الخلاصة

استخدمت حسابات نظرية دالة الكثافة (DFT) عند المستوي B3LYP والمجموعة الأساس LANL2DZ بواسطة خوارزميات متطورة في برنامج Gaussian 09 لتحقيق البناء الهندسي ، سطوح الجهد الألكتروستاتيكي ، خرائط الكثافة الكنتورية ، طيف الأشعة تحت الحمراء ، الحالات الإلكترونية (HOMO) و(LUMO) ، فجوة الطاقة (E_g) ، جهد التأين ، الألفة الألكترونية ، عزم ثنائي القطب الكهربائي ، الأستقطابيات ، مجموعة التماثل التي ينتمي اليها البناء الهندسي ومخططات كثافة الحالات الألكترونية للنماذج (Au_{10}-OTS) , (Au_{15}) , (Au_{15}-OTS) , (Au_{18}) , (Au_{18}- OTS) , (Ag_{10}) , (Ag_{10}-OTS) , (Ag_{15}) , (Ag_{15}-OTS) , (Ag_{18}) , (Ag_{18}-OTS) , (Cu_9) , (Cu_9-OTS) , (Cu_9-Pyrimidine) و(Cu_{10}) . بينما حسابات نظرية دالة الكثافة (DFT) للنماذج النانوية (Au_{10})و (Cu_{10}-Pyrimidine) تم انجازها عند المستوي B3LYP والمجموعة الأساس LANL2MB . في حين أن حسابات نظرية دالة الكثافة (DFT) للنموذج النانوي (Cu_{10}-OTS) تم انجازها عند المستوي B3LYP والمجموعة الأساس 6-31G . وجد أن الأمتزاز الفيزيائي وعملية نقل الشحنة توثر بشكل واضح على البناء الهندسي وسطوح الجهد الألكتروستاتيكي . يحدث تشوه في خرائط الكثافة الكنتورية عند سطوح الفلزات الأنتقالية النانوية بسبب الأمتزاز الفيزيائي ويحدث التشوه في خرائط الكثافة الكنتورية لذرات المواد العضوية النانوية بسبب عملية نقل الشحنة . ايضا ظاهرة الأمتزاز الفيزيائي التي تحدث عند السطح وعملية نقل الشحنة من الفلز الأنتقالي النانوي الى المادة العضوية النانوية تتسبب بظهور مجاميع فعالة جديدة كنتيجة للتفاعل بين المواد العضوية النانوية وسطوح الفلزات الأنتقالية قيد الدراسة. تظهر سطوح الذهب والفضة والنحاس بالأبعاد النانوية بخصائص مواد شبه موصلة بالمقارنة مع وجودها في الطبيعة بخصائص مواد موصلة وهذا يعتبر تحسين في الخصائص الألكترونية حيث يتيح امكانية استخدام هذه المعادن الفلزية النانوية في تقنيات اشباه الموصلات في مجالات العلوم المختلفة. أقل قيمة لجهد التأين هي للنحاس النانوي (Cu_9) اذ تساوي تقريبا (4.09 eV) وبذلك الألكترونات تتحرر من سطح هذا النموذج النانوي اسهل من بقية النماذج قيد الدراسة. يعتبر نموذج الذهب النانوي (Au_{10}) افضل قابل للألكترونات بين النماذج قيد الدراسة اذ يمتلك اكبر الفة الكترونية تساوي تقريبا (5.05 eV). عزم ثنائي القطب الكهربائي ومعدل الاستقطابية ونقاط مجاميع التماثل تتأثر هي الأخرى بشكل كبير بظواهر الأمتزاز الفيزيائي وعملية نقل الشحنة. كذلك تظهر بعض التراكيب الهندسية قيد الدراسة بخصائص ضديدة الفيرومغناطيسية واخرى تفقد الخصائص ضديدة الفيرومغناطيسية بسبب ظاهرة الأمتزاز الفيزيائي وعملية نقل الشحنة.