

مطالعه‌ی اثر هندسه‌ی اتصال در بهبود ویژگی‌های ترموالکتریکی پیوند گاه پلی آنیلین^۱

زهرا گل صنملو^۲، میثم باقری تاجانی^۲، حمید رحیم پور سلیمانی^{*۲}

تاریخ ارسال: ۹۵/۳/۱۵

تاریخ تصویب: ۱۳۹۶/۱۲/۲۳

چکیده

در این مقاله ویژگی‌های ترموالکتریکی پیوند گاه ملکولی پلی آنیلین را برای سه هندسه‌ی متفاوت اتصال ملکول به الکتروود شامل پارا (متقارن)، متا و اورتو (هر دو نامتقارن) بررسی می‌کنیم. الکتروودهای انتخاب شده مشابه کارهای تجربی سه بعدی و مرکزوجهی می‌باشند و از رهیافت تابع گرین غیرتعادلی در رژیم پاسخ خطی برای به دست آوردن ضرایب ترموالکتریک استفاده می‌شود. هامیلتونی سیستم مورد بررسی با استفاده از روش تنگ‌بست نوشته می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که هدایت الکتریکی و هدایت گرمایی در اتصال نامتقارن ملکول به الکتروودها کاهش می‌یابد، در حالی که توان گرمایی و عدد شایستگی در اتصال‌های نامتقارن رفتار بهتری را از خود نشان می‌دهند و در اتصال متا و اورتو دارای افزایش هستند. بنابراین عدم تقارن در اتصال این پیوند گاه ملکولی موجب بهبود کارایی ترموالکتریکی سیستم می‌شود که نتیجه‌ای مطلوب برای محققین می‌باشد. از طرف دیگر رفتار نوسانی توان گرمایی نشان می‌دهد که نوع

^۱ شناسه دیجیتال (DOI): 1022051/jap.2018.9896.1041

^۲ آزمایشگاه محاسباتی نانوفیزیک، گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم، دانشگاه گیلان، رشت، ایران.

* نویسنده مسئول: rahimpour@guilan.ac.ir

حامل‌های شرکت‌کننده در تونل‌زنی گرمایی با تغییر مکان ترازهای انرژی ملکولی نسبت به تراز فرمی تغییر می‌کند.

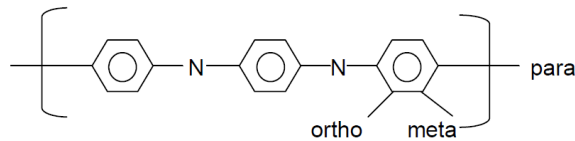
واژه‌های کلیدی: پیوندگاه ملکولی پلی‌آنیلین، هندسه‌ی اتصال، تابع گرین، ویژگی‌های ترموالکتریکی.

۱. مقدمه

ساخت و توسعه‌ی نانو ساختارها به موضوع تحقیقاتی بسیار مهم و بالقوه‌ای در چند دهه اخیر تبدیل شده است. از یک طرف تلاش‌ها برای کاهش هرچه بیشتر ابعاد فناوری موجود به سمت نانو از چند سال پیش تاکنون ادامه داشته و با موفقیت‌هایی روبه‌رو بوده است [۱]. از طرف دیگر یک اراده‌ی بسیار قوی برای تولید و گسترش نسل جدیدی از قطعات نانو الکترومکانیکی با ترکیب قابلیت‌های الکتریکی و مکانیکی [۲] یا نانوژنراتورهایی که انرژی را به وسیله اثرات ترموالکتریک تولید می‌کنند [۳] وجود دارد. یک مسئله مهم انرژی در جهان به مقدار بالای مصرف انرژی در آن مربوط می‌شود. تلاش‌های بسیاری در رابطه با جستجوی روش‌های جدید برای استفاده‌ی درست از انرژی در حال انجام است. راهبرد دیگر به حداقل رساندن مصرف انرژی با استفاده‌ی هر چه بهینه‌تر از انرژی است. به خصوص در رابطه با فناوری و صنعت بخش زیادی از انرژی به دلیل استفاده از خنک‌کننده‌ها به هدر می‌رود [۴]. علاوه بر این گرما تأثیر منفی بر عملکرد یک دستگاه دارد. پیشرفت‌های مهم در این زمینه به وسیله‌ی درک بهتر از تئوری ترابرد بار بر اثر گرما و انرژی در مقیاس نانو برای دستیابی به توانایی کنترل آن‌ها حاصل می‌شود [۵، ۶]. از این رو محققان رغبت بیشتری برای مطالعه‌ی خصوصیات ترموالکتریکی یک سیستم به منظور بررسی امکان تبدیل انرژی گرمایی تلف شده به انرژی الکتریکی قابل استفاده در سال‌های اخیر داشته‌اند. کارایی ترموالکتریکی توسط کمیتی بدون بعد به نام عدد شایستگی مشخص می‌شود: $ZT = \frac{S^2 G T}{k}$ برای دستیابی به محصول بالا از یک مبدل انرژی، به ZT بالاتری نیاز است. بنابراین، مواد و دستگاه‌ها طوری طراحی می‌شوند تا توان گرمایی (S) زیاد، هدایت الکتریکی (G_e) خوب اما هدایت گرمایی (k) کم از خود نشان دهند.

