

2. Περίληψη

Στο πρώτο μέρος αυτής της διπλωματικής εργασίας δίνεται εν συντομία μια ιστορική αναδρομή

των οργανικών υλικών και αναφέρονται οι σημαντικότερες στιγμές στην εξέλιξη τους.

Ακολουθώς παρουσιάζονται διάφορες σύγχρονες εφαρμογές των οργανικών υλικών κυρίως στον

τομέα των οργανικών ηλεκτρονικών που απασχολεί αυτήν την εργασία. Στην συνέχεια

αναλύονται τα ακένια και το ρουμπρίνιο, τα οποία είναι τα υλικά που μελετήθηκαν.

Στο δεύτερο μέρος της εργασίας αναπτύσσεται η μεθοδολογία που

ακολουθήθηκε. Συγκεκριμένα

περιγράφονται οι βασικές ιδέες της Density Functional Theory (DFT) αλλά και η πορεία που

ακολουθήσαν οι επιστήμονες μέχρι την θεμελίωση της καθώς επίσης εξηγείται και η μέθοδος

των ψευδοδυναμικών. Αυτές είναι και οι θεωρίες στις οποίες βασίστηκε η μελέτη των

ηλεκτρονικών αλλά και δομικών ιδιοτήτων των οργανικών υλικών σε αυτήν την εργασία.

Ακολουθώς δίνεται μία εισαγωγή στο grid computing καθώς όλοι οι υπολογισμοί που

παρουσιάζονται στο δεύτερο μέρος της εργασίας, έγιναν σε υπολογιστικό σύστημα πλέγματος

(HellasGrid). Στο τελευταίο κομμάτι του δεύτερου αυτού μέρους περιγράφεται το ABINIT, που

είναι το υπολογιστικό λογισμικό που χρησιμοποιήθηκε ενώ επίσης περιγράφεται ο τρόπος

λειτουργίας και άλλων λογισμικών και γίνεται σύγκριση μεταξύ τους.

Στο τρίτο και τελευταίο μέρος παραθέτονται όλα τα αποτελέσματα από τους υπολογισμούς που

έγιναν. Αρχικά παρουσιάζονται τα μόρια και όλες οι πιθανές δομές τους που θα μελετηθούν

καθώς και όποια αποτελέσματα σχετίζονται με την δομή των υλικών αυτών. Στην συνέχεια

παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που σχετίζονται με τις ηλεκτρονικές ιδιότητες των υλικών,

χωρισμένα σε δύο μέρη. Πρώτα τα αποτελέσματα για τα τέσσερα πρώτα μέλη της ομάδας των

ακενίων και στην συνέχεια τα αποτελέσματα που αφορούν το πεντακένιο και το ρουμπρίνιο, τα

οποία είναι και τα πιο πολλά υποσχόμενα υλικά, από αυτά που μελετήθηκαν, στον τομέα των

οργανικών ηλεκτρονικών.

Τέλος παραθέτονται τα συμπεράσματα και κάποια σχόλια πάνω στα αποτελέσματα που

παρουσιάζονται σε αυτήν την διπλωματική εργασία.