

天津大学

本科生毕业论文



题目：有机场效应晶体管

学 院	化工学院
专 业	分子科学与工程
年 级	2020 级
姓 名	张三
学 号	3020207000
指导教师	王五

独创性声明

本人声明：所呈交的毕业设计（论文），是本人在指导教师指导下，进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本毕业设计（论文）中不包含任何他人已经发表或撰写过的研究成果。对本毕业设计（论文）所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在论文中作了明确的说明。本毕业设计（论文）原创性声明的法律责任由本人承担。

论文作者签名：

年 月 日

本人声明：本毕业设计（论文）是本人指导学生完成的研究成果，已经审阅过论文的全部内容。

论文指导教师签名：

年 月 日

摘要

中文摘要

关键词：关键词 1；关键词 2

ABSTRACT

English Abstract

Keywords: keyWords1, keyWords2

目 录

第一章	引言	1
第二章	理论与计算方法	2
2.1	电子结构理论	2
2.1.1	Schrödinger 方程和 Born-Oppenheimer 近似 ...	2
第三章	结果与讨论	3
第四章	总结与展望	4
参考文献	5
附 录	6
致 谢	7

第一章 引言

上世纪七十年代，“导电聚合物”的发现震惊了世界^[1]。

第二章 理论与计算方法

2.1 电子结构理论

2.1.1 Schrödinger 方程和 Born-Oppenheimer 近似

量子力学假设，微观粒子所处的状态可用波函数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 进行表示，微观粒子在空间中分布的概率密度可用波函数的平方 $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^* \psi$ 表示，波函数的时间演化遵循 Schrödinger 方程，Schrödinger 方程的一般形式为

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2-1)$$

每个可观测的力学量都对应一个线性厄米算符，如式 (2-1) 中的 Hamilton 算符 \hat{H} 就是一个这样的线性厄米算符。

Marcus 理论中假设电荷转移反应具有如下特点：在发生电子转移反应前后，其对应的每个振动模式的力常数 k_j 不发生改变，那么对于反应物和产物而言，其能量和几何结构的关系可以用两个开口向上，二次项系数相同而顶点位置不同的抛物线进行表示，如图 2-1 所示。

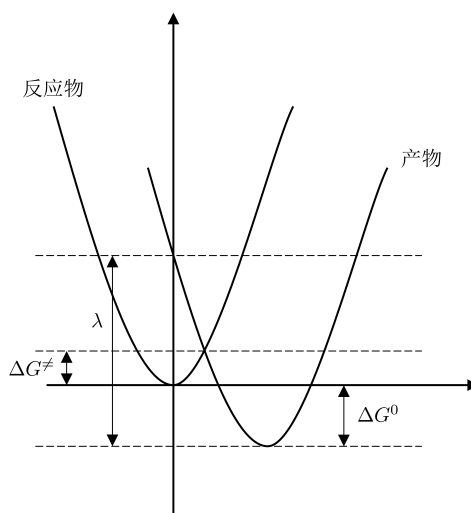


图 2-1 重整能的计算示意图

第三章 结果与讨论

第四章 总结与展望

总结

参考文献

- [1] Chiang C K, Fincher C R, Park Y W, et al. Electrical Conductivity in Doped Polyacetylene. [J]. Physical Review Letters, 1978, 40: 1472–1472.

附 录

附录 A OFET

致 谢

谢谢大家。