پیوندگاه‌های ملکولی و به خصوص ملکول‌های دارای پیوند π مزدوج به دلیل گسستگی ترازهای انرژی، هدایت گرمایی پایین، تحرک‌پذیری حامل‌های بالا و سنتر آسان این ملکول‌ها نسبت به سایر ملکول‌ها بیشتر مورد توجه در تحقیقات الکترونیکی ملکولی بوده‌اند [۷-۹]. فابین پائولی و همکارانش ضرایب ترموالکتریکی چون هدایت الکتریکی و توان گرمایی ملکول فینیل و

وابستگی این ضرایب به طول ملکول را بررسی کردند [۱۰]. آن‌ها دریافتند که هدایت الکتریکی به‌طور نمایی با طول ملکول کاهش یافته ولی توان گرمایی با طول ملکول افزایش می‌یابد. در کار تحقیقاتی دیگر، آرون تان و همکارانش اثر طول ملکول و گروه‌های اتصالی ملکول به الکتروود را بر روی خصوصیات ترموالکتریکی بررسی کردند [۱۱]. افزایش خطی توان گرمایی با طول ملکول و تغییر علامت توان گرمایی با تغییر گروه‌های اتصالی از نتایج مهم به‌دست آمده‌ی این تحقیق بود. پلی‌آنیلین یکی از معروف‌ترین پلیمرهای رساناست، که دارای شرایط پایدار در هوا و رطوبت است [۱۲]. در این کار، ویژگی‌های ترموالکتریکی ملکول پلی‌آنیلین را در هندسه‌های مختلف اتصال به الکتروودهای سه‌بعدی مرکزوجهی مطالعه می‌کنیم که تاکنون بررسی نشده است. از روش تنگ‌بست برای نوشتن هامیلتونی سیستم استفاده می‌کنیم و ضرایب ترموالکتریک را با رهیافت تابع گرین در رژیم پاسخ خطی به‌دست می‌آوریم. هدف از این بررسی یافتن هندسه‌ی مناسبی برای پیوند گاه پلی‌آنیلین است که در آن، سیستم بیشترین کارایی ترموالکتریکی را داشته باشد. این مقاله شامل این بخش‌هاست: در بخش دوم فرمول‌بندی و تئوری مورد استفاده بیان می‌شود. در بخش سوم نتایج حاصل از شبیه‌سازی ارائه شده و در پایان نتیجه‌گیری کوتاهی از کار بیان خواهد شد.



شکل ۱ طرحی از اتصال ملکولی در نظر گرفته‌شده؛ در سمت چپ پیوند گاه یک مکان مفروض برای اتصال به الکتروود وجود دارد در حالی که در سمت راست پیوند گاه سه مکان در نظر گرفته می‌شود.

۲. فرمول‌بندی

در این بخش به بیان فرمول‌بندی مورد استفاده در محاسبه خصوصیات ترموالکتریکی پیوند گاه پلی‌آنیلین می‌پردازیم. شکل ۱ تصویر مربوط به پیوند گاه را نشان می‌دهد. ملکول پلی‌آنیلین متشکل از حلقه‌های فنیل است که حلقه‌ها با یک اتم نیتروژن به هم وصل می‌شوند. هامیلتونی کل اتصال به صورت زیر قابل بیان است:

$$H = H_C + H_{mol} + H_T \quad (۱)$$

که در آن، H_C هامیلتونی مربوط به الکتروودها، H_T هامیلتونی اتصال ملکول به الکتروود و H_{mol} هامیلتونی ملکول پلی‌آنیلین را با تقریب تنگ‌بست تا اولین همسایگی نزدیک شرح می‌دهد،

$$H_{mol} = \sum_{i=1}^N \{ \epsilon_i d_i^+ d_i + t_0 d_i^+ d_{i+1} + h.c \}, \quad (۲)$$

