الخلاصة

استخدمت نظرية دالة الكثـــافة (DFT) عند المستوي B3LYP والمجموعة الأساس 6-31G من خلال خوارزميات متطورة في حزمة برنامج Gaussian 09 لتحقيق البناء الهندسي، سطوح الجهد الألكتروستاتيكي، خرائط الكثافة الكنتورية، كثافة الحالات (DOS) ، مطيافية (IR) ومجموعة نقطة التماثل لجميع نماذج التراكيب الهندسية النانوية الثمانية عشرقيد الدراسة (B_{14} ، B_{17}، $B_{14}Cu_2O$، $B_{14}TiO_2$ ، $B_{17}Cu_2O$ ، $B_{17}TiO_2$ ، $(3CaTiO_3)$ ، $(3CaTiO_3/TiO_3)$ ، $(3CaTiO_3)$-ZnO ، $(3CaTiO_3)$-FeS_2 ، $(3CaTiO_3/TiO_3)$-ZnO، $(3CaTiO_3/TiO_3)$-FeS_2 ، $Li_{10}C_{10}$ ، $Li_{10}C_{10}ZnO$، $Li_{10}C_{10}FeS_2$، $Li_{15}C_{15}$ ، $Li_{15}C_{15}ZnO$ و $Li_{15}C_{15}FeS_2$).

ايضا استخدمت تقنية (DFT) عند نفس المجاميع الأساس من خلال نفس الخوارزميات المتطورة لأيجاد الحسابات التالية : فجوة الطاقة (E_g)، طاقة اعلى اوربتال مشغول (HOMO, SOMO) ، طاقة اوطأ اوربتال فارغ (LUMO)، جهد التأين (I.P)، الألفة الألكترونية (E.A)، عزم ثنائي القطب (μ) ، معدل الأستقطابية $< \alpha >$، الكهروسلبية والألكتروفلستي لجميع النماذج الثمانية عشر قيد الدراسة.

فجوة الطاقة للتركيب النانوي (B_{17}) تقترب من فجوة الطاقة للسيليكون $E_g(Si)=1.12$ eV ، فجوة الطاقة للتركيب النانوي ($B_{17}TiO_2$) تقترب من فجوة الطاقة للجرمانيوم $E_g(Ge)=0.78$ eV ، لذلك هذه المواد تعتبر مواد شبه موصلة. لذا تعتبر هذه المواد ذات اهمية في صناعة الأجهزة الألكترونية مثل الكواشف والخلايا الشمسية والمتحسسات. فجوة الطاقة للتركيب النانوي ($3CaTiO_3$) و ($3CaTiO_3$)-ZnO تقترب من فجوة الطاقة للمركب (PbTe) فهي تقترب من (0.3 eV) وهذا مهم جدا في تطبيقات تحويل الحرارة الى طاقة الكترونية، لذا يمكن القول بأن ($3CaTiO_3$) و ($3CaTiO_3$)-ZnO تمتلك خصائص ثرمو الكترونية.

التركيب الهندسي النانوي ($Li_{15}C_{15}FeS_2$) يمتلك اعلى قيمة لعزم ثنائي القطب (26.45 Debye) ، الجزيئات التي لها عزم ثنائي قطب عالي مفيدة في صناعة مواد ذات ثابت عزل عالي وهذه المواد لها اهمية كبيرة جدا في صناعة المتسعات. التركيب الهندسي النانوي ($Li_{15}C_{15}ZnO$) هو التركيب الأعلى فعالية كونه يمتلك اعلى قيمة لمعدل الأستقطابية.