التحكم الكمي في النقل الكهربائي والكهروحراري في أنظمة القياس الجزيئي

أصالة رمضان لفته

د. محمد ضياء نوري

الملخص

يحظى المجال الالكتروني الحراري بأهتمام متزايد من علماء ومهندسي المواد نتيجة الارتفاع المستمر في الضغوط الحرارية الموضوعة على هياكل الاجهزة والمواد. أجتذب البحث في الصفات الكهروحرارية وتحديد المواد ذات الكفاءة الحرارية العالية وأنتاج الكهرباء من الحرارة المهدورة الكثير من الاهتمام. في هذه الاطروحة تم تقديم تحقيق نظري مقارناً للخواص الكهربائية والحرارية للعديد من الوصلات الجزيئية لميتالوفثالوسيانين. في الجزء الاول تم أجراء دراسة نظرية لمقارنة الخواص الكهربائية والحرارية لجزئ الميتالوفثالوسيانين المحصور بين خيوط الذهب. تم فحص جزيئة الميتاوفثالوسيانين مع أيونات معدنية أنتقالية مختلفة في مركز(Fe, Cu, Co) (Pc) في تكوينين جزيئين مختلفين cis و trans. أظهرت النتائج ان الموصلية الكهربائية والطاقة الحرارية تتغير عن طريق تغيير المركز المعدني الانتقالي وكلاهما أعلى في trans من cis. ومن ثم حسبنا القيمة الاعلى للكفاءه ZT في Fe-Pc ~3.5 أظهرت القيم العالية ZT أن هذه الوصلات الجزيئية هي تطبيقات كهروحرارية فعالة.

في الجزء الثاني من الاطروحة، تركز معظم الدراسات السابقه عادة على دراسة خصائص النقل الكمي لهيكل الميتالوفثالوسيانين مع محاذاه مستوى الهيكل بالتوازي مع إتجاه نقل الشحنه في المستوى (CIP).

سنقارن هنا الخصائص الكهربائية والكهروحرارية ل (CIP) مع الهيكل الذي يتعامد فية التيار مع المستوى (CPP). تظهر النتائج ان النقل من CIP الى CPP يؤدي الى أنخفاض في التوصيل الكهربائي والحراري. علاوة على ذلك، هناك تغيير كبير في حجم الطاقة الحرارية S. نتيجه لذلك، تظهر تكوينات CPP قيم ZT منخفضه حول طاقة فيرمي. وفقآ لهذه النتيجة يعتبر CIP المرشح الافضل للتطبيقات الكهروحرارية العالية مقارنة ب CPP.