

نمذجة ومحاكاة الإلكترونيات الجزيئية

د.م حسن البستاني *

م. نور أحمد **

(تاريخ الإيداع 2022/11/17 . قُبل للنشر في 2023/1/29)

□ ملخص □

يختص مجال البحث في علم الإلكترونيات الجزيئية حيث إمكانية بناء الأجهزة الإلكترونية اعتماداً على جزيء واحد أو عدة جزيئات. تتميز الإلكترونيات الجزيئية بصغر حجمها واستهلاكها القليل للطاقة مقارنة مع الإلكترونيات التي تعتمد على أنصاف النواقل.

لقد طور الباحثون العديد من الأجهزة الإلكترونية الجزيئية، مثل أسلاك الربط، والعناصر الإلكترونية كالموصل الثنائي بأنواعه المختلفة، والترانزستور، والبوابات المنطقية.

في هذا البحث سنقوم بدراسة لنمذجة الثنائيات الإلكترونية الجزيئية والثنائيات النفقية الرنانة (RTD) Resonant tunneling Diode بشكل رياضي لدراسة إمكانية تصميم بوابات منطقية إلكترونية جزيئية، وكذلك سنقوم بشرح آليات تصميم وتعديل هذه الجزيئات المعتمدة على أسلاك البولي فينيلين الذي يُعد الأساس لتصنيع الأسلاك الجزيئية وربط الجزيئات ببعضها بعض.

كما تم شرح طريقة الإثابة للجزيئات لتصنيع الثنائي الجزيئي وتصميم المقاومات وطرق انتقال التيار بين الجزيئات.

تم الاعتماد على المحاكى الكيمياء ArgusLab لعرض طاقة أعلى مدار جزيئي مشغول (HOMO) Highest Occupied Molecular Orbital وطاقة أدنى مدار جزيئي فارغ (LUMO) lowest unoccupied molecular orbital، وبرنامج Matlab لنمذجة عمل الثنائيات الجزيئية رياضياً ومن ثم تصميم البوابات المنطقية واختبارها، ولقد أظهرت نتائج المحاكاة التقارب مع النتائج النظرية.

الكلمات المفتاحية: الإلكترونيات الجزيئية، الثنائي النفقي الرنان RTD، طاقة أعلى مدار جزيئي مشغول HOMO، طاقة أدنى مدار جزيئي فارغ LUMO.

* مدرس في قسم هندسة النظم الحاسوبية والإلكترونية - كلية هندسة تكنولوجيا المعلومات والاتصالات - جامعة طرطوس - سوريا
** طالبة ماجستير - قسم هندسة النظم الحاسوبية والإلكترونية - كلية هندسة تكنولوجيا المعلومات والاتصالات - جامعة طرطوس - سوريا

Molecular Electronic Modeling and Simulation

Dr.Eng. Hasan Albustani *
Eng. Noor Ahmad **

(Received 17/11/2022 . Accepted 29/1/2023)

□ ABSTRACT

The field of molecular electronics research is concerned with building electronic devices based on one or more molecules. Molecular electronics are characterized by their small size and lower energy consumption compared to semiconductor electronics.

Researchers have developed many molecular electronic devices, such as interconnecting wires, electronic elements such as the diode contact, transistors, and logic gates.

In this paper, we will study the mathematical modeling of molecular electronic diodes and RTD tunneling diodes to study the possibility of designing molecular electronic logic gates, in addition to explaining the mechanisms of designing and modifying these molecules based on polyphenylene wires, which is the basis for the manufacture of Molecular wires link molecules together.

The doping method of molecules for the manufacture of molecular diode, the design of resistors and the methods of intermolecular current transmission are also explained.

The ArgusLab chemical simulator was used to display the HOMO and LUMO levels, and the Matlab program to mathematically model the work of molecular diodes and then design and test the logic gates. The simulation results showed convergence with the theoretical results.

Key words: Molecular Electronics, Resonant Tunneling Diode (RTD), highest occupied molecular orbital (HOMO), lowest unoccupied molecular orbital (LUMO).

* Assistant Professor, Computer and Electronic System Engineering Department, Information and communication Technology Engineering, Tartous University, Syria.

** Master Student – Computer and Electronic System Engineering Department – Information and communication Technology Engineering – Tartous University, Syria.

1- مقدمة

في الآونة الأخيرة، أصبحت السرعة وحجم العنصر على الشريحة واستهلاك الطاقة من أهم بارامترات تصميم الدارات المتكاملة، وقد فتحت الإلكترونيات الجزيئية الباب لتكنولوجيا جديدة في تصميم الدارات الإلكترونية حيث ستتمكن من حل المشاكل التي نعاني منها حالياً.

كان هناك تقدم كبير في تصنيع الأسلاك الإلكترونية الجزيئية [1] [2]، والصمامات الثنائية الإلكترونية الجزيئية، والمفاتيح الكهربائية ثنائية الأطراف المصنوعة من جزيئات مفردة [3] [18]. كانت هناك أيضاً تطورات في تقنيات إجراء اتصال كهربائي مع هذه الجزيئات الموصلة كهربائياً [4].

تشير هذه التطورات الواعدة في مجال الإلكترونيات الجزيئية إلى أنه من الممكن بناء دارات إلكترونية جزيئية أكثر تعقيداً وتشمل مجموعة من الثنائيات الإلكترونية الجزيئية لتعمل كدوائر منطقية رقمية.

إن تنفيذ دوائر منطقية جزيئية لا يتطلب بالضرورة استخدام ترانزستورات ثلاثية النطاق الجزيئية، ويمكن تنفيذها بعدد قليل من الثنائيات الجزيئية ثنائية الأطراف، بالتالي ستشغل الدارات المنطقية الإلكترونية الجزيئية مساحة أصغر بمليون مرة من الدارات المنطقية المماثلة التي يتم تنفيذها حالياً في دوائر أنصاف النواقل ذات الحالة الصلبة على النطاق الميكروي، مما يشكل عاملاً مهماً في تصغير الدوائر الإلكترونية.

في هذا البحث تم بناء هذه الدارات المنطقية الإلكترونية ذات المقياس الجزيئي بعدد قليل من الصمامات الثنائية الجزيئية المشابهة لتلك الموضحة تجريبياً [5][6][7][8][9]، وبالتالي قد يكون من الممكن تصنيع واختبار مثل هذا المنطق الرقمي الجزيئي الإلكتروني الصغير جداً في المستقبل القريب.

ولتحقيق ذلك لابد من أدوات نمذجة حاسوبية وبرامج محاكاة لإتاحة المجال أمام الباحثين لتقديم الحلول والتعديلات لتصميم الدوائر الجزيئية، لذلك تم في هذا البحث نمذجة عمل الإلكترونيات الجزيئية رياضياً بالاستناد لنتائج تجارب سابقة.

2 - هدف البحث

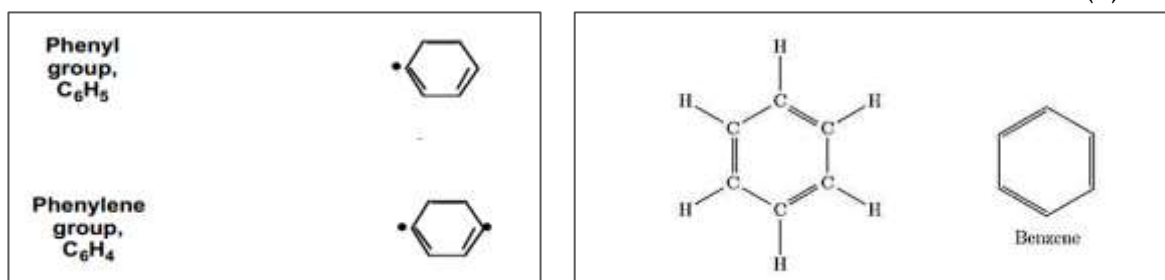
يهدف هذا البحث إلى نمذجة الأسلاك والثنائيات الجزيئية التي اقترحها العلماء رياضياً لتصميم دارات منطقية جزيئية ومقارنتها من حيث الوظيفة بالدارات الحالية مثل (بوابات AND و OR و XOR)، والاعتماد عليها لتصميم دارات منطقية جزيئية أكبر، كونه حتى الآن لا يوجد محاكيات لنمذجة هذا النوع من الدارات الهجينة ومازالت عملية تصميم الترانزستورات والثنائيات تتم رياضياً [15][16][17]، بالإضافة لإيضاح وشرح نماذج تصميم الثنائيات الجزيئية التي تعتمد على أسلاك من سلاسل البوليفينيلين التي تم تعديلها لإمكانية ربط العناصر الجزيئية مع بعضها بعضاً [3][6].

3- طرق البحث ومواده

أنجز هذا البحث اعتماداً على دراسات ومراجع علمية عديدة تختص في هذا المجال وقد أخذت نتائجها وتوصياتها بعين الاعتبار، كما تمت البرمجة باستخدام برنامج ماتلاب Matlab وتم استخدام المحاكى الكيميائي ArgusLab لعرض السويات الطاقة الأعلى المشغولة HOMO والسويات الطاقة الأدنى الفارغة LUMO.

3-1- حلقة البنزين:

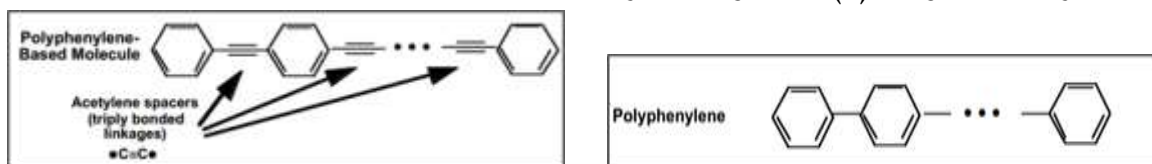
يظهر الشكل (1) حلقة بنزين فردية لها الصيغة الكيميائية C_6H_6 . يمكن نزع أحد ذرات الهيدروجين من حلقة البنزين فنحصل على البنية C_6H_5 بحيث يمكن ربط هذا المركب بمكونات جزيئية أخرى وتسمى هذه المجموعة البديلة التي تشبه الحلقة بـ "مجموعة فينيل"، ومن الممكن نزع ذرتين هيدروجين من حلقة البنزين فنحصل على البنية C_6H_4 وتسمى "الفينيلين" وهي حلقة لها موقعان متاحان للربط كما هو موضح في الشكل (2) [21].



الشكل (2) مجموعة الفينيل والفينيلين.

الشكل (1) حلقة البنزين.

