به نام خدا

مطالعه تئوری بر روی خواص الکتریکی سوئیچ های مولکولی

مولف:

طیبه مرادپور شورباخورلو

انتشارات ارسطو

(سازمان چاپ و نشر ایران – ۱۴۰۳)

نسخه الکترونیکی این اثر در سایت سازمان چاپ و نشر ایران و اپلیکیشن کتاب رسان موجود می باشد

chaponashr.ir

سرشناسه : مرادپور شورباخورلو، طیبه، ۱۳۶۴
عنوان و نام پدیدآور : مطالعه تئوری بر روی خواص الکتریکی سوئیچ های مولکولی/ مولف طیبه مرادپور شورباخورلو.
مشخصات نشر : انتشارات ارسطو (سازمان چاپ و نشر ایران)،۱۴۰۳.
مشخصات ظاهری : ۵۰ ص.
شابک : ۶-۷۱۲-۴۰۸-۶۲۲-۹۷۸
وضعیت فهرست نویسی : فیپا
موضوع : سوئیچ های مولکولی - خواص الکتریکی
رده بندی کنگره : GV۴۷۸
رده بندی دیویی : ۳۷۳/۴۴
شماره کتابشناسی ملی : ۹۷۶۲۲۵۷
اطلاعات رکورد کتابشناسی : فیپا

نام کتاب : مطالعه تئوری بر روی خواص الکتریکی سوئیچ های مولکولی
مولف : طیبه مرادپور شورباخورلو
ناشر : انتشارات ارسطو (سازمان چاپ و نشر ایران)
صفحه آرایی، تنظیم و طرح جلد: پروانه مهاجر
تیراژ : ۱۰۰۰ جلد
نوبت چاپ : اول - ۱۴۰۳
چاپ : زبرجد
قیمت : ۵۰۰۰۰ تومان
فروش نسخه الکترونیکی - کتاب‌رسان :
https://chaponashr.ir/ketabresan
شابک : ۶-۷۱۲-۴۰۸-۶۲۲-۹۷۸
تلفن مرکز پخش : ۰۹۱۲۰۲۳۹۲۵۵
www. chaponashr. ir

انتشارات ارسطو
چاپ و نشر ایران
Chaponashr.ir

فهرست

فصل اول: مقدمه ۷

معرفی سوئیچ های ملکولی ۷

خواص سوئیچ های ملکولی ۱۱

فصل دوم: مروری بر مقالات ۱۵

اثر گروه های استخلافی ۱۵

نقش پل های π-آروماتیک روی خواص انتقالی الکترونی ۱۹

شکل۲.۳. سیستم های مختلف دهنده-پل-گیرنده ۱۹

فصل سوم:مبانی تئوری ۲۳

روش های از اساس ۲۳

نظریه تابعیت چگالی الکترونی[۱] (DFT) ۲۴

آنالیز جمعیت مولیکن[۱] (MPA) ۳۲

روش محاسباتی در این تحقیق ۳۵

فصل چهارم: بحث و نتیجه گیری ۳۷

مشخصات ۳۷

ساختار الکترونی سوئیچ های ملکولی ۳۹

اثر میدان الکتریکی روی ساختار هندسی سوئیچ های ملکولی ۴۱
اثر میدان الکتریکی روی ساختار الکترونی سوئیچ های ملکولی ۴۳
اثر میدان الکتریکی روی ممان دو قطبی[۱] ۴۵
اثر میدان الکتریکی روی انتقال بار(CT) ۴۶
اثر میدان الکتریکی روی چگالی سطوح (DOS) ۴۷
نتیجه گیری ۴۹

بسم الله الرحمن الرحیم

منت خدای را که خرد از بیان شأ نش قاصر و قلم ازتوان وصفش عاجز است.

اوست که بر خلقت مکان قامت افراشت و به آیت کن فیکون آسمان و زمین را آفرید. آنگاه به شراب عشق خمیر جان را سرشت و به شاهد علم الانسان مالم یعلم به تأدیب او همت گماشت تا بدین نشان از بهایم تمایز یابد.

تقدیم به پیشگاه مقدس حضرت

احمد ابن موسی شاهچراغ (ع)

که خداوند منان افتخار تحصیل در جوار مرقد مطهرش را نصیبم فرمود.

و

تقدیم به پدر گرامی ام که با شرافت زندگی کردن را از او آموختم.

در برابر کرامتش زانوی ادب بر زمین مینهم.

و

تقدیم به مادر مهربانم که صبوری ، توکل و قناعت را به من هدیه داد.

بر دستان پر مهرش بوسه میزنم.

و

تقدیم به همسرم که با عشق مرا یاری کرد.

