

## 1-1 المقدمة

لقد جذبت تقنية النانو انتباها كبيرا حيث تعد هذه التقنية من التقنيات الحديثة و التي مازالت تحتاج إلى الكثير من الأبحاث والدراسات حيث أصبحت تشكل اهتماما كبيرا وذلك لخواصها الفريدة من نوعها و اتساع مجال تطبيقاتها ، و تقنية النانو كما ذكر الكثير من مراكز أبحاث النانو هي تقنية العصر القادم أي يمكن أن نطلق على عصرنا القادم ب ' عصر النانو ' سيكون لهذه التقنية التأثير الكبير في الكثير من مجالات الحياة الصناعية و الطبية و الزراعية و في مجال النقل و الطيران وفي أبحاث الفضاء وتقنية المياه وفي الكثير من المجالات الحيوية الهامة [1,2] .

شهد العالم في نهاية القرن العشرين تطورا سريعة في العلوم التكنولوجية، وذلك بعد اختراع الحواسيب والأجهزة الأخرى مثل الليزر التي أدت إلى إحداث ثورة إلكترونية وصناعية للحصول على أفضل الأجهزة من الناحية العملية والعلمية، واستطاع الإنسان أن يتعمق داخل تلك العوالم من عوالم حية تشمل الكائنات الحية ومكوناتها ، ومن عوالم غير حية تشمل عناصر المادة ومكوناتها من ذرة و جزيئات (على المستوى النانوي وهو مشروع بحثنا). ومع اكتشاف الفيزياء الحديثة والخاصية المزدوجة للإشعاع الكهرومغناطيسي والجسيمات المادية ونظرية الكم التي تدرس الأجسام على المستوى الدقيق، أصبح بالإمكان تصميم أجهزة لها قدرة عالية جدا تصل إلى مئات آلاف المرات من الأجهزة الاعتيادية مثل جهاز الليزر.

حيث استطاع الإنسان بعد اختراع المجاهر الإلكترونية من رؤية ودراسة الأجسام على المستوى الذري الدقيق ، كما ساعد ذلك في تغيير هيكلية وترتيب ذرات المادة ، مما نتج عن ذلك مواد جديدة بخصائص فريدة ، ما تمكن من تصغير المادة للحجم النانوي بطرق مختلفة ، ولاحظ العلماء أن خصائص بعض المواد تتغير عند تصغيرها للحجم النانوي، وقد استغل العلماء هذه الخصائص في إنتاج مواد وأجهزة وأدوات تخدم البشرية وهو ما أطلق عليه مصطلح النانو تكنولوجي أي تقنية النانو، وقد عرفت تقنية النانو على أنها معالجة وملاحظة المواد بمقياس النانو. وعرفت على أنها التقنية التي تتعامل على المستوى النانوي من الصغر باستخدام الطرق الحديثة جدا في علوم الفيزياء والكيمياء والهندسة والبيولوجيا الجزيئية وغيرها .

كما عرفت تقنية النانو على أنها تلك التكنولوجيا المتقدمة القائمة على تفهم ودراسة العلوم الثانوية تفهماً عقلانياً وإبداعياً مع توافر المقدرة التكنولوجية على تخليق مواد النانو والتحكم في بنيتها الداخلية وإعادة هيكلة وترتيب الذرات والجزيئات المكونة لها بهدف الحصول على منتجات متميزة تستخدم في المجالات المختلفة [3,4]. وكذلك القصد من تقنية النانو ليس المقياس النانوي بحد ذاته، وإنما نقصد بها التقنية التي تتعامل مع جسيمات بهذا المقياس بهدف إنتاج مواد وأدوات وأجهزة بكفاءة عالية، ويعني ذلك أن الأجهزة يكون حجمها في الحجم