در این هامیلتونی جمع بر روی اتم‌های کربن صورت می‌گیرد و N تعداد اتم‌های کربن است. $\varepsilon_i = -4.3 \text{ eV}$ انرژی مکان هر اتم کربن در حلقه‌ی فیل و t_0 انتگرال پرش مربوط به دو اتم کربن مجاور می‌باشد. اگر دو اتم کربن در حلقه باشند مقدار آن برابر 0.25 eV - است و اگر از طریق اتم نیتروژن به هم وصل شده باشند مقدار آن برابر 0.25 eV - خواهد بود [۱۳، ۱۴]. هامیلتونی مربوط به الکترودها با رابطه‌ی زیر نشان داده می‌شود:

$$H_C = \sum_k \varepsilon_0 (c_k^+ c_k) - t (c_k^+ c_{k+1} + h.c), \quad (۳)$$

که در معادله‌ی فوق ε_0 انرژی مکان مربوط به الکترودها که برابر 4.3 eV - الکترون ولت و t انتگرال پرش بین نزدیکترین اتم‌های همسایه در الکترودها که 8.3 eV در مقایسه با مقادیر به کاررفته برای الکترودهای مرکزوجهی انتخاب شده است [۱۵]. تونل زنی الکترون از الکترودها به بعدی مرکزوجهی به ملکول با هامیلتونی به شکل زیر بیان می‌شود:

$$H_T = \sum_i \sum_k t_c(i, k) (c_k^+ d_i + h.c) \quad (۴)$$

قدرت جفت‌شدگی بین ملکول و الکترودها فلزی با $t_c(i, k) = t_c = -1 \text{ eV}$ داده می‌شود. در اینجا فرض می‌شود که تنها یک نقطه از الکترودها به نقاط انتهایی ملکول از هر دو طرف متصل می‌شود که به این معنی می‌باشد که ملکول به مکان بالایی الکترودها متصل می‌شود. فرض بر این است که الکترودها چپ به مکان شماره یک متصل شده و الکترودها راست به مکان k ام از ملکول متصل می‌باشد. این مکان در کار ما متغیر است که می‌تواند مکان $N - 2$ متعلق به پیکربندی اورتو، $N - 1$ پیکربندی متا و N پیکربندی پارا باشد.

تابع گرین تأخیری سیستم می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$G^r(E) = [(E + i0^+)I - H_{mol} - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \quad (۵)$$

که در آن، 0^+ مقداری بسیار کوچک است. که در معادله‌ی فوق Σ_β خودانرژی سیستم می‌باشد $(\beta = L, R)$ که اثر الکترودهای فلزی نیمه‌بی‌نهایت را در ملکول‌ها شرح می‌دهد و به صورت $\Sigma_L = \tau_{C,L}^+ g_L \tau_{L,C}$ و $\Sigma_R = \tau_{R,C} g_R \tau_{R,C}^+$ تعریف می‌شوند. g_L و g_R به ترتیب تابع گرین سطحی الکترودهای مرکزوجهی چپ و راست می‌باشند که با استفاده از روش شرح داده شده در [۱۶] محاسبه می‌شوند. ماتریس پهن‌شدگی و قدرت اتصال بین ملکول و الکترودها Γ_β می‌باشد که به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\Gamma_\beta = i[\Sigma_\beta^r - \Sigma_\beta^a] \quad (۶)$$

که در آن، Σ_β^a مزدوج مختلط Σ_β^r می‌باشد. در نتیجه،

$$\Gamma_{\beta} = -2Im(\Sigma_{\beta}^r) \quad (7)$$

ضریب عبور الکترون ($T(\varepsilon)$) از الکتروود چپ به راست از طریق ترازهای درگیر ملکول به صورت زیر است:

$$T(\varepsilon) = Tr[\Gamma_L G^r(\varepsilon) \Gamma_R G^a(\varepsilon)] \quad (8)$$