من خلال ربط الفينيلينات ببعضها البعض على كلا الجانبين، وإنهاء الهياكل الشبيهة بالسلسلة مع مجموعات فينيل فنحصل على جزيء يعرف باسم "بوليفينيلين". يمكن تصنيع البوليفينيلينات في عدد من الأشكال والأطوال المختلفة كما يمكن إدخال أنواع أخرى من المجموعات الجزيئية في سلسلة البوليفينيلين (على سبيل المثال، المجموعات الأليفاتية أحادية الترابط، ومجموعات الإيثينيل المترابطة بشكل مزدوج، ومجموعات الإيثينيل أو مجموعات "الأسيتيلين" المترابطة ثلاثياً)، للحصول على جزيئات "قائمة على البوليفينيلين" مع الهياكل والخصائص المفيدة، ويوضح الشكل (3) سلسلة بوليفينيل برابطة أحادية والشكل (4) سلسلة بوليفينيلين برابطة ثلاثية.



الشكل (4) سلاسل بوليفينيلين ثلاثية الترابط

الشكل (3) سلاسل بوليفينيلين أحادية الترابط

أجرى العديد من الباحثين مؤخراً تجارب تبيين أن جزيئات البوليفينيلين لها القدرة على توصيل الكهرباء، حيث تمت المقارنة بين الأسلاك القائمة على البوليفينيلين والأنابيب النانوية الكربونية والأسلاك النحاسية، حيث تم تمرير تيار كهربائي عبر طبقة مكونة من 1000 سلك جزيئي قائم على البوليفينيلين مجتمعة في مسام بمقياس النانومتر وموصل بملامسات معدنية على كلا الطرفين وتم تلخيص نتائج العديد من هذه التجارب [2][10][6] في الجدول (1).

الجدول (1) مقارنة أسلاك البوليفينيلين والأنابيب الكربونية والنحاس

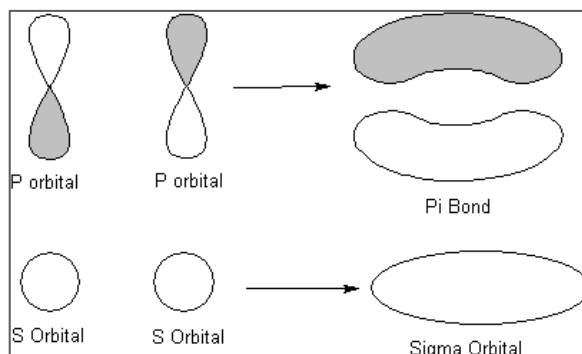
Quantity	Units	1,4-Dithiol Benzene	3-Ring Poly-phenylene Wire	Poly-phenylene RTD (5 rings)	Carbon Nanotube	Copper Wire
Applied Voltage	Volts	1	1	1.4 (peak)	1	2×10^{-3} (10 cm wire)
Current Measured in Experiment	Amperes	2×10^{-8}	3.2×10^{-5}	1.4×10^{-11}	1×10^{-7}	1 (approx.)
Current Inferred per Molecule	Amperes Electrons per Sec	2×10^{-8} 1.2×10^{11}	3.2×10^{-8} 2.0×10^{11}	1.4×10^{-14} 8.7×10^4	1×10^{-7} 6.2×10^{11}	- -
Estimated Cross-Sectional Area per Molecule	nm ²	-0.05	-0.05	-0.05	-3.1 (Radius = 1 nm)	-3.1×10^{12} (Radius = 1 mm)
Current Density	Electrons per Sec-nm ²	-2×10^{12}	-4×10^{12}	-2×10^6	-2×10^{11}	-2×10^6

نلاحظ في العمود الرابع أنَّ التيار الكلي الذي يمر عبر هذا التجمع للجزيئات يساوي تقريباً $30\mu A$ ، أي ما يقارب $30nA$ لكل جزيء، ويتوافق مع ما يقرب من 200 مليار إلكترون في الثانية يتم نقلها عبر السلك الجزيئي القصير القائم على البوليفينيلين.

نلاحظ في العمود السادس أنه تم قياس جزيء أكبر نوعاً ما وهو أنبوب نانوي كربوني، ينقل تياراً أكبر بـ 10 إلى 100 مرة من تيار السلاسل البسيطة القائمة على البوليفينيلين، تتوافق هذه القياسات المدرجة في الجدول (1)، مع تيار يتراوح من 20 إلى 500 نانو أمبير تقريباً، أو ما يقارب 0120 مليار إلى 3 تريليون إلكترون في الثانية. بالرغم من أن الأسلاك الجزيئية القائمة على البوليفينيلين لا تحمل نفس القدر من التيار مثل الأنابيب النانوية الكربونية، لكن البوليفينيلين ومشتقاته هي جزيئات أصغر بكثير وبالتالي نظراً لمساحتها الصغيرة جداً فإنها تتمتع بكثافة تيار عالية جداً، ونلاحظ في الحقل السادس من الجدول (1) أن كثافة التيار للسلك الجزيئي القائم على البوليفينيلين هي تقريباً نفس كثافة الأنابيب النانوية الكربونية وأكبر بمقدار نصف مليون مرة من كثافة التيار في السلك النحاسي.

2-3- الروابط الكيميائية:

1-2-3- التهجين: وهو عملية ترابط المدارات الذرية التي تمتلك الطاقة نفسها تقريباً لإنتاج مجموعة من المدارات الجديدة تماماً ذات الطاقة المكافئة (المدارات الهجينة)، تتناثر المدارات الهجينة مع بعضها بعض وتميل لتكون أبعد، وتتشكل روابط نوع pi بواسطة مدارات غير مهجنة وروابط نوع sigma بواسطة مدارات مهجنة، ويوضح الشكل (5) رابطة نوع pi ونوع sigma [21].

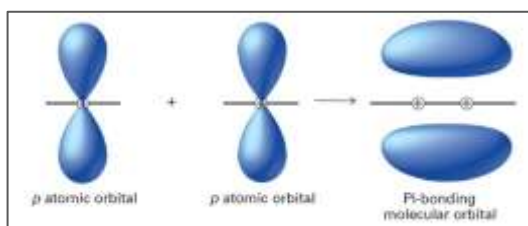


الشكل (5) رابطة pi ورابطة sigma

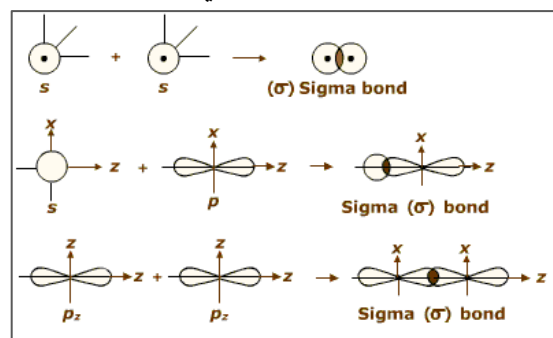
يُطلق على مدار الجزيء المتماثل على طول المحور الذي يربط بين نواتي ذريتين اسم رابطة sigma، تشكلت هذه الرابطة من تداخل مدارين s أو تداخل مدار s مع مدار p أو تداخل مدارين p، كما هو موضح في الشكل (6). تتشكل روابط pi عندما تتداخل المدارات p جنباً إلى جنب، يوضح الشكل (7) أن كثافة الإلكترونات تتركز في مناطق أعلى وأسفل محور الترابط.

إن مصدر الناقلية لسلك قائم على البوليفينيلين هو عبارة عن مجموعة من المدارات الجزيئية من النوع pi التي تقع أعلى وأسفل مستوى الجزيء عندما يكون في شكل مستوي أو بالقرب من مستوي مثال على مدار pi موضح في الشكل (8).

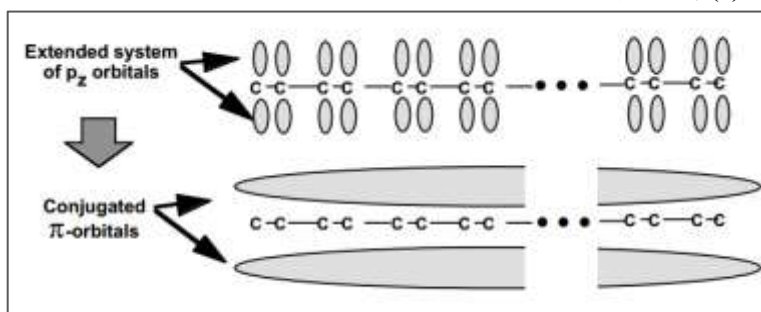
في التشكل المستوي، تتداخل المدارات باي المرتبطة بكل ذرة فردية أو "متراقة" في مجموعات مختلفة لإنشاء مجموعة من المدارات pi الممتدة التي تمتد على طول المركب. يُظهر الشكل (8) أقل طاقة مدار pi متاحة في الجزيء. تختلف المدارات ذات الطاقة العالية إلى حد ما من حيث أنها تحتوي على مستويات عقدية (مستويات يخترق فيها المدار) موجهة عمودياً على محور جزيء يشبه السلك وكلما زادت طاقة المدار زادت مستوياته العقدية.



الشكل (7) رابطة pi حيث تتركز كثافة الإلكترونات في مناطق أعلى وأسفل محور الترابط.



الشكل (6) رابطة سيجما



الشكل (8) مصدر الناقلية في رابطة باي

تقع كل من المدارات الطويلة خارج مستوى النوى في الجزيء وهي منتشرة نسبياً مقارنة بالمدارات الجزيئية من النوع الموجود في الرابطة σ وبالتالي، يمكن لواحد أو أكثر من المدارات π غير المشغولة أو المشغولة جزئياً فقط توفير "قنوات" تسمح بنقل إلكترونات إضافية من أحد طرفي الجزيء إلى الطرف الآخر عندما يكون تحت انحياز الجهد، تمت مناقشة آليات مثل هذا النقل بالتفصيل من قبل راتنر Ratner وجورتنر Jortner [11]، بناءً على دراسات تم اكتشافها من قبل موخيكيا وراتنر ومعاونوهما [12][13].

في حلقة البنزين (C_6H_6) كل ذرة كربون لها مدار p واحد، ومداران p متجاوران يتشاركان إلكتروناتهما بين أكثر من ذرتين لتكوين روابط π غير محددة. يمكن أن يمتد عدم التمرکز في البنزين إلى حلقة البنزين المجاورة الأخرى، سنطلق على مجموعة المدارات المتفرقة غير المشغولة مصطلح "تطاق توصيل".

