الخلاصة

تمت دراسة الخصائص التالية ، هندسة الجزيئات ، السطوح ، الخرائط الكنتورية ، طيف الأشعة تحت الحمراء ، كثافة الحالات ، طاقات اعلى اوربتال مملوء واوطأ اوربتال فارغ وفجوة الطاقة وجهد التأين والألفة الألكبدترونية ، والكهروسلبية والألكتروفلي ، والأستقطابية α والأستقطابية الفائقة β للعينات التالية 2Pyrrole, 2Pyrrole-2Cr, 2Pyrrole-2Y, 2Pyrrole-2V, 2Pyrrole-2Sc, 2Pyrrole-2Pt and 2Pyrrole-2Au, 2Pyrrole-Co, 2Pyrrole-Ni, 4thiophene, 4Thiophen-2Cr, 4Thiophen-2Ni , 4Thiophen-2Y , 4Thiophen-2V , 4Thiophen-2Sc , 4Thiophen-2Pt , 4Thiophen-2Au, 4Thiophene-Co, 3THF, 3THF-2Cr, 3THF-2Y, 3THF-2V, 3THF-2Sc, 3THF-2Pt, 3THF-2Au, 3THF-2Co and 3THF-2Ni باستخدام نظرية دالة الكثافة من خلال خوارزميات متطورة في برنامج الكاوسيان G09 . سطوح الجهد الألكتروستاتيكي لبعض المركبات التناسقية تتأثر بشكل كبير بسبب التفاعل بين الليكلندات والجزيئات الفلزية الأنتقالية الخطية ويمكن ملاحظة ذلك بوضوح بعمل مقارنة بسيطة بين سطوح 2Pyrrole و 2Pyrrole-Au . انتقال الشحنة يحدث تقريبا بشكل مختلف عند اضافة الفلزات الأنتقالية المختلفة ، يمكن ملاحظة ذلك بوضوح بمقارنة الخرائط الكنتورية لكل من 4Thiophen-Sc و 4Thiophen-Cr و 4Thiophen-Ni . يتم تشخيص المركبات من خلال عمل مخططات IR حيث نرى اعداد موجية جديدة تشير الى اطوال موجية جديدة تعود الى تكوين اواصر جديدة بين ذرات الليكاندات والذرات الفلزية . تظهر مستويات طاقة جديدة يمكن اشغالها بالألكترونات وهذا ما توضحة مخططات كثافة الحالات . تظهر لبعض المعقدات التناسقية خصائص مواد شبه موصلة كمثال 2Pyrrole-2Y و 4Thiophen-2Y تقريبا (1.227171 eV) للمعقد التناسقي 2Pyrrole-2Y و(1.4867 eV) للمعقد التناسقي 4Thiophene-2Y ، وهذه القيم لفجوة الطاقة مفيدة جدا في التطبيقات الألكترونية. النانوكلستر (3THF-2Y) هو النانوكلستر الأعلى فاعلية بين جميع النانوكلسترات قيد الدراسة لكونه ذو الأستقطابية (α) الأعلى التي تساوي تقريبا (377.3503 a.u) ، وهذه الخاصية مهمة في التطبيقات الطبية والصيدلانية. الأستقطابية الفائقة β تتأثر عشوائيا نتيجة التفاعل بين 2Pyrrole ، 4Thiophene ، 3THF مع الجزيئات الفلزية الأنتقالية الخطية .