الخلاصة

تتناول هذه الأطروحة الخصائص الإلكترونية لعدد من الهياكل النانوية الكربونية القائمة على الفركتلات باستخدام نظرية دالة الكثافة (DFT)، بما في ذلك نماذج مثلث سيربينسكي وسجادة سيربينسكي المُستبدلة بذرات البورون والنيتروجين، وهياكل الكورونين المتكررة، والبنى الفركتالية الثلاثية، والهياكل النانوية المثلثة الهرمية. وتهدف الدراسة إلى توضيح تأثير الهندسة الفركتالية والتشابه الذاتي والاستبدال الذري في السلوك الإلكتروني لمواد الكربون.

أظهرت النتائج أن فجوة الطاقة بين المدار الجزيئي المشغول الأعلى (HOMO) والمدار الجزيئي غير المشغول الأدنى (LUMO) تتحدد بصورة أساسية بالطوبولوجيا الفركتالية ونمط الاستبدال الذري، وليس بحجم البنية وحده. وقد أظهر مثلث سيربينسكي المُستبدل بالبورون أقوى تأثير في تعديل الخواص الإلكترونية، إذ حقق أقل فجوة طاقة بلغت ٠,١٣١ إلكترون فولت، في حين بلغت الفجوة في البنية المناظرة المُستبدلة بالنيتروجين ٠,١٦٤ إلكترون فولت. كما أظهرت نماذج سجادة سيربينسكي تغيرات غير خطية في فجوة الطاقة، مما يؤكد التأثير الكبير للترتيب الفركتالي في البنية الإلكترونية.

في المقابل، أظهر نموذج الكورونين المتكرر انخفاضًا منتظمًا في فجوة الطاقة من ٦,٦٦ إلكترون فولت إلى ٢,١٦ إلكترون فولت مع زيادة حجم البنية، مما يعكس ازدياد إزالة توطين إلكترونات π. كما أظهر النموذج الفركتالي الثلاثي حالة من التشبع الإلكتروني، إذ استقرت فجوة الطاقة عند قيمة تقارب ٤,٩ إلكترون فولت في الأجيال الأعلى. وعلى العكس من ذلك، أظهر النموذج المثلثي الهرمي زيادة في فجوة الطاقة من ١,٧٥٩ إلكترون فولت إلى ٢,٩٠٥ إلكترون فولت نتيجة تأثيرات الهدرجة وتخميل الحواف.

كما أظهر تحليل المدارات الجزيئية الحدودية والواصفات الإلكترونية الشاملة وجود ارتباط قوي بين تعديل فجوة الطاقة والاستقرار الإلكتروني والتفاعلية الكيميائية. وبصورة عامة، تؤكد النتائج أن الهندسة الفركتالية والاستبدال الذري الانتقائي يوفران أدوات فعالة للتحكم في الخصائص الإلكترونية للبنى النانوية الكربونية. ومن بين الأنظمة المدروسة، أظهر مثلث سيربينسكي المُستبدل بالبورون أعلى نشاط إلكتروني، في حين أظهر النموذج الفركتالي الثلاثي أعلى درجة من الاستقرار الإلكتروني، مما يبرز إمكانات المواد الكربونية الفركتالية في التطبيقات النانوإلكترونية والبصرية المستقبلية.