با داشتن ضریب عبور الکترون می توانیم جریان بار و جریان گرمایی را با استفاده از فرمول لاندائو نوشت [۱۶، ۱۷]:

$$I = \frac{e}{h} \int d\varepsilon T(\varepsilon) (f_L(\varepsilon - \mu_L) - f_R(\varepsilon - \mu_R)) \quad (9)$$

$$I^Q = \frac{1}{h} \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu) T(\varepsilon) (f_L(\varepsilon - \mu_L) - f_R(\varepsilon - \mu_R)) \quad (10)$$

که μ_{α} پتانسیل شیمیایی مربوط به الکتروود β و $f_{\beta}(\varepsilon - \mu_{\beta}) = \left(1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu_{\beta}}{k_B T}\right)^{-1}$ تابع توزیع فرمی مربوط به الکتروود β می باشد. روابط فوق پس از بسط در رژیم پاسخ خطی به صورت زیر نوشته می شود:

$$I = e^2 L_0 \Delta V + \frac{e}{T} L_1 \Delta T \quad (11)$$

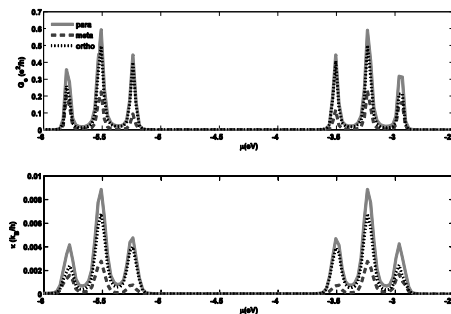
$$I^Q = e L_1 \Delta V + \frac{1}{T} L_2 \Delta T \quad (12)$$

که ضریب L_n با رابطه‌ی زیر بیان می شود:

$$L_n = \frac{1}{h} \int d\varepsilon T(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) (\varepsilon - \mu)^n \quad (13)$$

توان گرمایی به صورت نسبت تفاوت دمایی اعمال شده و ولتاژ ترموالکتریکی در حضور جریان صفر به دست می آید:

$$S = \frac{\Delta V}{\Delta T} (I = 0) \quad (14)$$



شکل ۲ پانل بالا: هدایت الکتریکی؛ پانل پایین: هدایت گرمایی؛ مربوط به پیوندگاه پلی آنیلین برای سه حالت در نظر گرفته شده برای اتصال ملکول به الکتروودها بر حسب پتانسیل شیمیایی الکتروودها.

هدایت الکتریکی و گرمایی سیستم نیز به ترتیب به صورت زیر نوشته می‌شوند:

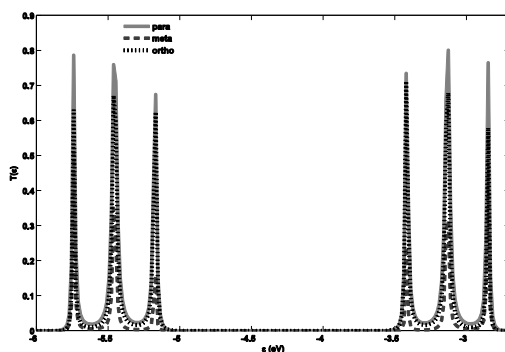
$$G_e = e^2 L_0 \quad (15)$$

$$\kappa = \frac{1}{T} \left(L_2 - \frac{L_1^2}{L_0} \right) \quad (16)$$

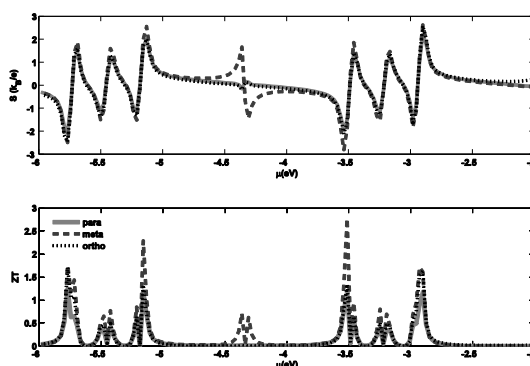
۳. نتایج شبیه‌سازی

شکل ۲ هدایت الکتریکی و گرمایی را برای هندسه‌های مختلف پیوندگاه پلی‌آنیلین نشان می‌دهد. دمای اتصال در این مطالعه برای کم‌تر شدن اثر ارتعاشات شبکه 100K در نظر گرفته می‌شود. قله‌های هدایت در محل ترازهای انرژی ملکول واقع می‌شوند. گاف هدایت در حدود 1.7eV می‌باشد. ارتفاع قله‌های هدایت در هندسه نامتقارن کاهش می‌یابد. علت این امر را می‌توان در ضریب عبور پیوندگاه جستجو کرد.

