## الخلاصة

برزت تقنيات تحويل الطاقة الكهروحرارية كوسيلة واعدة لاستعادة الحرارة المهدرة وتحويلها إلى طاقة كهربائية قابلة للاستخدام. لذا، أصبح استكشاف وإيجاد مواد كهروحرارية ذات أداء كهروحراري عالي قضيةً بالغة الأهمية في الوقت الحاضر. في هذه الرسالة، نغطي مجموعة من النتائج الرئيسية في مجالات الخواص الكهربائية والكهروحرارية لأسلاك جزيئات البورفيرينات المعدنية.

تتناول هذه الرسالة مجموعة من النتائج الرئيسية في مجالات الخواص الكهربائية لأسلاك البورفيرين الزنكية الجزيئية. استُخدمت منهجية نظرية وحسابية، تستند إلى نظرية دالة الكثافة (DFT) التي طُبّقت في كود SIESTA لتحسين الهندسة الجزيئية، مقترنةً بنهج دالة Green غير المتوازنة باستخدام كود نقل GOLLUMلحساب معامل نقل الشحنة. باستخدام هذا المعامل، تم تقييم الموصلية الكهربائية، والموصلية الحرارية، ومعامل سيبيك، ومعامل الكفاءة الكهروحرارية (ZT) لدراسة عائلة من جزيئات البورفيرين فارغة التجويف و محتلة التجويف بالزنك. تحدد الكفاءة الكهروحرارية (ZT) مدى كفاءة تحويل الحرارة إلى كهرباء.

في الجزء الأول من الدراسة، قارنا الخصائص الكهربائية والكهروحرارية لتسعة تراكيب من البورفيرين. أظهرت النتائج أن لظهور ذرة الزنك في مركز ثنائي البورفيرين تأثيرًا جوهريًا على الخواص الكهروحرارية. وبالتالي، سيتغير معامل الكفاءة الكهروحرارية (ZT). سُجِّلت أعلى قيمة لمعامل الكفاءة الكهروحراري (ZT) حول مستوى طاقة فيرمي عند ظهور ذرة زنك واحدة في مركز ثنائي البورفيرين (D2)هي 1.05.

في الجزء الثاني، نُقدِّم تحليلًا نظريًا لنقل الإلكترون عبر جزيء ثنائي البورفيرين بثلاثة روابط مختلفة محصورة بين أقطاب الذهب. أعلى قيمة لمعامل الكفاءة الكهروحراري (ZT) حول مستوى طاقة فيرمي حصلنا عليها عند ظهور ذرة زنك واحدة في مركز بنية ثنائي البورفيرين المرتبط مباشرة(D2) هي 1.05.

عالية. (ZT)في الجزء الثالث، استكشفنا إمكانية تراكيب ثلاثي البورفيرين على توليد كفاءة كهروحرارية . (Tr1)حصلنا عليها هي 7 في تركيب البورفيرين الثلاثي (ZT)أعلى قيمة لمعامل الكفاءة الكهروحراري تخلص نتائج هذا العمل إلى أن الهندسة الجزيئية الدقيقة من خلال تصميم التراكيب يمكن أن تؤثر بشكل كبير على الكفاءة الكهروحرارية ، وهذا يؤدي إلى اقتراح مرشحين محتملين جدد لأجهزة كهروحرارية مستقبلية.