من لم یشکر المخلوق لم یشکر الخالق

فصل اول:

مقدمه

معرفی سوئیچ های ملکولی

قطع ووصل جریان[1] در تک لایه های ملکولی در قلب زیست شناسی و نانو الکترونیک قرار دارد. سوئیچ های تک ملکولی موضوع مطالعات تجربی و تئوری هستند، که برای فهم رفتار و مهندسی و طرح کردن خواص آنها بسیار تلاش شده است. رسانایی ملکولی به طور وسیع بوسیله ی تغییرات کنفورماسیونی در ملکول رسانا با اعمال میدان الکتریکی خارجی[2]وتغییرات ساختاری در محیطی که ملکول در آن قرار دارد، ایجاد می شود. مطالعات اخیر اثبات کرده اند که تغییرات در رسانایی ملکولی به علت میدان الکتریکی محلی است. مرحله ی بحرانی بعدی، روش بسیار عمومی تغییر میدان الکتروستاتیک محلی است.

ساده ترین جزء الکترونیکی برای رسانایی جریان، سیم[3] می باشد. رسانایی یک سیم ملکولی مستلزم این است که ملکول طوری کشیده شود که الکترون ها بتوانند به سادگی از یک سر ملکول به سر دیگر آن جریان پیدا کنند. بعضی

از گروه های تحقیقاتی سیم های ملکولی را سنتز کرده اند و توانایی آنها را برای رسانایی الکتریسیته به اثبات رسانیده اند.

وسایل الکترونیکی[۴] که بین حالت های با حساسیت بالا و پایین سوئیچ می کنند، در قلب اطلاعات مدرن تکنولوژی قرار دارند. چنانچه با کوچک سازی فرآیند های پیوسته تکنولوژی، توقف مسائل اساسی شناسایی و فهم سیستم های ساده فیزیکی که قادرند رفتار های سوئیچ شدن (قطع و وصل جریان) از خود نشان دهند توجه زیادی به خود جلب می کنند. اخیراً به صورت تجربی کشف شده است که بعضی از سیم های ملکولی (از قبیل تک ملکول ها که یک جریان الکتریکی را بین یک جفت نانو الکترود حمل می کنند) می توانند پایداری دوگانه الکتریکی از خود نشان دهند و بین حالت های با رسانایی قوی و ضعیف به صورت کاملاً خود بخودی یا در پاسخ به یک تغییر در ولتاژ به کار برده شده سوئیچ کنند.

[۱] Switching

[۲] External electric fields

[۳] Wire

[۴] Electronic devices

پیشنهاد شده است که این رفتار جالب ممکن است به علت باردار شدن ملکول و یا تغییر هندسی (کنفورماسیون) ملکولی باشد. به هر حال پیچیدگی سیستم های تجربی از توسعه توضیحات کمی جلوگیری می کند. از لحاظ تئوری، امکان ایجاد سیم های ملکولی که بوسیله یک الکترود سه گانه در داخل به همان اندازه ی احتمال طراحی سیم های دو انتهایی که به علت تغییرات ساختاری حاصل از القای میدان الکتریکی سوئیچ می کنند وجود دارد.

یک جریان رایج در احتمال استفاده از ملکول ها برای پیاده سازی وسایل سودمند وجود دارد. اولین مرحله در این مسیر بیش از ۳۰ سال پیش ایجاد شده است، که منجر به ایجاد رشته ای به نام الکترونیک ملکولی[1] شده است. بیشتر تلاش ها به سمت فهم بهتر رسانایی در میدان ملکول ها است، با هدف طراحی ساختار هایی که سرانجام برای فرآیند های اطلاعاتی مفید و مناسب خواهند بود. فعالیت های مداوم زیادی در زمینه تک ملکول ها وجود دارد که نتایج تئوری زیادی بدست آمده است. با وجود فعالیت تحقیقاتی زیاد، چندین مسائل تکنولوژی و مفهومی، پیشرفت ها را در این زمینه کند کرده است و اثبات دستگاه های ملکولی هنوز یک هدف دور می باشد. اگر چه بیشتر پیشرفت ها در تولیدات نانو ایجاد شده است، دستکاری اندازه های ملکولی هنوز بسیار چالش برانگیز است. در آزمایشات تک ملکولی، اغلب عدم قطعیت در تعیین تعداد واقعی ملکول هایی که بین اتصالات فلزی قرار دارند، وجود دارد. چندین مطالعه، بینش مفیدی را در زمینه ی هندسه ی نقطه اتصال و بر

هم کنش فلز-ملکول که به طور کامل مشخص نشده است، فراهم کرده اند. بنابراین، نقش اتصالات در تعیین انتقالات هنوز به خوبی تعیین نشده است.

به طور طبیعی، نماینده سیم های ملکولی اغلب پلیمرها یا الیگومرها هستند، اما پل های ملکولی[۲] کوچکتر هم مورد تحقیق و بررسی قرار گرفته اند. در بیشتر موارد، برای داشتن یک رسانایی خوب و پخش وسیع الکترون ها، سیستم های مطالعه شده سیستم های π-پیوسته[۳] هستند. سیستم های پیوسته مسیری را فراهم می کنند که ابر الکترونی بین اجزای ملکول همپوشانی کند و الکترون ها بتوانند از یک سر ملکول به سر در آن حرکت کنند.