از شکل ۳، مشاهده می‌شود ارتفاع قله‌های ضریب عبور در حضور اتصال نامتقارن نسبت به متقارن کم می‌شود. این مسأله ممکن است از اثر تداخلی به‌وجود آمده بین موج‌های گذرنده از بازوی بالایی و پایینی ملکول ناشی شود [۱۸]. اگر ارتفاع قله‌ها افزایش یابد، تداخل صورت گرفته سازنده است و در صورت کاهش ارتفاع، تداخل صورت گرفته مخرب است. در اینجا در اتصال-های نامتقارن ملکول به الکتروود، تداخل صورت گرفته مخرب است به همین دلیل کاهش هدایت الکتریکی و هدایت گرمایی را در اتصال‌های نامتقارن ملکول به الکتروود شاهد هستیم. همچنین اندکی جابه‌جایی در محل قله‌های ضریب عبور در اتصال‌های نامتقارن نسبت به اتصال متقارن وجود دارد، که موجب بزرگ‌تر شدن گاف انرژی هومو-لومو (بالاترین تراز ملکولی اشغال‌شده-پایین‌ترین تراز ملکولی اشغال‌نشده) می‌شود. در نتیجه، گاف هدایت افزایش یافته و مقدار تونل‌زنی و به تبع آن هر دو هدایت در اتصال‌های نامتقارن کاهش می‌یابد.



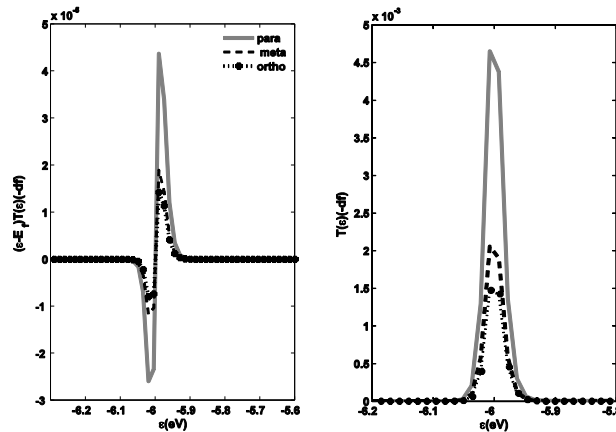
شکل ۳ ضریب عبور پیوندگاه پلی‌آنیلین برای سه حالت پارا، متا و اورتو.



شکل ۴ پانل بالا: توان گرمایی؛ پانل پایین: عدد شایستگی؛ پیوندگاه پلی آنیلین برای سه حالت در نظر گرفته شده برای اتصال به الکترودها بر حسب پتانسیل شیمیایی الکترودها.

شکل ۴ توان گرمایی و عدد شایستگی پیوندگاه ملکولی پلی آنیلین را برای اتصال های متفاوت نشان می دهد. توان گرمایی در هر سه اتصال در نظر گرفته شده رفتار نوسانی دارد که نشان دهنده ی تغییر جمعیت الکترونی در ترازهای ملکولی است [۱۹]. علامت توان گرمایی نوع حامل های شرکت کننده در ترابرد بار و انرژی را نشان می دهد. علامت منفی توان گرمایی نشان دهنده ی این است که الکترون ها حاکم بر ترابرد هستند و تراز فرمی نزدیک به لومو قرار دارد، در صورتی که علامت مثبت توان گرمایی نشان دهنده ی این است که حفره ها حامل های حاکم در ترابرد هستند و تراز فرمی نزدیک به هومو قرار دارد. در نقاط تقارنی و انرژی های تشدید، توان گرمایی صفر است در نتیجه در حوالی این نقاط توان گرمایی تغییر علامت می دهد و نوع حامل ها تغییر می کند. در نقاط تقارنی هر دو حامل بار شرکت کننده در ترابرد (الکترون ها و حفره ها) سهم مساوی ولی با علامت منفی در ترابرد دارند، در نتیجه ولتاژ القایی تولید شده در سیستم صفر بوده و به تبع آن توان گرمایی صفر است. در این نقاط هدایت گرمایی بیشینه است چون حامل ها انرژی گرمایی بیشتری را در یک جهت حمل می کنند. این پدیده در دماهای بالاتر اهمیت بیشتری پیدا می کند جایی که انرژی گرمایی در نتیجه ی گرما پهن شده است و قله های بیشتری از ضریب عبور را در بر دارد. در نقاط تشدید به دلیل این که الکترون ها بدون نیاز به انرژی گرمایی می توانند از الکترودهای سردتر و گرم تر به سطوح ملکولی تونل زنی کنند، گرادیان دمایی نمی تواند جریان الکتریکی خاصی را تولید کند و در نتیجه توان گرمایی صفر است [۲۰]. با توجه به شکل بیشترین توان گرمایی مربوط به اتصال نامتقارن متا و کمترین آن مربوط به اتصال پارا (متقارن) می باشد. علت را می توان با توجه به شکل ۵ یافت که در شکل با اینکه $(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon})(\epsilon - \mu)T(\epsilon)$ برای اتصال پارا از دو اتصال دیگر

