapacitors." Int. J. Electrochem. Sci., Vol. 4, pp. 1289-1310.

[91] M. R. Karim, K. T. Lim, C. J. Lee, M. S. Lee, (2007). "A facil synthesis of polythiophene nanowires." Synth. Met., Vol. 157, pp. 1008-1012.

[92] N. N. Gathitu, Y. Chang, J. Zhang, (2013). " Anchor position and donor/acceptor effects on transport properties in fused benzene-substituted oligothiophene molecular device.", Physica E, Vol. 54. pp. 247-252.

[93] R. Pilevarshahri, I. Rungger, T. Archer, S. Sanvito, N. Shahtahmasebi, (2011). "Spin transport in higher n-acene molecules.", PHYSICAL REVIEW B.,84, 174437.

[94] R. Yamada, H. Kumazawa, T. Noutoshi, (2008). "Electical Conductance of Oligothiophene Molecular Wires." , NANO LETTERS, Vol.8,No.4, 1237-1240.

[95] P. Hohenberg and W. Kohn, (1964). "Inhomogeneous Electron Gas. ", Phys. Rev.

B, 136, pp .864.

- [96] D. S. Sholl and J. A. Steckel., (2009). "Density Functional Theory: A Practical Introduction.", John Wiley & Sons, Inc., USA.
- [97] J. P. Perdew and Y. Wang, (1992). "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. ", Phys. Rev. B, 45, pp.13244.
- [98] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, (1997). "Generalized Gradient Approximation Made Simple"., Phys. Rev. Lett, 77, pp .3865.
- [99] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordejon, and D. Sanchez-Portal, (2002). "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation"., J. Phys : Condens. Matter, 14, pp. 2745.
- [100] X. Gonze, I. M. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G. M. Rignanese, L. Sindic, M. Verstraete, G. Zerah, F. Jollet, et al, (2002). "First-principles computation of material properties: the ABINIT software project"., Comput. Mat. Science, 25, pp .478.
- [101] Vienna ab-initio simulation package, URL <http://cms.mpi.llnivia.ac.at/lvasp>.
- [102] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz.Wienzk, URL <http://www.wien2k.at>.
- [103] Quantum Espresso, URL <http://www.quantum-espresso.org>.
- [104] Openmx, URL <http://www.openmx-square.org>.
- [105] P. Ordejon, (1998). "Order-N tight-binding methods for electronic-structure and molecular dynamics"., Comput. Mater. Sci, 12, pp .157.
- [106] P. Ordejon, E. Artacho, and J. Soler, (1996). "Self-consistent order-N density-functional calculations for very large systems"., Phys. Rev. B, 53, pp .10441.
- [107] P. Ordejon, D. A. Drabold, M. P. Grumbach, and R. M. Martin, (1997)., Phys. Rev. B 48, 65,453.
- [108] N. Troullier and J. Martins, (1991). "Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations"., Phys. Rev. B, 43, pp .1993.
- [109] N. Troullier and J. Martins, (1991). "Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. II. Operators for fast iterative diagonalization"., Phys. Rev. B, 43, pp. 8861.
- [110] L. Kleinman and D. Bylander,(1982)."Efficacious Form for Model Pseudopotentials"., Phys. Rev. Lett, 48, pp .1425.
- [111] L. Esaki,(1958). Phys. Rev. Vol. 109, pp. 603.
- [112] H. Cheraghchi, k. Esfarjani, (2013)."Nagative differential resistance in molecular junctions: application to grapheme ribbon jaunctions.",Physical.Review.B,Vol.78,pp. 085123.
- [113] R. Pati, M. McClain, and A. Bandyopadhyay, (2008). "Origin of negative

differential resistance in a strongly coupled single molecule-metal junction device." Phys. Rev. Lett., Vol. 100, no. 24, pp. 2–5.

[114] R. Landaure, (1996). "in Coulomb and Interference Effect in Small Electronic Structures.", Math-Phys, Vol. 37., pp 5259-5264.

[115] R. Landaure, (1996). "Spatial variation of currents and fields due to localized scatteres in metallic conduction.", J. Math. Phys., Vol. 37. pp .5259.

[116] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, (1958). "Generalized many-channel conductance formula with application to small rings.", Phys. Rev.B.,Vol. 31, pp. 6027-6215.

[117] M. Buttiker,(1986). "Four- Terminal Phase-Coherent Conductance.", Phys. Rev, Lett., Vol. 57, pp. 1761.

[118] IP. Fulde, (1995). "Electron Correlations in Molecules and Solids Springer, Berlin."

[119]S. Datta,(1995). "Electronic Transport in Mesoscopic Systems.",(Cambridge University Press)

[120] H. Haug and A.-P. Jauho, (1996). "Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors Springer- Verlag, Berlin",

[121] S. Datta, , (1995). "Electronic Transport in Mesoscopic Systems, edited by H. Ahmed, M. Pepper, and A. Broers Cambridge University Press, Cambridge, England."

[122] M. Brandbyge, K. Stokbro, J. Taylor, J.L. Mozos, and P. Ordejo'n,(2001). "Nonlithography and Lithographic Methods of Nanofabrication—From Ultralarge-Scale Integration to Photonics to Molecular Electronics.", edited by L. Merhari, J.A. Rogers, A. Karim, D.J. Norris, and Y. Xia, MRS Symposia Proceed Proceedings,Vol. 636 Materials Rearch Society, Boston, p. D9.25.