عادةً ما يمتد مدار π عبر حلقة أو أكثر من الحلقات العطرية المجاورة في الجزيء، وكذلك عبر مجموعات أخرى متداخلة متعددة الروابط. يمكن للمدارات أن تجمع أو تندمج لتشكيل عدد أكبر من المدارات الممتدة للجزيئات، ولكل منها بنية عقدية وطاقة مختلفة. يُعتقد أن العديد من المدارات المنفصلة وغير المشغولة والمنخفضة في الطاقة مسؤولة بشكل أساسي عن التوصيل عبر الأسلاك الجزيئية القائمة على البوليغينيلين وذلك عند وضع الجزيء تحت انحياز الجهد الخارجي، بالتالي يكون مدار π غير المشغول والأقل في الطاقة مساراً أكثر فاعلية لنقل الإلكترون لأنه:

(أ) يمكن إحضاره إلى منطقة نشطة بسهولة أكبر مع بقاء أقل المدارات المشغولة بالطاقة.

(ب) المدار غير المشغول ذو الطاقة المنخفضة ينتج مساراً أكثر استقراراً للإلكترون التوصيل.

بشكل عام، أن الجزيئات العطرية مثل البوليغينيلين يمكنها نقل التيار، وينطبق هذا على الجزيئات القائمة على البوليغينيلين المرتبطة مع مجموعات أخرى مثل:

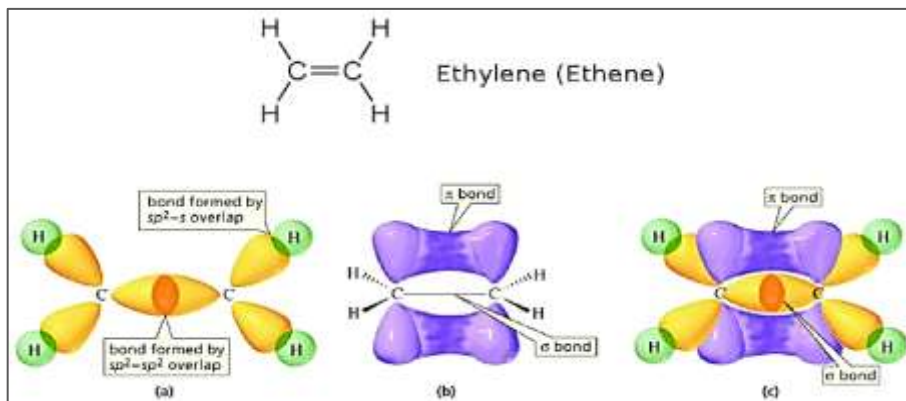
(ethenyl -HC=CH-) و(ethylen -C≡C-) التي يتم إدخالها بين الحلقات العطرية، وغالباً ما يتم إدخال روابط الإيثينيل أو الأستيلين المترابط ثلاثياً كفواصل بين حلقات الفينيل في السلك الجزيئي [10]. وتقضي هذه المبادعات على التداخل الفراغي بين ذرات الهيدروجين المرتبطة بالحلقات المجاورة. وإلا فإن هذا التداخل سيجبر الحلقات في السلك على الدوران بشكل غير مستوي وهذا من شأنه أن يقلل من مدى التداخل المداري π بين الحلقات المجاورة، ويفكك قنوات الإلكترون، ويقلل من موصلية السلك الجزيئي. تسمح الروابط الأستيلينية بالحفاظ على الموصلية على طول الجزيء بسبب كثافة الإلكترون خارج الرابطة، والتي تصبح جزءاً من قناة الإلكترون.

3-3- العوازل

3-3-1- الجزيئات العضوية الأليفاتية

الجزيئات الأليفاتية هي جزيئات محدودة مثل C-C أو C-H تحتوي فقط على روابط سيجما. تمنع الشحنة الموجبة للنواة الإلكترون من العبور على طول محور الجزيء وبالتالي لا يمكن لهذا الهيكل نقل الإلكترونات بسهولة وعندما يتم إدخال مجموعة أليفاتية صغيرة في منتصف سلسلة بوليغينيلين موصلة فإنها تكسر القناة الموصلة وتشكل حاجزاً لنقل الإلكترون.

يمكن رؤية الروابط المزدوجة في الألكينات التي تحتوي على روابط ثنائية الكربون، ويشار إليها بالهيدروكربونات غير المشبعة. الإيثين أو الإيثيلين هو أبسط ألكين، مع الصيغة C_2H_4 ، يتم تهجين الكربونات ذات الرابطة المزدوجة sp^2 ، مع وجود 3 أنواع هجينة من النوع sp لتكوين روابط سيجما، ومدار $1p$ مع إلكترون للترباط، بالتالي يمكن أن يتداخل هذان المداران المتجاوران لتشكيل رابطة π كما في الشكل (9).



الشكل (9) الروابط في الأيثيلين

يمكن استخدام البيانات المبينة في الجدول (1) لاشتقاق مؤشر تقريبي لفعالية مجموعات العزل الأليفاتية. نلاحظ في العمودين الثالث والرابع من الجدول أنه تم قياس طول حلقة واحدة وثلاث حلقات من السلك القائم على البوليفينيلين لتمرير نفس التيار تقريباً ومع ذلك في العمود الخامس تُظهر البيانات أن RTD القائم على البوليفينيل وهو عبارة عن سلك جزيئي مكون من خمس حلقات يعتمد على مادة البوليفينيل مع مجموعتين منفصلتين من الميثيلين الأليفاتي أحادي الكربون يتم إدخالهما فيه ينقل تياراً أقل بمقدار 250000 مرة من الحلقة الثلاثية الأقصر مع عدم وجود مثل هذه المجموعات الأليفاتية العازلة. بفرض أن كل مجموعة ميثيلين تقلل التيار في السلك بنفس العامل، تشير هذه البيانات أن مجموعة العزل من الكربون الواحد تعمل على تقليل تيار الإلكترون بعامل يصل إلى الجذر التربيعي لـ 250000 أي بمعامل يتراوح بين 100 و 1000 [14].

4-3- الثنائي الجزيئي

يوجد نوعين من الثنائيات الإلكترونية ذات المقياس الجزيئي وهما:

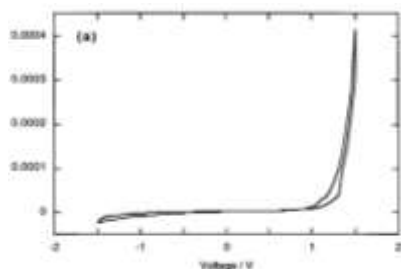
(أ) الثنائيات المعدلة.

(ب) الثنائيات النفقية الرنانة.

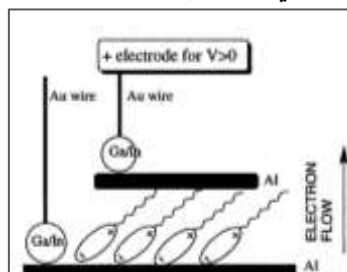
تم تصميم كل نوع من هذه الأنواع من الثنائيات الجزيئية على غرار نظائرها في الحالة الصلبة.

1-4-3- الثنائيات المعدلة:

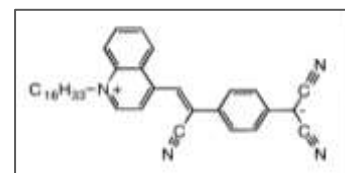
يوضح الشكل (10) النموذج الأول الذي وضعه ميتزجر Metzger في جامعة ألاباما [7] وريد Reed في جامعة بيل [6] اللذين كانا الأساس الذي تم الاعتماد عليه لاحقاً لتصميم الثنائي الجزيئي القائم على البولي فينيلين حيث قام الباحثان بتجربة سلاسل جزيئية بين قطبين ذهب لتصميم الثنائي وأثبتا بالقياس أن هذه التصاميم تعمل كثنائي حيث يبين الشكل (11) التصميم الجزيئي للثنائي المصمم من قبل ميتزجر والشكل (12) الخصائص الكهربائية لثنائي ميتزجر.



الشكل (12) الخصائص الكهربائية لثنائي ميتزجر

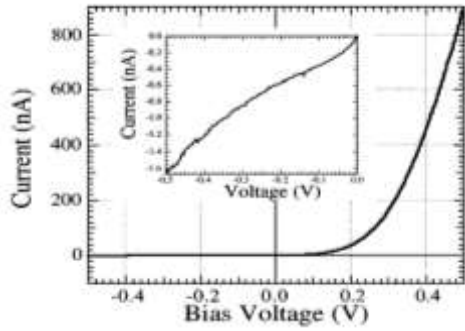


الشكل (11) تدفق التيار في تصميم ميتزجر للثنائي الجزيئي

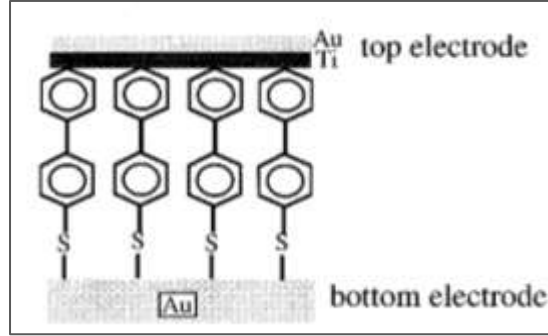


الشكل (10) تصميم ميتزجر للثنائي الجزيئي

ويوضح الشكل (13) التصميم الخاص بريد والشكل (14) الخصائص الكهربية المقاسة.



الشكل (14) الخصائص الكهربية لثنائي ريد



الشكل (13) تصميم ريد للثنائي الجزيئي

ولكن المشكلة التي اعترضتهما هي عدم القدرة على دمج التصاميم مع اسلاك البوليفينيلين لإنشاء دارة جزيئية كاملة لذلك قام كل من Aviram و Ratner بتعديل تصميم ممتزج لإمكانية دمجه مع أسلاك البوليفينيلين مع بقاء نفس الخصائص الكهربية له، لذلك سنعمد النموذج المعدل الذي اقترحه Aviram و Ratner في الدراسة [22].

يتكون الثنائي الجزيئي في هذا النموذج من ثلاثة أجزاء:

- متبرع
- آخذ

• جسر يفصل بين المتبرع والآخذ بواسطة روابط من نوع سيغما.

