

دفاعیه دکتری

جلسه دفاعیه مورخ ۹۱/۱۰/۹

ساعت: ۱۵



نام و نام خانوادگی: فرهنگ فلاح

رتبه علمی: دانشجوی دکترا

پست الکترونیکی: fallah AT iust.ac.ir

عنوان رساله: خواص اسپینی در مولکول های آلی

استاد راهنما: دکتر مهدی اسماعیل زاده

چکیده:

اسپینترونیکی و یا الکترونیک اسپینی، شاخه‌ای از علم است که به بررسی انتقال و ذخیره اطلاعات از طریق اسپین الکترون‌ها می‌پردازد. مطالعه اسپینترونیکی در حوزه الکترونیک مولکولی که علم بررسی ترابری الکترون در تک مولکول‌ها است، به شاخه جدیدی به نام اسپینترونیکی مولکولی منجر شده است. در این رساله اثر اسپین-مدار راشبا بر ترابری باری و اسپینی در تعدادی از مولکول های آلی بررسی شده است. ضرایب عبور با استفاده از روش تابع گرین تعادلی محاسبه شده‌اند. در توصیف هامیلتونی این مولکول ها از مدل هاکل استفاده شده است. ابتدا اثر اسپین-مدار راشبا بر چند مولکول آلی بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که در مولکول های ۱ و ۴-n-فنیل-دی تیولات با n زوج امکان چرخش کامل اسپین الکترون با بازدهی ۱۰۰ درصد وجود دارد که باعث قابلیت استفاده این قطعه مولکولی به عنوان یک گیت NOT می‌گردد. سپس اثر یک میدان الکتریکی خارجی علاوه بر اثر اسپین-مدار راشبا بر یک مولکول آلی بررسی شده است. نتایج تحقیقات نمایان گر امکان کنترل میزان چرخش اسپین الکترون به وسیله میدان الکتریکی خارجی می‌باشد. در این حالت با اعمال یک سیگنال مربعی برای میدان الکتریکی خارجی می‌توان یک ساعت اسپینی داشت. به دلیل ظرفیت خازنی بسیار پایین این مولکول‌ها، انتظار می‌رود این قطعه دارای سرعت عملکرد بسیار بالایی باشد. در نهایت، تأثیر برهم کنش الکترون-الکترون به طور صریح با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی کلدیش در ترابری اسپینی مولکول های ۱ و ۴-n-فنیل-دی تیولات مورد بررسی قرار گرفته است.

واژه‌های کلیدی: اسپینترونیکی، الکترونیک مولکولی، مولکول های آلی، اسپینترونیکی مولکولی، اثر

اسپین-مدار