[123] Ozan.ARI, (2011), master. thesis, "ELECTRONIC, SPINTRONIC AND TRANSPORT PROPERTIES OF CARBON BASED NANOWIRES", the Graduate School of Engineering and Sciences of Izmir Institute of Technology.

[124] E. Economou, (1995). "Green's Functions in Quantum Physics (Spinger-Verlag, Berlin).".

[125] A. P. Jauho,(2003). "Progress in nonequilibrium Green's functions II (World Scientific Publishing Co., Singeapore).".

[126] H. Haug and A. P. Jauho, (1996). "Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors(springer, Berlin).".

[127] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. Garica, J. Junguera, P. Ordejen, and D. Sanchez-Portal, (2002). J. Phys.: Condens. Matter 14, 2745.

- [128] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, (1997) "Generalized Gradient Approximation Made Simple", Phys. Rev. Lett, 77, pp 3865..
- [129] J. P. Perdew and A. Zunger, (1981) "Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems", Phys. Rev. B, 23, pp 5048.
- [130] I. Rungger, (2008). Computational methods for electron transport and their application in nanodevices, Ph.D. Thesis, Trinity College Dublin.
- [131] <http://www.quantumwise.com>
- [۱۳۲] م. شعبانی، (۱۳۹۳). پایان نامه کارشناسی ارشد، "بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های گالیوم نیتراید آلائیده با عناصر واسطه توسط رهیافت نظریه تابعی چگالی".
- [133] C. Toher, I. Rungger, and S. Sanvito (2009). Phys. Rev. B 79, 205427.
- [134] Žutić, I. Fabian, J. Das Sarma, S. (2004). "Spintronics: Fundamentals and applications." Phys.Rev.Mod., Vol. 76.
- [135] J. B. Murowchick, H. L. Barnes, (1986). American Mineralogist 71, 1243.
- [136] J. Izquierdo, A. Vega, L. C. Balbas, D. Sanchez-Portal, J. Junquera, E. Artacho, J. M. Soler, and P. Ordejon, (2000). Phys. Rev B 61, 13639.
- [137] Webelements: the periodic table on the web, URL <http://www.webelements.com>.
- [138] Umaba D. Khachar, (2012). "Investigations on nanostructured mixed oxide systems."
- [139] E. Y. Tsybal, I. Zutic, (2012). " HANDBOOK of SPIN TRANSPORT and MAGNETISM.", CRC Press. Taylor & Francis Group.

**Key words:** Oligothiophene, Density Functional Theory (DFT), SIESTA and TRANSIESTA codes, Non-Equilibrium Green's Function(NEGF), Negative Differential Resistance (NDR), Molecular Spintronics, Tunneling Magnetic Resistance(TMR), Spin Filtering Effect (SFE).



## Abstract

Nowadays, a wide range of studies on organic molecules as an electronic devices and molecular spintronic are being investigated. Organic molecules are used as a molecular channel because of its special properties such as controllable structure, cheapness, flexibility and also a large spin coherence length compare to other common metal and semiconductors. Poly-Thiophene and its derivatives due to good optical, electrochemical and magnetic properties, has an important priority and therefore uses widely among the electrically conductive polymers. In this research, at first, the structural and electronic properties of pure oligothiophenes ( $n=1$  to 10) and contacted to the sulfur, has been investigated with the approach of density functional theory (DFT) and generalized gradient approximation (GGA) by SIESTA computational code. The results indicates that the magnitude of the energy gap (HOMO – LUMO) exponentially decreases by increasing the oligothiophene length; and pure oligothiophene has no magnetic property, while oligothiophenes contacted to the sulfure from penta thiophene show magnetic property

Then, the electronic transport properties of the Au electrode /n-oligothiophenes/ Au electrode molecular wires, for (100) and (111) Au surfaces contacted in two different angles; 0 and 90 degrees, have been investigated by using non-equilibrium Green's function (NEGF), Landaur - Buttiker formulation and TRANSIESTA computation code. The results revealed that current increases by increasing the applied voltage in each oligothiophene and decreases by increasing thiophene rings in a specific voltage. Also for some oligothiophenes, the phenomenon of negative differential resistance (NDR) have been observed.

In the next step, the spin-dependent transport properties of oligothiophenes in a tunnel junction, Fe electrode/ n-oligothiophenes/ Fe electrode, for (100) and (111) Fe surfaces have been investigated. The results derived from calculations of the tunnel magnetic resistance (TMR) show that the highest percentage of tunnel magnetic resistance is equivalent to 1730 percent. The results of spin filtering effect (SFE) revealed that the highest percentage is approximately to %96.66 percent. According to the results of this research, the oligothiophenes suggested as a proper candidate for application in molecular spintronics devices, magnetic memory cells and in switching devices.



Shahrood University

Faculty of Physic

**First principles study of transport properties of oligothiophenes**

By

**Farshid Enayati Sangesereki**

Supervisors

**Dr. Tayebeh Movlarooy**

Advisor

**Dr. Raheleh Pilevar Shahri**

**September 2015**