يبين الشكل (15) التركيب الجزيئي ومستوى الطاقة للثنائي الجزيئي المعدل الذي اقترحه Aviram و Ratner. الميزة الفريدة لهذا الثنائي أنه يستخدم أسلاك جزيئية قائمة على البوليفينيلين كعمود فقري موصل، يُطلق على المجموعات المتبرعة بالإلكترون والآخذة للإلكترون المرتبط كيميائياً بجزء واحد منشطات داخل الجزيء، تمثل هذه المجموعات شوائب للذرات تماماً مثل الإشابة في أنصاف النواقل من أجل التحكم في خصائصها الكهربية. ومع ذلك ، فإن هذا التعديل داخل الجزيء الذي يتم تطبيقه بطريقة تتفق مع استخدامه في السياقات يتم وضعه بدقة على جزيء فردي خلافاً للإشابة العشوائية في أنصاف النواقل.

يجب أن يُظهر هذا النظام الجزيئي خصائص الوصلة pn حيث أن بدائل المتبرع بالإلكترون تزيد من كثافة الإلكترون وتجعل الجزيء غنياً بالإلكترونات مثل النوع n، كذلك تعمل بدائل سحب الإلكترون على تقليل كثافة الإلكترون في الجزيء العضوي ليعمل مثل النوع p. نظراً لأن نظام المتبرع والمستقبل يمكن أن يتفاعل بقوة مع بعضهما بعضاً، يجب أن يفصل بينهما عن طريق استخدام روابط سيغما.

كما هو الحال بالنسبة للمجموعة المتبرعة X، فإن المجموعات البديلة ذات السلوك المميز لسحب الإلكترون معروفة لدى الكيميائيين العضويين، وأهمها:

– NO 2، –CN، –CHO، –COR، '، ، حيث R هي سلسلة أليفاتية.

3-1-4-3- العازل:

نلاحظ أن المجموعة العازلة R في منتصف الجزيء تمثل حاجز طاقة كامن. تعمل هذه المجموعة كجسر عازل أو حاجز بين "نصفي" المتبرع والمستقبل للتنائي، يهدف الحاجز إلى الحفاظ على عدم التوازن الناجم عن بدائل المتبرع والمستقبل X و Y على التوالي، والتي تقوم بدور الإشابة داخل الجزيئات المرتبطة كيميائياً. تمنع مجموعة الحاجز اختلاف كثافات الإلكترون في المجموعات المستبدلة على كلا الجانبين من الوصول إلى التوازن، بينما لا تزال تسمح للإلكترونات المضافة تحت انحياز الجهد بالعبور نقيماً من خلالها.

عند عدم وجود جهد خارجي نلاحظ اختلاف بين سويات الطاقة ناتج عن فرق الإشابة في المواضع النشطة لمدارات باي بين النصفين المانح والآخذ للجزيء حيث:

$$\Delta ELUMO \equiv ELUMO(\text{Donor}) - ELUMO(\text{Acceptor}) \quad (1)$$

حيث:

ELUMO(Donor): هي طاقة أدنى مدار غير مشغول على الجانب المانح.

ELUMO(Acceptor): هي طاقة أدنى مدار غير مشغول على الجانب المستقبِل.

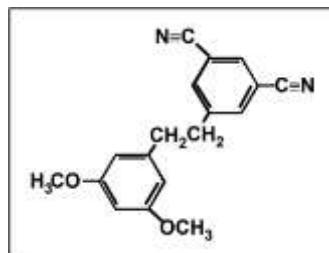
يوفر هذا الاختلاف الناجم عن الإشابة في مستويات الطاقة للمانح والآخذ الأساس لتشغيل الصمام الثنائي المعدل الجزيئي.

توجد أيضاً حواجز طاقة بين الجزيء وملامسات الذهب (Au) في كلا الطرفين بسبب روابط الثيول، حيث تعمل هذه الحواجز على الحفاظ على درجة من العزل الكهربائي بين الأجزاء المختلفة من الهيكل وهي كافية لمنع موازنة كثافات للأجزاء على كلا الجانبين ومع ذلك فإن أيّاً من هذه الحواجز لا يكون عريضاً أو مرتفعاً لدرجة تمنع الإلكترونات تماماً تحت تحييز الجهد المناسب من اختراقها.

المرشحين الأكثر احتمالاً لـ R هم المجموعات الأليفاتية مثل مجموعات الميثيلين المرتبطة برابطة سيغما (R = -CH₂-) أو مجموعات ثنائي الميثيلين (R = -CH₂CH₂-)، بالنسبة لتصميمات الصمام الثنائي المعدلة القائمة على البوليفينيلين المستخدمة هنا تم اختيار مجموعة ثنائي الميثيلين الأليفاتية لأنها أصغر مجموعة أليفاتية غير موصلة يمكن أن تكون بمثابة حاجز نفقي ضيق R. من المستحسن أن تتضافر الحلقات العطرية المستبدلة والمتلقية للجهات المانحة من أجل تعزيز مدى الاقتران المداري (π) بين الحلقات وبالتالي زيادة موصلية الثنائيات في الاتجاه المفضل. تسمح مجموعة ثنائي الميثيلين أيضاً بالتناوب الداخلي حيث يتم نقل حلقات البنزين المستبدلة والمانحة والمستقبلية إلى مستويات مختلفة، ولكنها تبقى متوازية.

ويوضح الشكل (16) بنية الجزء الآخذ والمانح مع العازل التي اختارها Aviram و Ratner ، ويوضح

الجدول (2) قيم سويات الطاقة.



الشكل (16) بنية الجزء المانح والآخذ

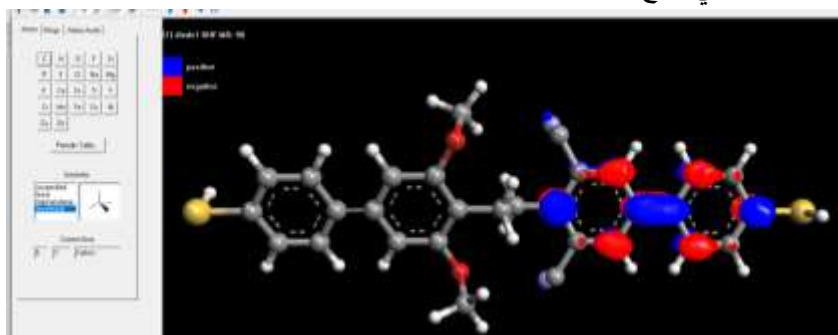
الجدول (2) طاقة المدارات الجزيئية للجزء المانح والآخذ

Molecular Orbital	Two Di-Substituted Benzene Rings are Co-Planar		Two Di-Substituted Benzene Rings are Non-Planar, but Parallel	
	Orbital Energy	Localization D A	Orbital Energy	Localization D A
HOMO	-9.23 eV	X	-9.24 eV	X
LUMO	1.52	X	1.50	X
LUMO+1	2.17 ΔE_{LUMO}	X	2.12 ΔE_{LUMO}	X
LUMO+2	3.49	X	3.49	X
LUMO+3	3.69	X	3.67	X
ΔE_{LUMO}	1.97 eV		1.99 eV	
$\Delta E_{LUMO}(R=\infty)$	2.28 eV		2.28 eV	

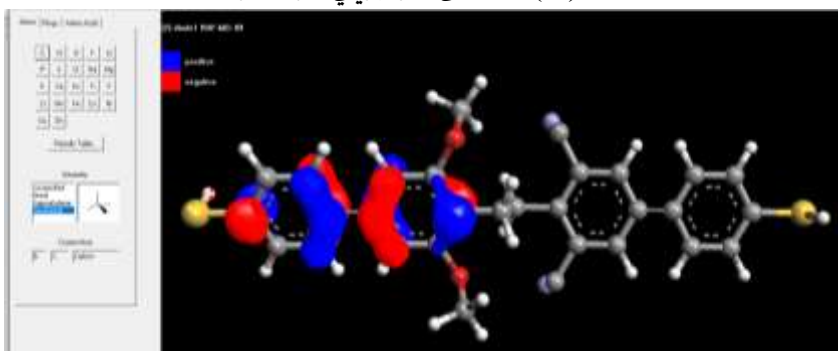
باستخدام المحاكى الكيميائي arguslab

(<http://www.arguslab.com/arguslab.com/ArgusLab.html>) سنقوم بنمذجة الثنائي وعرض طاقة أدنى

مدار غير مشغول كما في الشكل (17) وطاقة أعلى مدار مشغول كما في الشكل (18)، للتأكد من توزيع سويات الطاقة على جانبي العازل. نلاحظ ان أدنى مدار جزيئي غير مشغول يتوضع في الجانب الأيمن، بينما أعلى مدار جزيئي مشغول يتوضع في الجانب الأيسر وهو يتفق تماماً مع نموذج Aviram و Ratner، والمجموعة العازلة قامت بتشكيل عزل بين الجزيئين للثنائي لمنع الوصول لحالة التوازن.



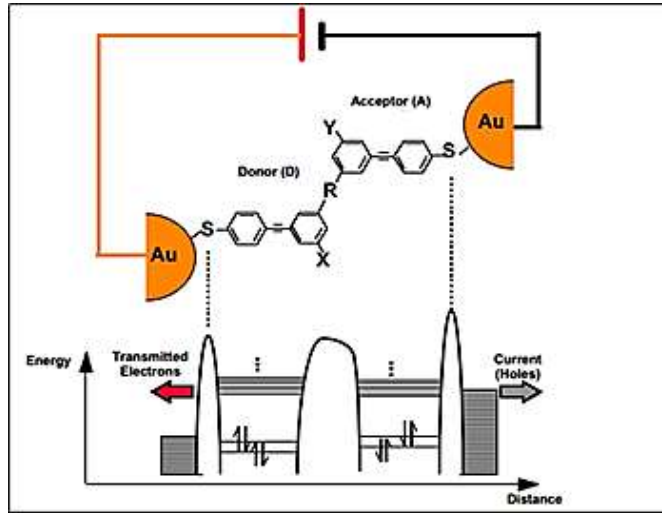
الشكل (17) طاقة أدنى مدار جزيئي غير مشغول



الشكل (18) طاقة أعلى مدار جزيئي مشغول

4-1-4-3- الانحياز الأمامي:

عند وضع انحياز جهد أمامي كما في الشكل (19)، حيث يكون الجهد أعلى على جهة التلامس الذهبية اليسرى والجهد المنخفض على اليمين، ستنتقل الإلكترونات الموجودة على الجهة اليمنى إلى طاقات أعلى والإلكترونات الموجودة في الجهة اليسرى إلى طاقات أقل، نظراً لأن تغير الطاقة للإلكترونات هو إشارة معاكسة للجهد المطبق. يحدث تفاضل الطاقة للإلكترونات في المستويات الكمومية المشغولة للتلامس الأيمن عالي الطاقة في محاولة للتدفق من اليمين إلى اليسار عبر الجزيء للوصول إلى الطاقة المنخفضة (التلامس الأيسر). نلاحظ أن المستويات الكمومية المشغولة المتباعدة بشدة في نطاق التكافؤ لكل جهة اتصال يتم تمثيلها بواسطة الخطوط الأفقية المتقاربة في أقصى اليسار وأقصى اليمين. أعلى هذه المستويات المشغولة مستوى فيرمي، في التلامس المعدني لديه طاقة تعرف باسم طاقة فيرمي (EF) فوق هذه الطاقة، توجد أيضاً مجموعة كثيفة جداً من مستويات الطاقة غير المشغولة يميل تطبيق جهد التحيز إلى رفع مستوى فيرمي في تماس الجهد المنخفض وخفض مستوى فيرمي في المستوى الآخر.