بیشتر است، اما بیشتر بودن حاصل ضرب ضریب عبور در مشتق فرمی برای این اتصال باعث می‌شود مخرج کسر در رابطه‌ی توان گرمایی بزرگ شده و مقدار توان گرمایی در اتصال پارا نسبت به متا و اورتو کمتر شود.



شکل ۵ پانل سمت چپ: $T(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) (\varepsilon - \mu)$ پانل سمت راست: $T(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)$ برای سه اتصال پارا، متا و اورتو، محاسبه‌شده برای پیوندگاه ملکولی پلی‌آنیلین.

عدد شایستگی دارای رفتار دندانه‌ای می‌باشد. با توجه به اینکه توان گرمایی با توان دو در رابطه‌ی عدد شایستگی ظاهر می‌شود، این کمیت بیشترین تأثیر را در رفتار عدد شایستگی دارد، گرچه مقدار هدایت الکتریکی و گرمایی هم در مقدار این کمیت مؤثرند. عدد شایستگی در نقاطی صفر است که توان گرمایی صفر باشد. همچنین نقاط اکسترمم توان گرمایی، نقاط اکسترمم عدد شایستگی هستند. شکل ۴ پانل پایین نشان می‌دهد که عدد شایستگی اتصال متا از دو اتصال دیگر بیشتر می‌باشد. با توجه به اینکه عدد شایستگی کارایی ترموالکتریکی سیستم را تعیین می‌کند، در نتیجه، اتصال متا بیشترین کارایی را در بین هندسه‌های در نظر گرفته‌شده برای اهداف ترموالکتریکی دارد.

۴. نتیجه‌گیری

در این تحقیق تأثیر تقارن اتصال در خصوصیات ترموالکتریکی پیوندگاه پلی‌آنیلین با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی در رژیم پاسخ خطی بررسی شده است. هامیلتونی سیستم با استفاده از روش تنگ بست در تقریب نزدیکترین همسایگی نوشته شده است. الکترودهای مورد استفاده مانند کارهای تجربی سه‌بُعدی و مرکزوجهی بوده و سه اتصال پارا (متقارن) و متا و اورتو

(نامتقارن) برای اتصال ملکول به الکترودها در نظر گرفته شده است. هدایت الکتریکی و هدایت گرمایی در اتصال‌های نامتقارن به سبب تداخل کوانتمی مخرب و افزایش گاف انرژی هومو-لومو و کاهش تونل‌زنی دارای کاهش می‌باشد. توان گرمایی در هر سه اتصال موردنظر دارای رفتار نوسانی است. عدد شایستگی اتصال متا نسبت به دو اتصال دیگر دارای بیشترین مقدار است، که این رفتار را در توان گرمایی نیز شاهد هستیم. در نتیجه، اتصال نامتقارن متا دارای بیشترین کارایی ترموالکتریکی در پیوندگاه پلی‌آنیلین پیشنهادی می‌باشد و برای استفاده‌های ترموالکتریکی مناسب‌تر می‌باشد.

سپاسگزاری

نویسندگان از صندوق حمایت از پژوهشگران کشور به خاطر طرح شماره ۹۴۰۱۱۹۸۶ در راستای نوشتن این مقاله تشکر می‌کنند.