[۱] Molecular electronics

[۲] Molecular bridges

[۳] Conjugate

دامنه ی وسیعی از ملکول ها از قبیل سیم های ملکولی[۱]، دیودهای ملکولی[۲]، دستگاه های ذخیره سازی ملکولی[۳]، سوئیچ های ملکولی[۴] و ... برای استفاده به عنوان دستگاه های ملکولی[۵] پیشنهاد شده است. در میان انواع مختلفی از ملکول هایی که می توانند به عنوان دستگاه ملکولی عمل کنند، ملکول های آلی پیوسته و مشتقات آنها می باشند که به دلیل مشخصه ی ساختاری اشان در انتقال الکترون بسیار مورد توجه می باشند. هیدروکربن های کانجوگه، کربن نانو لوله ها و ... انواعی از سیم های ملکولی هستند

خواص سوئیچ های ملکولی

لازمه ی اساسی برای یک سوئیچ ملکولی پایداری دوگانه آن است که در آن دو فرم مختلف یک ملکول بوسیله ی یک تحریک خارجی اتفاق می افتد. این پایداری دوگانه بر اساس خواص مختلفی از ملکول از قبیل انتقال الکترون، تغییرات و تبدیلات درونی[۶] و اختلاف در رفتارهای پیچیده که توسط نور، گرما، فشار، میدان های مغناطیسی و الکتریکی، تغییر pH یا واکنش شیمیایی بوجود می آید می تواند به حالت های پایدار درونی برسد.

در سال های اخیر، با پیشرفت تکنولوژی برای دستکاری ملکول های منفرد، خواص انتقالی الکترونی در میان دستگاه های ملکولی به خاطر خواص فیزیکی جدید و پتانسیل به کار برده شده برای دستگاه ها بسیار مورد توجه می باشند. این قبیل خواص عبارتند از: خواص تک الکترون، مقاومت دیفرانسیلی منفی[۷]، قطع و وصل جریان الکتروستاتیک اثرات حافظه[۸] و ... .

---

[۱] Molecular wires

[۲] Molecular diodes

[۳] Molecular storage devices

[۴] Molecular switches

[۵] Molecular device

[۶] Interconversion

[۷] negative differential resistance

[۸] memory effects

پیرو توسعه در آزمایشات، روش های تئوری مختلف هم مکانیسم دستگاه های ملکولی را در طول عملکرد آنها توضیح داده و تحقیقات برای ارتباط بین ساختارهای هندسی و خواص الکترونیکی آنها صورت گرفته است. به هر حال، در یک آزمایش واقعی، ملکول در مقایسه با الکترود از لحاظ اندازه یک سیستم کوچک می باشد. بنابراین ساختارهای هندسی که شامل کنفورماسیون ملکولی[۱] می باشد، می تواند از طریق دما، شار گرمایی[۲] یا میدان الکتریکی[۳] و ... به ساختار اتمی بین ملکول و الکترودهای فلزی[۴] اتصال پیدا کند. این فاکتورها ممکن است روی عملکرد دستگاه ملکولی هم اثر بگذارند. سوئیچ های ملکولی به خاطر اینکه عناصر اصلی در طراحی مدرن مدارهای منطقی و حافظه ای[۵] می باشند توجه بسیار زیادی را به خود جلب کرده اند. تغییر و تبدیل عوامل شیمیایی[۶] روی ملکول های کانجوگه ی آلی به عنوان ابزاری برای ذخیره سازی داده ها[۷] و پیشرفت اطلاعاتدر الکترونیک ملکولی پیشنهاد شده است.

---

[۱] Molecular conformation

[۲] Thermal fluctuations

[۳] Electric field

[۴] Metal electrodes

[۵] Logic and memory circuits

[۶] Chemical functions

[۷] Data storage

فصل دوم:

مروری بر مقالات

۲۵ سال پیش، AviramوRatner به صورت تئوری اثبات کردند که ملکول های آلی می توانند به عنوان تابعی مانند دیود ملکولی عمل کنند.سپس در یک سری از آزمایشات تجربی، شیمیدانان و فیزیکدانان ومهندسان نشان دادند که ملکول های منفرد می توانند رفتار رسانایی مانند یک سوئیچ و دستگاه ذخیره سازی اطلاعات از خود نشان دهند.

اثر گروه های استخلافی

در سال ۲۰۰۴، مجامدر[۱] و همکارانش اثر گروه های استخلافی را روی خواص الکترونی دستگاه های ملکولی مطالعه کردند. آنها ساختارهای هندسی و الکترونی سیستم های ملکولی استخلاف دار را مورد بررسی قرار دادند. سیستم های مطالعه شده شامل سه واحد حلقه ی بنزنی متصل شده با گروه استیلنی بودند که دو هیدروژن حلقه وسط به وسیله ی گروه های الکترون کشنده (NO_2,CN) و گروه های الکترون دهنده

[۱] C. Majumder