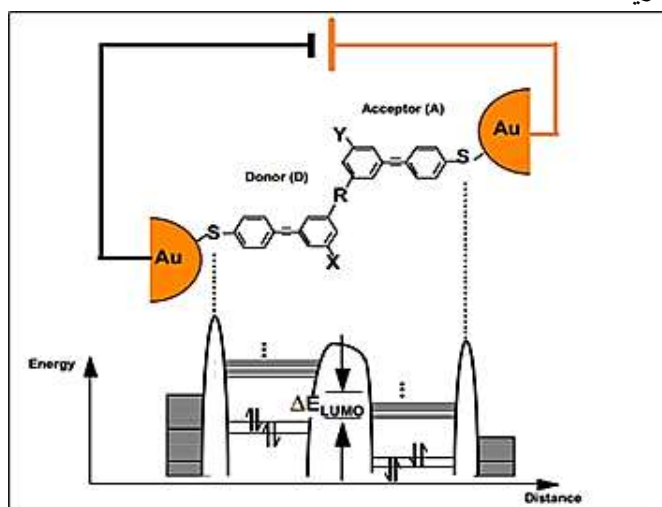
الشكل (19) الانحياز الأمامي للشئائي

لكي يحدث هذا التدفق من الإلكترونات من اليمين إلى اليسار في ظل التحيز الأمامي، يجب أن يكون تحيز الجهد كافياً لرفع سوية طاقة Fermi للإلكترونات في المستويات المشغولة للتلامس الخارجي مع الذهب على اليمين على الأقل بنفس ارتفاع طاقة المدار LUMO في جزء المستقبل الأيمن من الجزيء. بعد ذلك، يمكن للإلكترونات أن تنفق من جهة الاتصال الصحيحة إلى LUMOs الفارغة للمستقبل. ويمكن للإلكترونات التي هاجرت من جهة الاتصال اليمنى إلى LUMOs المستقبلية أن تنفق مرة أخرى إلى اليسار، حيث تظهر الإلكترونات المرسلّة تتدفق من اليمين إلى اليسار ويظهر التيار الموجب الشحنة يتدفق من اليسار إلى اليمين. تلخيصاً لآلية التحيز الأمامي، نظراً لتطبيق جهد عالٍ مطبق على جهة الاتصال اليسرى والجهد المنخفض على جهة الاتصال اليمنى: (1) تتجاوز طاقة Fermi في جهة الاتصال اليمنى طاقة LUMO في المستقبل الأيمن نصف الجزيء و (2) LUMOs على الجانب الأيسر من الجزيء تتماشى مع تلك الموجودة على الجانب الأيمن، وهذا يسمح للإلكترونات بالمرور عبر الجزيء عبر انتقال الرنين.

في حالة التحيز الأمامي، لا يلزم سوى انحياز جهد صغير نسبياً لرفع طاقة Fermi من جهة الاتصال اليمنى بدرجة كافية لتجاوز طاقة LUMO للمستقبل. وذلك لأن جميع مستويات الطاقة للمستقبل قد تم تخفيضها مسبقاً من خلال وجود مجموعة الإشباع الجزيئي Y.

3-4-1-5- الانحياز العكسي:

يتم تطبيق جهد "عكسي" على النظام كما في الشكل (20)، حيث الجهد المرتفع عند جهة التلامس الذهبية اليمنى والجهد المنخفض عند جهة التلامس اليسرى. لكي تبدأ الإلكترونات الموجودة في جهة التلامس الخارجية اليسرى في التدفق من اليسار إلى اليمين عبر الجزيء، يجب أن يكون انحياز الجهد العكسي كافياً لرفع طاقة فيرمي للتلامس الذهبي على اليسار بحيث يكون على الأقل مرتفعاً مثل طاقة مدارات LUMO في الجزء المتبرع الأيسر من الجزيء.

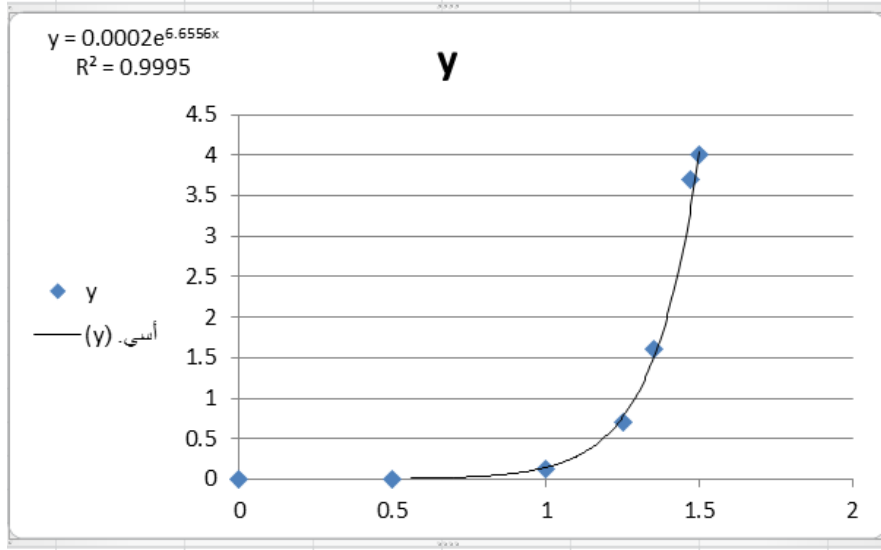


الشكل (20) الانحياز العكسي للثنائي

ومع ذلك، في حالة التحيز العكسي، يكون مقدار الجهد الذي يجب تطبيقه أكبر بكثير مما هو عليه في حالة التحيز الأمامي من أجل رفع طاقة Fermi لجهة الاتصال بشكل كافٍ لتجاوز طاقة LUMO للجزء المجاور من الجزيء. هذا لأنه كما هو موضح سابقاً تم رفع جميع مستويات الطاقة لنصف المتبرع من خلال وجود المجموعة البديلة X. وبالتالي يجب تطبيق المزيد من الجهد في الاتجاه العكسي (من اليمين إلى اليسار) أكثر من الاتجاه الأمامي (من اليسار إلى اليمين) من أجل جعل الإلكترونات تتدفق عبر الجزيء. هذا هو السلوك الكلاسيكي للثنائي. يميل التحيز العكسي إلى رفع طاقة LUMOs في الجزء المانح من الجزيء بالنسبة إلى LUMOs في المستقبل، وبالتالي يزيد من فصل المدارات غير المشغولة على جانبي الجزيء إلى قيمة أكبر من القيمة في حال عدم تطبيق جهد تحييز $\Delta ELUMO$ ، بدلاً من تقليل فصل الطاقة.

3-4-1-6- النموذج الرياضي للثنائي المعدل:

في الشكل (12) الذي يعرض الخصائص الكهربائية لثنائي ممتزج يمكن استخراج المعادلة الرياضية المميزة لهذا الثنائي باستخدام برنامج excel كما هو موضح في الشكل (21).



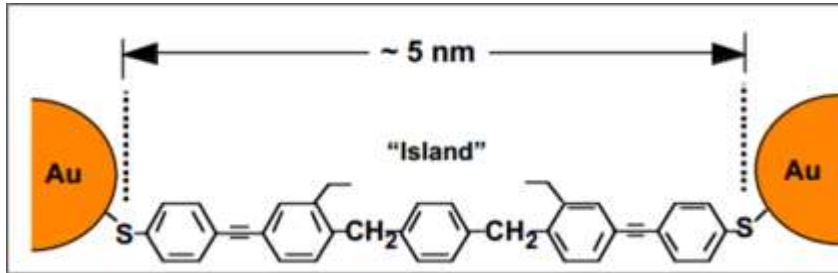
الشكل (21) استخراج معادلة الثنائي الجزئي

من الشكل (21) تظهر معادلة الثنائي الجزئي، حيث: Y : التيار المار عبر الثنائي مقدراً بـ (uA)، و X : الجهد المطبق على طرفي الثنائي مقدراً بـ (V). تم إهمال قيم الانحياز العكسي لصغر قيمة التيار بشكل لا يؤثر على التطبيقات المستخدمة في هذا البحث.

2-4-3- الثنائي النفقي الرنان:

يعتمد الثنائي النفقي الرنان على تكميم الطاقة ليسمح بتمرير أو إيقاف التيار الكهربائي من المنبع إلى المصباح وذلك عند تطبيق جهد انحياز خارجي. وعلى عكس الثنائيات الشائعة فإن التيار في الثنائي RTD يمر بشكل متساو في الاتجاهين.

يوضح الشكل (22) تصميم الثنائي النفقي الرنان الذي صممه Tour و Reed حيث قاما بحقن مجموعتي ميثيلين أليفاتية (CH₂) داخل السلك على جانبي حلقة أليفاتية مفردة (C₆H₄).



الشكل (22) الثنائي النفقي الرنان

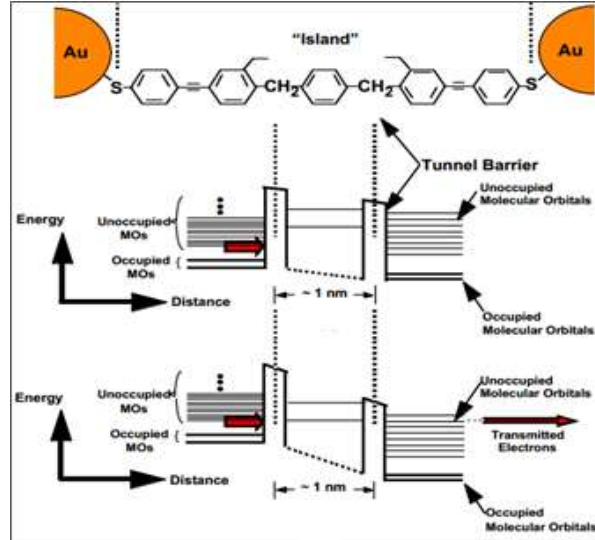
بسبب الخصائص العازلة للمجموعات الأليفاتية، فإنها تمثل حواجز طاقة كامنة تعيق تدفق الإلكترون.