منابع

- [1] H. Iwai, Roadmap for 22 nm and beyond. *Microelectronic Engineering* **86**(7-9), 1520-1528 (2009).
- [2] R. Ballardini, V. Balzani, A. Credi, M. T. Gandolfi, and M. Venturi, "Artificial molecular-level machines: Which energy to make them work?", *Accounts of Chemical Research* **34**(6), 445-455 (2001).
- [3] Z. L. Wang and J. Song, "Piezoelectric nanogenerators based on zinc oxide nanowire arrays", *Science*, **312**(5771), 242-246 (2006).
- [4] E. Pop, "Energy dissipation and transport in nanoscale devices", *Nano Research* **3** 147-169 (2010).
- [5] N. Li, J. Ren, L. Wang, G. Zhang, P. Hänggi, and B. Li, "Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond", *Reviews of Modern Physics* **84**(3), 1045 (2012).
- [6] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, and A. Zettl, "Solid-state thermal rectifier", *Science* **314**(5802), 1121-1124 (2006).
- [7] M. Ma, H. Liu, J. Xu, Y. Li, and Y. Wan, "Electrochemical polymerization of o-dihydroxybenzene and characterization of its polymers as polyacetylene derivatives", *The Journal of Physical Chemistry C* **111**(18), 6889-6896 (2007).
- [8] F. Ren, F. Jiang, Y. Du, P. Yang, C. Wang, and J. Xu, "Fabrication of poly (o-methoxyaniline)/Pt-M nanocomposites and their electrocatalytic activities for methanol oxidation", *Int. J. Electrochem. Sci.* **6** 5701-5709 (2011).
- [9] L. Qin, S. Zhang, J. Xu, B. Lu, X. Duan, D. Zhu, and Y. Huang, "Novel Poly (ethylene oxide) Grafted Polycarbazole Conjugated Freestanding Network Films via

Anionic and Electrochemical Polymerization”, *Int. J. Electrochem. Sci.* **8**, 5299-5313 (2013).

[10] F. Pauly, J. K. Viljas, and J. C. Cuevas, “Length-dependent conductance and thermopower in single-molecule junctions of dithiolated oligophenylene derivatives: A density functional study”, *Physical Review B* **78**(3), 035315 (2008).

[11] A. Tan, J. Balachandran, S. Sadat, V. Gavini, B. D. Dunietz, S. Y. Jang, and P. Reddy, “Effect of length and contact chemistry on the electronic structure and thermoelectric properties of molecular junctions”, *Journal of the American Chemical Society* **133**(23), 8838-8841 (2011).

[12] R. Yakuphanoglu and B. F. Şenkal, “Electronic and thermoelectric properties of polyaniline organic semiconductor and electrical characterization of Al/PANI MIS diode”, *The Journal of Physical Chemistry C* **111**(4), 1840-1846 (2007).

[13] P. Dutta, S. K. Maiti, and S. N. Karmakar, “Multi-terminal electron transport through single phenalenyl molecule: A theoretical study”, *Organic Electronics* **11**(6), 1120-1128 (2010).

[14] G. C. Liang, A. W. Ghosh, M. Paulsson, and S. Datta, “Electrostatic potential profiles of molecular conductors”, *Physical Review B* **69**(11), 115302 (2004).

[15] Y. Asai, “Nonequilibrium phonon effects on transport properties through atomic and molecular bridge junctions”, *Physical Review B* **78**(4), 045434 (2008).

[16] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge University Press (1997).

[17] Y. Meir and N. S. Wingreen, “Landauer formula for the current through an interacting electron region”, *Physical review letters* **68**(16), 2512 (1992).

[18] M. Dey, S. K. Maiti, and S. N. Karmakar, “Effect of dephasing on electron transport in a molecular wire: Green’s function approach”, *Organic Electronics* **12**(6), 1017-1024 (2011).

[19] M. Bagheri Tagani and H. Rahimpour Soleimani, “Influence of electron-phonon interaction on the thermoelectric properties of a serially coupled double quantum dot system”, *Journal of Applied Physics* **112**(10), 103719 (2012).

[20] Z. Golsanamlou, S. I. Vishkayi, M. B. Tagani, and H. R. Soleimani, “Thermoelectric properties of metal/molecule/metal junction for different lengths of polythiophene”, *Chemical Physics Letters* **594** 51-57 (2014).