الخلاصة :

الخلاصة

استخدمت نظرية دالة الكثافة لأيجاد البناء الهندسي الأمثل باستخدام برنامج Gaussian 09 للحالة الأرضية عند المستوي B3LYP لكل من Au_n, Au_nLi, Ni_n, Ni_nCa, Y_4, Y_5 Y_4Na, Y_5Na, Y_6, Y_8, Y_6Ca, Y_8Ca, Co_4, Co_4Li, Co_6Li, Co_7Li باستخدام المجموعة الأساس LANL2DZ ، ولكل من Zn_5, Zn_6, Zn_7, Zn_5Na باستخدام المجموعة الأساس 6-31G ، ولكل من Mo_5, Mo_8, Mo_5Ca, Mo_8Ca, Mo_6Ca, Mo_7Ca باستخدام المجموعة الأساس LANL2MB ، والعنقود Mo_7 باستخدام المجموعة الأساس 3-21G . تم ايجاد سطوح HOMO و LUMO والكنتورات ومخططات IR ونوع التماثل ومخططات كثافة الحالات لجميع المركبات قيد الدراسة. تم حساب كل من عزم ثنائي القطب وطاقة اعلى مستوي طاقة مملوء وطاقة أوطأ مستوي طاقة فارغ وفجوة الطاقة والطاقة الكلية وطاقة الربط لجميع النماذج قيد الدراسة. اظهرت رسومات السطوح والمخططات الكنتورية لسطوح الفلزات الأنتقالية تتأثر بشكل كبير بأضافة الذرات القلوية اليها من خلال توزيع كثافة الألكترونات وتشوه اشكال الخرائط الكنتورية. أظهرت من مخططات IR ان اضافة ذرة قلوية الى سطح فلزي انتقالي يؤدي الى حدوث عملية حجب تحصل في بعض العناقيد الهجينة.

اظهرت جداول عزم ثنائي القطب الكهربائي كيف تتأثر سطوح بعض الفلزات الأنتقالية بشكل كبير بأضافة ذرة قلوية اليها ، عزم ثنائي القطب تقريبا (0.00 Debye) للعنقود (Au_8) في حين يساوي تقريبا (13.38 Debye) لعنقود (Au_8Li) . أضافة الذرة القلوية النانوية للسطح الأنتقالي النانوي اظهرت نشوء مجاميع تماثل جديدة للعناقيد الهجينة (الأنتقالية-القلوية) . قيم طاقات اعلى مستوى طاقة مملوء اظهرت ان الذرة القلوية تتصرف كمانح والسطح الأنتقالي كقابل في بعض العناقيد (الأنتقالية-القلوية) بينما تتصرف كقابل والسطح الأنتقالي كمانح في عناقيد (انتقالية-قلوية) اخرى .

معظم العناقيد الأنتقالية والأنتقالية-القلوية لها خصائص المواد شبه الموصلة أو شبه المعدنية وهذا يتضح من خلال جداول فجوة الطاقة مثلا قيمة فجوة الطاقة لعنقود ((Ni_7) تساوي تقريبا (1.19 eV) وهي قريبة من قيمة فجوة الطاقة للسيليكون التي تساوي (1.21 eV) ، اذن يمكن القول ان محاكاة سطوح فلزية انتقالية وسطوح فلزية انتقالية-قلوية بأبعاد نانوية كنقط كمية يجعل منها ذات اهمية عظمى في التطبيقات الألكترونية كصناعة بعض قطع الكومبيوتر مثل الذاكرة والمعالج. جداول الطاقة الكلية اظهرت نشوء اوربتالات تآصرية لبعض العناقيد الهجينة في حين تنشأ اوربتالات لاتآصرية في عناقيد هجينة اخرى. دراسة مخططات كثافة الحالات اظهرت ان اضافة ذرة قلوية الى بعض السطوح الأنتقالية تغير خصائصه الى مواد ضديدة الفيرومغناطيسية في حين تفقد بعض السطوح الضديدة الفيرومغناطيسية هذه الخاصية بسبب اضافة الذرة القلوية.