1-2-4-3- آلية عمل الثنائي النفقي الرنان الجزئي:

نلاحظ في الشكل (23) أن الإلكترونات تنحصر بين حاجزين طاقيين منفصلين، وهو الأساس لتشغيل الديود النفقي الرنان.

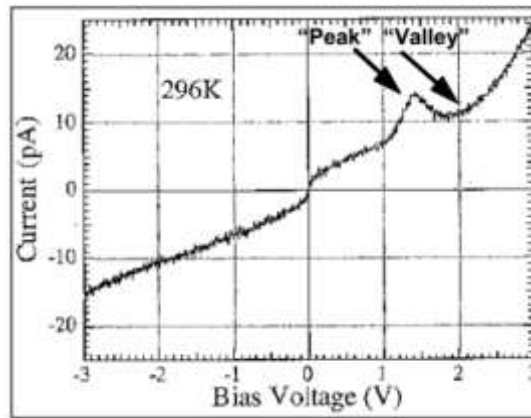
كما هو موضح في الشكل (23) عند تطبيق انحياز جهد تنتج الكثرونات قادمة بطاقات حركية تختلف عن مستويات الطاقة غير المشغولة والمتاحة داخل البئر، فلن يتدفق التيار عبر RTD.

لكن كما هو موضح في الشكل (23), إذا تم ضبط الجهد بحيث تكون طاقة الإلكترونات القادمة توازي أحد مستويات الطاقة داخل البئر, فالإلكترونات خارج البئر تصبح بحالة رنين مع سوية الطاقة المتاحة داخل البئر وعندها يستطيع الإلكترون أن يمر بشكل نفقي من المنطقة اليسرى إلى داخل البئر, وبنفس الوقت إذا كان الانحياز لمستوى الطاقة داخل البئر في حالة رنين مع أحد سويات الطاقة غير المشغولة العديدة في المنطقة اليمنى تتدفق الإلكترونات خلال الثنائي من اليسار إلى اليمين. هذا يعني أن RTD يعمل.



الشكل (23) آلية عمل الثنائي النفقي الرنان

يوضح الشكل (24) مميزة التيار بالنسبة للجهد في القياسات التي أجريت من قبل Reed وشركائه على الثنائي RTD المعتمد على البوليغينيلين.



الشكل (24) مميزة التيار بالنسبة للجهد للثنائي النفقي الرنان

يظهر أن التيار المنبعث يزداد إلى "الذروة" عند جهد الرنين ثم يهبط إلى "القاع" عندما يتجاوز الانحياز جهد الرنين.

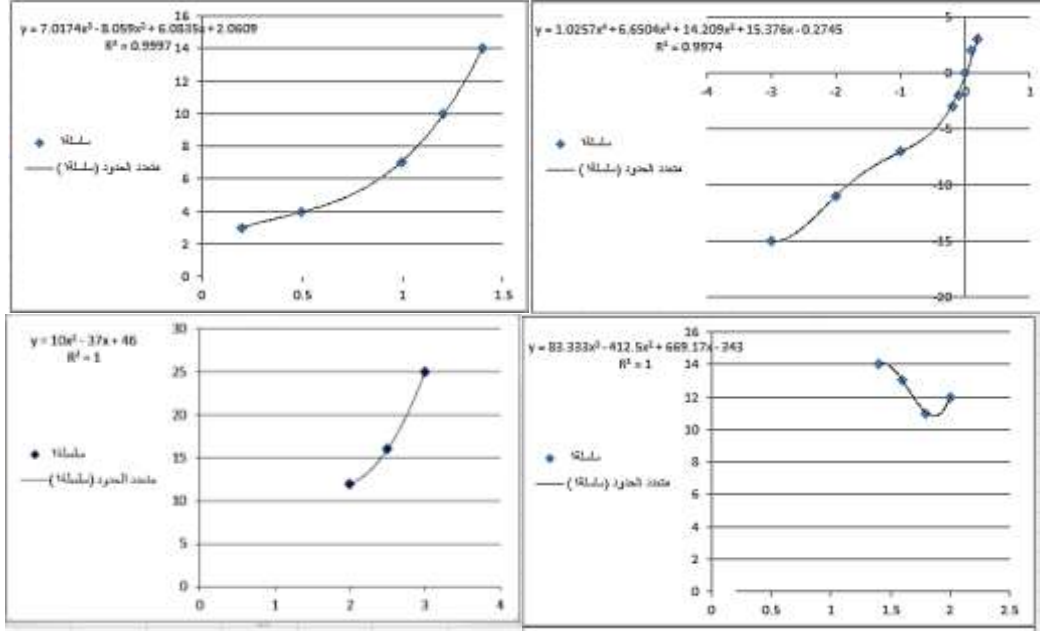
غالباً فعالية عمل الثنائي النفقي الرنان تتميز بنسبة تيار القمة إلى القاع. في الشكل (24), نسبة تيار القمة إلى القاع وتعطى بالشكل التالي:

$$n = \frac{I_{up}}{I_{down}} = \frac{13\mu A}{10\mu A} = 1.3 \quad (2)$$

حيث: N: فعالية الثنائي النفقي الرنان، و I_{up} : تيار القمة، و I_{down} : تيار القاع.

3-4-2-2- النماذج الرياضي للتنائي النفقي الرنان:

في الشكل (25) الذي يعرض الخصائص الكهربائية للتنائي النفقي الرنان يمكن استخراج المعادلة الرياضية المميزة لهذا التنائي باستخدام برنامج excel كما سبق، ولزيادة دقة المعادلة سنقوم بتقسيم المجال إلى أربع مجالات كما هو موضح.



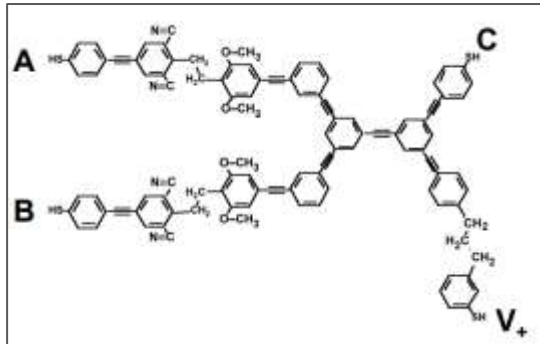
الشكل (25) استخراج معادلة التنائي النفقي الرنان

تم تقسيم مجال الجهد إلى المجالات التالية: $[-3v, 0.2v], [0.2v, 1.4v], [1.4v, 2v], [2v, 3v]$ ومن ثم استخراج المعادلة الدقيقة لكل مجال، بالتالي تكون المعادلة النهائية كما يلي:

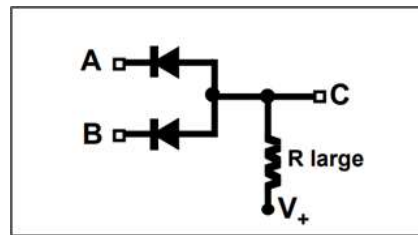
$$y = \begin{cases} 1.025x^4 + 6.65x^3 + 14.2x^2 + 15.37x - 0.27 & [-3v \rightarrow 0.2v] \\ 7.017x^3 - 8.059x^2 + 6.83x + 2.06 & [0.2v - 1.4v] \\ 83.33x^3 - 412.5x^2 + 669.17x - 343 & [1.4v \rightarrow 2v] \\ 10x^2 - 37x + 46 & [2v \rightarrow 10v] \end{cases} \quad (4)$$

3-5- تصميم ونمذجة البوابات المنطقية الجزئية:

1-5-3 بوابة AND: يوضح الشكل (26) المخطط الكهربائي لبوابة AND. باستخدام نموذج التنائي الجزئي المعدل يتم تصميم هذه البوابة بشكل جزئي كما يوضح الشكل (27).

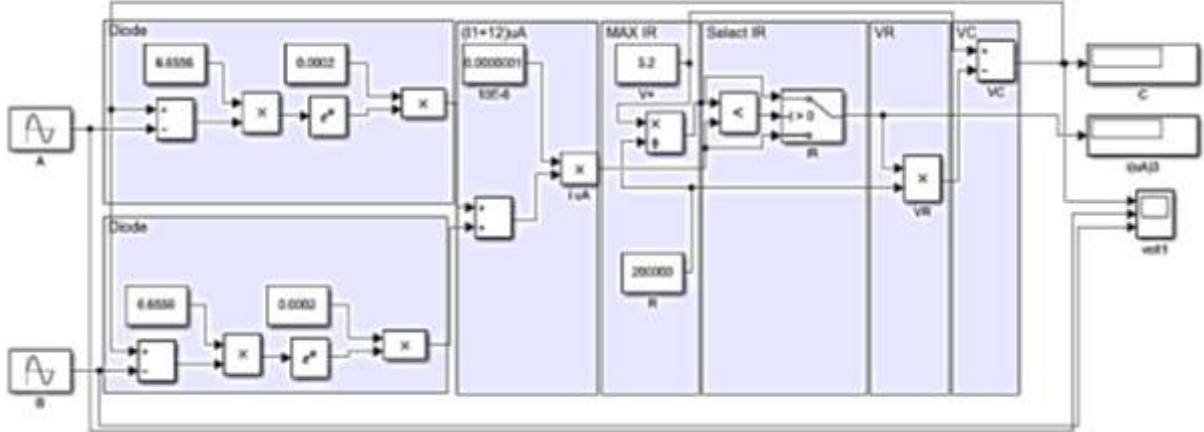


الشكل (27) التصميم الجزئي لبوابة AND



الشكل (26) المخطط الكهربائي لبوابة AND

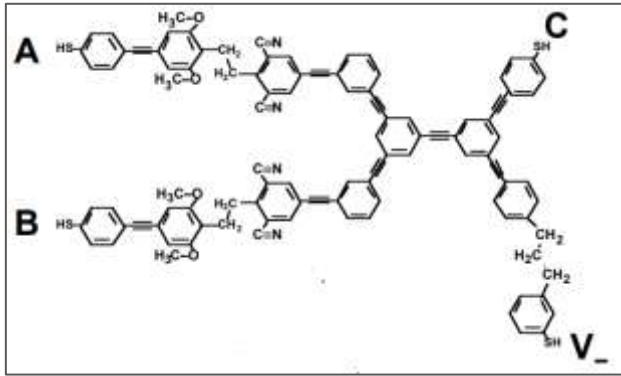
يظهر الشكل (28) نمذجة بوابة AND باستخدام MATLAB، حيث يتألف المخطط من ستة أجزاء، الأول هو التصميم الرياضي للثنائيين، والثاني حساب التيار المار عبر الثنائين بالمايكرو أمبير، والثالث حساب أعلى تيار يمكنه المرور خلال المقاومة، والرابع تحديد تيار البوابة بحيث لا يتجاوز قيمة التيار التي تستطيع المقاومة تمريره، والخامس حساب هبوط الجهد على المقاومة، والجزء السادس حساب جهد الخرج VC عن طريق طرح قيمة هبوط الجهد على المقاومة من جهد التغذية.



