الملخص

هذه الاطروحه تقدم دراسة نظرية لخواص نقل الالكترون لجزيئات مانح – جسر نانوي – قابل في تقنية النانو لتركيب الاجهزه الالكترونية وتصف كيف يؤثر التركيب الجزيئي وعدد وحدات الجسر النانوي فيما إذا كانت زوجية أو فردية على خواص النقل الالكتروني وخصائص التعديل لنظام مانح- جسر – قابل. وباستخدام ab-initio transport code حسبنا التوصيلية لسلسلة من الأسلاك الجزيئية التي تحتوي وحدات جسرية . استخدمت هذه الطريقة النظرية الربط بين برنامج (SIESTA) المعتمد على (DFT) وأسلوب دالة كرين للاستطارة لحساب معامل النفاذية عند الانحياز صفر. طبقنا نموذج الترابط المتين وأسلوب دالة كرين للاستطارة في حساباتنا النظرية للمعدل الجزيئي لنظام (DBA) وحسابات المحاكاة باستخدام نظرية دالة الكثافة للمعدل الجزيئي المتضمن جزيئه (DBA) بين قطبي ذهب .تم الحصول على الإبعاد الهندسية الجزيئية المثلى كما حسبت الدوال الموجية والحالات الذاتية للمعدل باستخدام طريقة (DFT) ثم حسبت خواص انتقال الإلكترون للمعدل باستخدام صياغة دالة كرين غير المتزنة (NEGF code Sméagol). كما سلطنا الضوء على وجود رنين فانو في حساباتنا وتم حساب الصفات الالكترونية بالطريقة نفسها لأنظمة حقيقة التي يمكن استخدامها كأجهزة الكترونية في تقنيات تقنية النانو. كذالك حسبنا التوصيلية الكهربائية لأنظمة (OPE) و(OPV)، حيث قارنا بين نظامي (OPV) و (OPE) لأهميتهما في تطبيقات عديدة . بينت النتائج المستخرجة انه للحصول على تعديل عالي فأن الجزيئات يجب أن تكون على هيئة جسر من نوع (π).

Abstract

This thesis presents theoretical investigation of the electronic transport properties of Donor -NanoBridge –Acceptor molecules in Nanotechnology electronic devices structure and it describes how the molecular structure and the odd or even nano-bridge units number affect on the electronic transport properties and rectifying properties of the donor-bridge-acceptor system. By Using the ab-initio transport code SMEAGOL, we calculate the conductance of a series of molecular wires containing bridge units. This theoretical method uses a combination of the DFT code SIESTA and a Green's function scattering approach to calculate the zero-bias transmission coefficient. We apply a tight binding model and Green's function scattering approach in our theoretical calculations to molecular rectifier for DBA system and simulation calculations by density functional theory (DFT code Siesta) to molecular rectifier consisting of a DBA molecule between two Au electrodes The molecular geometries are optimized and the wave functions and the eigen states of the rectifier are calculated using the DFT method, and then the electron transport properties for the rectifier are calculated within the non-equilibrium Green's function (NEGF code Sméagol) formalism. We also highlight on the presence of Fano resonance in our calculations and the electronic properties are calculated.