الخلاصة

تلعب البورفيرينات ومشتقاتها المعدنية (الميتالوبورفيرين) ادوارا مهمة في اجهزة الاستشعار ، والعلاج الضوئي ، والتصوير(MRI) بالرنين المغناطيسي والعقاقير المضادة للسرطان ، والاجهزة الالكترونية ، والتصوير الفلوري .

في هذه الدراسة تم الاخذ بعين الاعتبار تاثير وضع المعدن المركزي حيث تم استخدام معدن التيتانيوم ومعدن الكادميوم .بالاضافة الى اضافة ذرة الكلور الى المعدن المركزي ، وكذلك دراسة تاثير الاطراف المختلفة للمركب مرة من خلال وضع الهيدروجين في النهايات الوسطى ، ومرة اخرى عن طريق ربط حلقات الفينول في الاطراف الوسطى وكذلك ربط مركب الكاربوكسيل في النهايات. وتم دراسة المركبات لمعرفة الخصائص الالكترونية والالكتروبصرية وتحسينها باستخدام تقنيات معقدة وحزمة برنامج (Gaussian 09) ، B3LYP level, 6-31G basis sets وقد تم تصميمها وتقديرها باستخدام حالتين ، الاولى في الحالة الارضية والثانية في حالة الاثارة .

تمت دراسة الخصائص الالكترونية للحالة الارضية للبورفيرين والميتالوبورفيرين بطريقة افتراضية من خلال اشراك المبدا الاول في فرضية (DFT) وحسابات قيم طاقات (HOMO وLUMO) وقيم فجوة الطاقة التي تم الحصول عليها اقل من 2.9 eV (للبورفيرين الاصلي) هذا يعني بان القيم مفيدة جدا في التطبيقات الالكترونية مثل الترانزستورات والثنائيات والمحفزات واجهزة الاستشعار وكذلك الخلايا الشمسية. تم حساب جهد التاين لمستوى فيرمي ، والقدرة الكهربائية والجهد الكهروستاتيكي ، بالاضافة الى دراسه طيف الاشعه تحت الحمراء .

تمت دراسة الخصائص الالكتروبصرية لحالة الاثاره للميتالوبورفيرين بطريقة افتراضية من خلال تضمين المبدا الاول في الفرضية (TD-DFT) وحساب قيم عزم ثنائي القطب ، الاستقطابية ، فرط الاستقطابية ، الطول الموجي للانبعاث الاقصى العمودي للطاقة وقوة المتذبذب