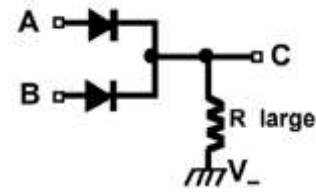
الشكل (28) نمذجة بوابة AND

3-5-2- بوابة OR: يوضح الشكل (29) المخطط الكهربائي لبوابة OR. باستخدام نموذج الثنائي

الجزيئي المعدل يتم تصميم هذه البوابة بشكل جزيئي كما يوضح الشكل (30).



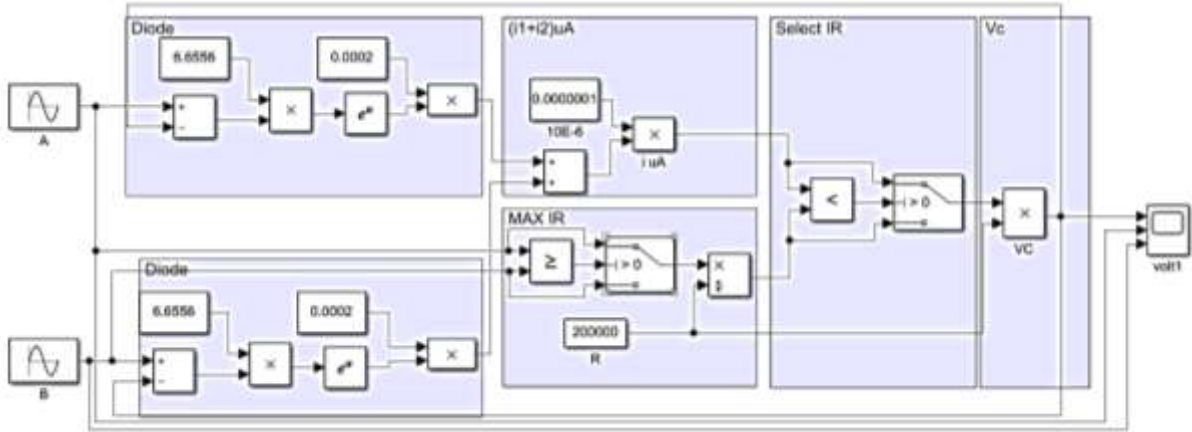
الشكل (30) التصميم الجزيئي لبوابة OR



الشكل (29) المخطط الكهربائي لبوابة OR

يظهر الشكل (31) نمذجة بوابة OR باستخدام MATLAB، كما سبق يتألف المخطط من ستة

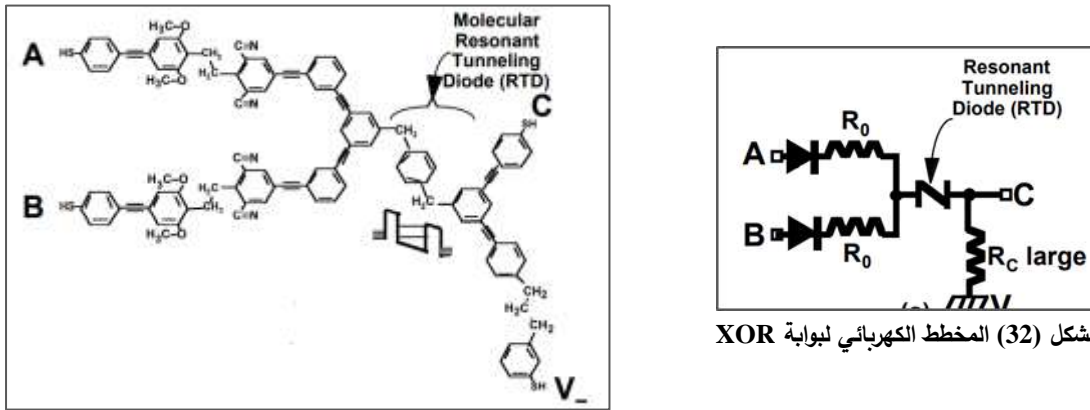
مناطق بشكل مشابه لبوابة AND.



الشكل (31) نمذجة بوابة OR

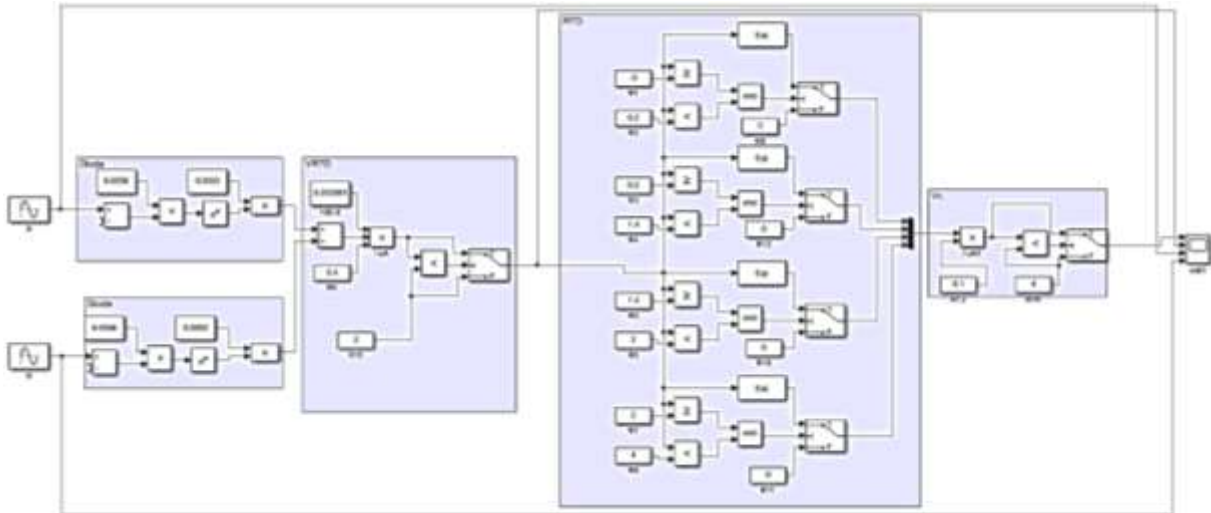
3-5-3- بوابة XOR: يوضح الشكل (32) المخطط الكهربائي لبوابة XOR. باستخدام نموذج الثنائي الجزيئي

المعدل يتم تصميم هذه البوابة بشكل جزيئي كما يوضح الشكل (33).



الشكل (33) التصميم الجزيئي لبوابة XOR

يظهر الشكل (34) نمذجة بوابة XOR باستخدام MATLAB، يتألف المخطط من ستة مناطق الأولى والثانية تمثل ثنائيات جزيئية والثالثة لحساب هبوط الجهد على الثنائي النفقي الرنان حيث يتحدد الجهد الهابط عليه على تيارات الثنائيات الجزيئية، أما القسم الرابع وهو الثنائي النفقي الرنان والجزء الأخير حساب جهد الخرج.



الشكل (34) نمذجة بوابة XOR

4- النتائج والمناقشة

سوف نناقش نتائج نمذجة البوابات AND و OR و XOR عند تطبيق إشارتي دخل جيبيتين.

أولاً: بوابة AND

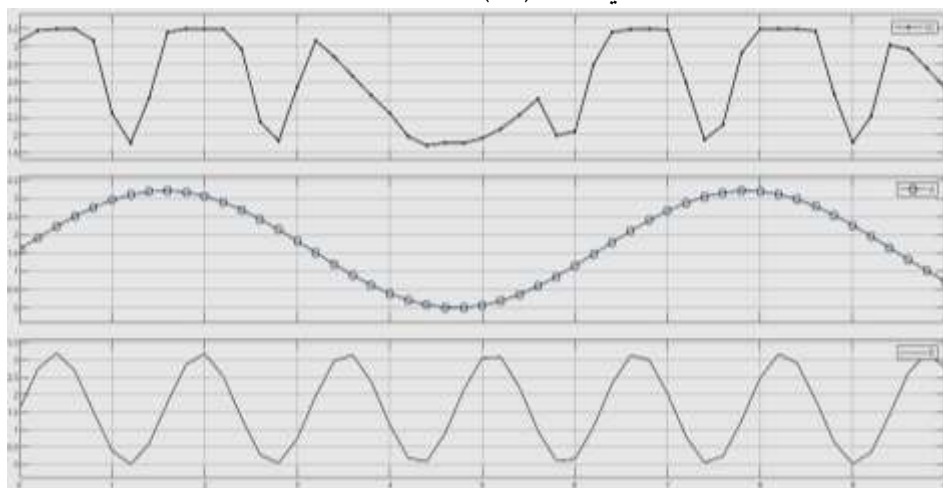
عند تطبيق إشارتي دخل جيبيتين بتردد مختلف لدراسة خرج الدارة الجزيئية نلاحظ أن إشارة الخرج تتوافق مع خرج بوابة AND حيث يرتفع جهد الخرج إلى قيمته الأعظمية عندما تتوافق قمتين لإشارتي الدخل وينخفض جهد الخرج إلى القيمة الدنيا عندما تنخفض إحدى إشارات الدخل، وبالتالي يمكن الاعتماد على التصميم الجزيئي لتحقيق وظيفة بوابة AND، كما هو مبين في الشكل(35).

