الخلاصة

في دراستنا الحالية، استخدمنا طريقة نظرية كثافة الدالة DFT لدراسة التركيب الهندسي لنماذج العناقيد النانوية الجديدة (Ti_5Zr_4، Ti_4Zr_6، Ti_6Zr_9، $Ti_5Zr_4/2GaAs$، $Ti_4Zr_6/2GaAs$، و $Ti_6Zr_9/2GaAs$) و (Pt_9، $Pt_9/GaSb$، $Pt_9/2GaSb$، Pt_{10}، $Pt_{10}/GaSb$، $Pt_{10}/2GaSb$)، وباستخدام طريقة B3PW-91/ LanL2DZ مع برنامج Gaussian 09. تم تقييم طاقة الإثارة والانتقال الإلكتروني للأشعة فوق البنفسجية وقوة المذبذب باستخدام حسابات TD-DFT/B3PW-91/lanl2DZ. تم حساب طاقات HOMO/LUMO على مستوى B3PW-91/lanl2DZ. كذلك اعطت B3PW-91/LanL2DZ تنبؤات للعزم ثنائي القطب، والمؤشرات الكيميائية، وقابلية الاستقطاب. حيث تم تحديد الاستقطاب البصري للجزيء من خلال فجوة الطاقة الكبيرة بينهما. لوحظ أن $Ti_5Zr_4/2GaAs$ أكثر استقرارا وأقل تفاعلية. كذلك, اعطى Ti_5Zr_4 وTi_4Zr_6 أقل قيمة للصلابة، بينما يُظهر $Ti_5Zr_4/2GaAs$ أعلى قيمة صلابة. ووفقا للحسابات، $Ti_5Zr_4/2GaAs$ هي النموذج الأكثر استقرارا. كذلك، فإن مؤشر الشحنة الكهربائية، يحتوي $Ti_4Zr_6/2GaAs$ على أقصى قدر من مؤشر الشحن الإلكتروني ΔNmax، وهو معظم شحنات الإلكترون التي يقبلها النظام. يشير هذا إلى أن $Ti_5Zr_4/2GaAs$ أقل تفاعلاً وأكثر استقرارًا من المركبات الأخرى. أظهر عزم ثنائي القطب أن مجموعة Ti_4Zr_6 لها أدنى قيمة ومجموعة Ti_6Zr_9 هي الأعلى. يمكن اعتبار $Ti_9Zr_6/2GaAs$ أكثر نشاطًا في قابلية الاستقطاب. كذلك,العناقيد النانوية (Pt_9، $Pt_9/GaSb$، $Pt_9/2GaSb$، Pt_{10}، $Pt_{10}/GaSb$، $Pt_{10}/2GaSb$) DFT, اظهرت النماذج Pt_9، $Pt_9/2GaSb$، و$Pt_{10}/2GaSb$ استقرارًا استثنائيًا، كما يتضح من طاقة الربط العالية الكبيرة. اما النموذج Pt_{10} اعطى إمكانات كيميائية أعلى، واظهر النموذج Pt_9 نعومة أعلى. كذلك, فان النموذج $Pt_{10}/2GaSb$ اعطى صلابة عالية. وعزم ثنائي القطب عالية للنماذج $Pt_9/GaSb$ و$Pt_{10}/GaSb$. ان مؤشر الشحنة الإلكترونية (ΔNmax) للنموذج Pt_9 هو الأعلى؛ ويتم تقليله قليلاً في النموذج بواسطة ذرات Ga و Sb. تحتوي العناقيد النانوية على فجوات طاقة تشبه فجوات الطاقة الموجودة في المواد شبه الموصلة؛ قيم فجوات الطاقة في المجال للنموذج Pt_9 إلى وللنموذج $Pt_{10}/2GaSb$. حيث تظهر بعض النماذج عزمًا ثنائي القطب أكبر من 5 ديباي، مثل النماذج $Pt_{10}/GaSb$ و$Pt_9/GaSb$ و $Ti_4Zr_6/2GaAs$و$Ti_6Zr_9/2GaAs$. تعتبر النماذج النانوية للدراسة الحالية مهمة في إنتاج الأجهزة الإلكترونية مثل الثنائيات الباعثة للضوء، وأجهزة الكشف، والاستشعار عن بعد، وأشعة الليزر شبه الموصلة وغيرها من التطبيقات الاخرى.