ثانياً: بوابة OR:

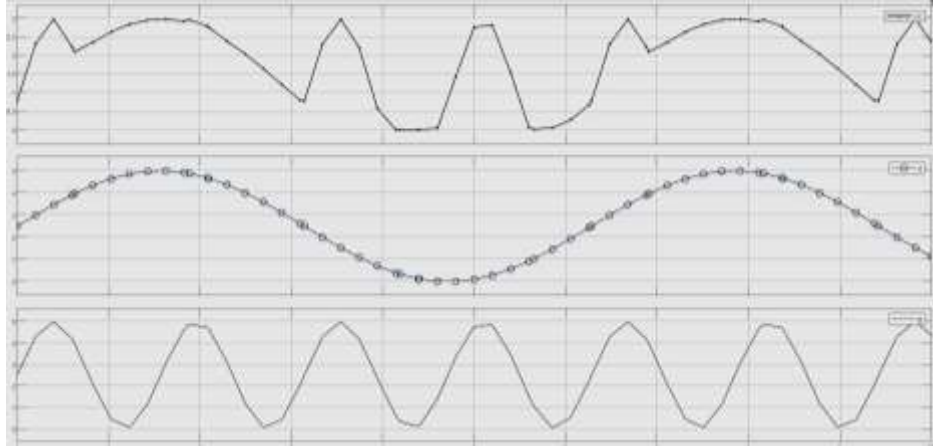
عند تطبيق إشارتي دخل جيبيتين بتردد مختلف لدراسة خرج الدارة الجزيئية نلاحظ أن إشارة الخرج تتوافق مع خرج بوابة OR حيث يرتفع جهد الخرج إلى قيمته الأعظمية عندما ترتفع أحد إشارتي الدخل (على الأقل) إلى القيمة الأعظمية وينخفض جهد الخرج إلى القيمة الدنيا عندما تنخفض إشارتي الدخل معاً إلى القيمة الدنيا وبالتالي يمكن الاعتماد على التصميم الجزيئي لبوابة OR، كما هو مبين في الشكل(36).

ثالثاً: بوابة XOR:

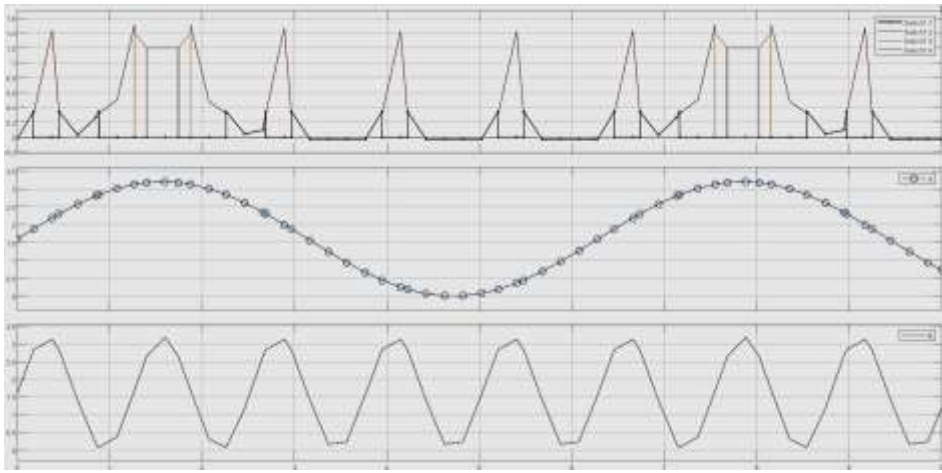
نلاحظ إن أي من إشارات الدخل بالقيمة العظمى ترفع الخرج للقيمة الأعظمية 1.4 V وعندما تكون إشارتي الدخل بالقيمة الدنيا يصبح الخرج بالقيمة الدنيا 0 V ويظهر أثر التثائي النفقي الرنان عندما تكون إشارتي الدخل بالقيمة الأعظمية فينخفض جهد الخرج عن القيمة العظمى ليصبح 1.2 V وبالتالي يمكن اختيار العتبة 1.3V بحيث أي قيمة أصغر منها تمثل المستوى المنخفض والقيم الأكبر تمثل المستوى العالي، وبذلك يمكن للدارة الجزيئية السابقة أن تقوم بدور بوابة XOR، كما هو مبين في الشكل(37).



الشكل (35) نتائج نمذجة بوابة AND



الشكل (36) نتائج نمذجة بوابة OR



الشكل (37) نتائج نمذجة بوابة XOR

5- الاستنتاجات والتوصيات

لاحظنا مما سبق أنّ عدد صغير من الجزيئات العضوية المتصلة ببعضها يمكنها القيام بوظائف تشابه الدارات المنطقية التي نتعامل معها حالياً مع اختلاف كبير جداً من حيث مساحة العناصر على الشريحة واستهلاك التيار مما يجعل هذه الدارات الجزيئية خياراً قوياً لتتوب عن الدارات المتكاملة في المستقبل القريب.

إن الاعتماد على الثنائيات الجزيئية لتصميم الدارات أمر جيد ولكن هنالك عدة أمور لابد من أخذها بعين

الاعتبار:

- بما إن الثنائيات يتم وصلها بشكل تسلسلي بالتالي سيقوم كل ثنائي بإنقاص الجهد المنشر خلاله بمقدار جهد العتبة لعمل الثنائي مما يقيد العدد الاعظمي للثنائيات التي يمكن ربطها معاً.
- وصل الدارات الجزيئات بأقطاب المعدن يحتاج طاقة عالية نسبياً للتغلب على الحواجز الطاقية عند منطقة وصل المعدن بالجزيء.

إن الحصول على مكونات إلكترونية بتكنولوجيا تصنيع جديدة تلبية حاجة التطور الحاصل هو أمر غاية في

الأهمية، لذلك يجب المتابعة في هذا المجال لتحقيق التطوير في مجال التكنولوجيا.

6- المراجع

- [1] Reed, M. A; Zhou, C; Muller, C. J; Burgin, T. P; Tour, J. M; 1997, *Conductance of a Molecular Junction*. Science, vol. 278, pp. 252-254.
- [2] Tans, S. J; Devoret, M. H; Dai, H; Thess, A; Smalley, R. E; Geerligs, L. J; Dekker, C. 1997, *Individual single-wall carbon nanotubes as quantum wires*. Nature, 386(6624), 474–477.
- [3] Ottaviano, L; Santucci, S; Di Nardo, S; Lozzi, L; Passacantando, M; Picozzi, P. 1997, *Rectifying behavior of silicon–phthalocyanine junctions investigated with scanning tunneling microscopy/spectroscopy*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 15(3), 1014–1019.
- [4] Zhou, C; Muller, C. J; Reed, M. A; Burgin, T. P; Tour, J. M. 1997, *Mesoscopic Phenomena Studied with Mechanically Controllable Break Junctions at Room Temperature*. in Molecular Electronics, J. Jortner and M. Ratner, Eds. London, UK: Blackwell Science Ltd.
- [5] Bumm, L. A; Arnold, J. J; Cygan, M. T; Dunbar, T. D; Burgin, T. P; Jones, L; Weiss, P. S. 1996, *Are Single Molecular Wires Conducting?*. Science, 271(5256), 1705–1707..
- [6] Zhou, C; Deshpande, M. R; Reed, M. A; Jones, L; Tour, J. M. 1997, *Nanoscale metal/self-assembled monolayer/metal heterostructures*. Applied Physics Letters, 71(5), 611–613.
- [7] Metzger, R. M; Chen, B; Höpfner, U; Lakshmikantham, M. V; Vuillaume, D; Kawai, T; Ashwell, G. J. 1997, *Unimolecular Electrical Rectification in Hexadecylquinolinium Tricyanoquinodimethanide*. Journal of the American Chemical Society, 119(43), 10455–10466.
- [8] Davis, W. B; Svec, W. A; Ratner, M. A; & Wasielewski, M. R. 1998, *Molecular-wire behaviour in p -phenylenevinylene oligomers*. Nature, 396(6706), 60–63.
- [9] Reed M, A. 1999, *Progress in Molecular-Scale Devices and Circuits*. presented at 57th Annual IEEE Device Research Conference, Santa Barbara, CA, 28-30.
- [10] Reed, M. A. 1999, *Molecular-scale electronics. Proceedings of the IEEE*, 87(4), 652–658.
- [11] Ratner, M. A; Jortner J. 1997, *Molecular Electronics: Some Directions* . in *Molecular Electronis*. J. Jortner and M. Ratner, Eds. London, U.K.: Blackwell Science Ltd, , pp. 5-72.
- [12] Mujica, V; Kemp, M; Ratner, M. A. 1994, *Electron conduction in molecular wires. I. A scattering formalism*. The Journal of Chemical Physics, 101(8), 6849–6855.
- [13] Mujica, V; Kemp, M; Roitberg, A; Ratner, M. 1996, *Current-voltage characteristics of molecular wires: Eigenvalue staircase, Coulomb blockade, and rectification*. The Journal of Chemical Physics, 104(18), 7296–7305.
- [14] WEISS, P. S; BUMM, L. A; DUNBAR, T. D; BURGIN, T. P; TOUR, J. M; & ALLARA, D. L. 1998, *Probing Electronic Properties of Conjugated and Saturated Molecules in Self-Assembled Monolayers*. Annals of the New York Academy of Sciences, 852(1 MOLECULAR ELE), 145–168.
- [15] Mathew, P. T; Fang, F. 2018, *Advances in Molecular Electronics: A Brief Review*. Engineering.
- [16] Chen, H; Fraser Stoddart, J. 2021, *From molecular to supramolecular electronics*. Nature Reviews Materials, 6(9), 804–828.

[17] Jia, C; Famili, M; Carlotti, M.;Liu, Y; Wang, P; Grace, I. M; Duan, X. 2018, *Quantum interference mediated vertical molecular tunneling transistors*. Science Advances, 4(10), eaat8237.

[18] Xu, Q; Scuri, G; Mathewson, C; Kim, Ph; Nuckolls, C; Bouilly, D. 2017, *Single Electron Transistor with Single Aromatic Ring Molecule Covalently Connected to Graphene Nanogaps*. Nano Letters, acs.nanolett.7b01745.

[19] S, safapour; R, sabbaghi; F, razaghian; A, shokri. 2022, *Modeling flip-flops based on molecular diode structures*. Journal of Molecular.

[20] Huanyan Fu, Xin Zhu, Peihui Li, Mengmeng Li, Lan Yang, Chuancheng Jia, Xuefeng Guo. 2022, *Recent progress in single-molecule transistors: their designs, mechanisms and applications*. Journal of Materials Chemistry C.

[21] Chang, R. 2010, *Chemistry 10th Edition*.

[22] Ellenbogen, J.C; Love, J.C. 2000, *Architectures for molecular electronic computers. I. Logic structures and an adder designed from molecular electronic diodes.* , 88(3), 386–426.