النانوي أيضا، بل قد يدخل في تركيبها جسيمات نانوية. وترجع أهمية تقنية النانو للحجم النانوي فقط وإنما إلى تغير خصائص المواد عند تصغيرها للحجم النانوي ما بين (100 - 1) نانومتر، واكتسابها خصائص جديدة ومميزة مثل تغير لون بعض المواد وجعل المواد الغير موصلة للكهرباء تصبح فائقة التوصيل وبعض المواد تكتسب قوة ومتانة أكبر مثل ما تم ملاحظته في بحثنا الحصول على مواد نانوية تستخدم كأوساط ليزيرية فعالة لأن لها خواص امتصاصية وقوة انبعاث عالية جدا وغيرها، وكذلك تكتب تقنية النانو أهميتها من خلال زيادة المساحة السطحية للمواد عند تصغيرها للحجم النانوي ، مما يزيد من مساحة سطح تفاعلها مع البيئة المحيطة . وتتفوق تقنية النانو في كونها التكنولوجيا الوحيدة ذات الوظائف والاستخدامات المتعددة، إذ يمكن توظيف منتج واحد من منتجاتها النانوية في أكثر من مجال تطبيقي مما يقلل من تكلفة الإنتاج [5].

الوسط الفعال هو مصدر الفوتونات الرئيسي داخل الليزر، حيث يصدر الفوتونات بالاعتماد على الانبعاث المحفز والتلقائي للتحويلات الإلكترونية أو الجزيئية عند الانتقال إلى مستويات طاقة أدنى بعد أن يتم تحقيق شرط التوزيع العكسي عن طريق عملية الضخ الليزر أو تضخيم الضوء بالانبعاث المحفز للإشعاع بالإنجليزية:

### LASER اختصارا ( **Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation** )

هو جهاز ينبعث منه الضوء من خلال عملية تضخيم ضوئي تعتمد على الانبعاث المحفز للإشعاع الكهرومغناطيسي. تكون فوتوناته متساوية في التردد ومتطابقة الطور الموجي حيث تتداخل الموجات وقد تعضد بعضها البعض مما يحدث تقوية للشعاع الضوئي. عملية تداخل الموجات يمكن أن يكون تداخلا بناءا" بين موجاتها لتتحول إلى نبضة ضوئية ذات طاقة عالية وشديدة التماسك زمانيا ومكانيا ذات زاوية انفرجها صغيرة جدا؛ أو تتداخل الموجات تداخلا غير بناء فيختفي الضوء [3-1]. تم بناء أول ليزر في عام 1960 من قبل ثيودور هارولد مايمان في مختبرات أبحاث هيوز، بناءا على العمل النظري الذي قام به تشارلز هارد تاونز وأرثر ليونارد شاولو بسبب طاقتها العالية وزاوية انفرجها الصغيرة جدا تستخدم اشعة الليزر في عدة مجالات أهمها القياس كقياس المسافات الصغيرة جدا أو الكبيرة جدا بدقة متناهية ويستخدم أيضا في إنتاج الحرارة لعمليات القطع الصناعي وفي العمليات الجراحية خاصة في العين ويستخدم أيضا في الأجهزة الإلكترونية لتشغيل الأقراص الضوئية كما أن بعض الجهود المبذولة حاليا لتحقيق الاندماج النووي للهيدروجين تستخدم أجهزة ليزر ضخمة للتوصل إلى اندماج الهيدروجين وتحوله إلى هيليوم ، وهو التفاعل الذي يتم في الشمس والنجوم وتنتج حرارتها.

كذلك يمكن ان يستخدم الليزر في البحث العلمي (التحليل الطيفي، التذرية الليزر، الصلب ليزر، ونثر ليزر، التداخل بالليزر، ليدار في تطوير المنتجات التجارية: طابعات الليزر، الأقراص المدمجة، مساحات الباركود، الحرارة، مؤشرات ليزر، الصور المجسمة).

الخصائص البصرية هي عدة صفات تعتمد أساسا على انعكاس أو امتصاص الضوء على سطح المعدن مثل اللون والمخدش والبريق والشفافية. الخصائص التماسكية هي مجموعة من الصفات تعتمد أساسا على مقدار تماسك جزيئات المعدن وذراته مثل الصلادة والانفصام .

## 1-2 مفهوم النانو Nano

يقصد بالنانو الشيء الصغير جدا أو الدقيق بحجمه (الأشياء المتناهية في الصغر)، وقد ظهرت كلمة نانو " Nano " في بداية العصر اليوناني، حيث إنها مشتقة من كلمة " نانوس Nanos" باللغة اليونانية القديمة وتعني بالانجليزية " Midget " أي القزم، اما في مجال العلوم يعنى النانو جزءاً من المليار من المتر (أي جزء من الألف مليون) وفي لغة الأرقام ( $10^{-9}$ m) [6].

## 1-3 مفهوم علم النانو Nanoscience

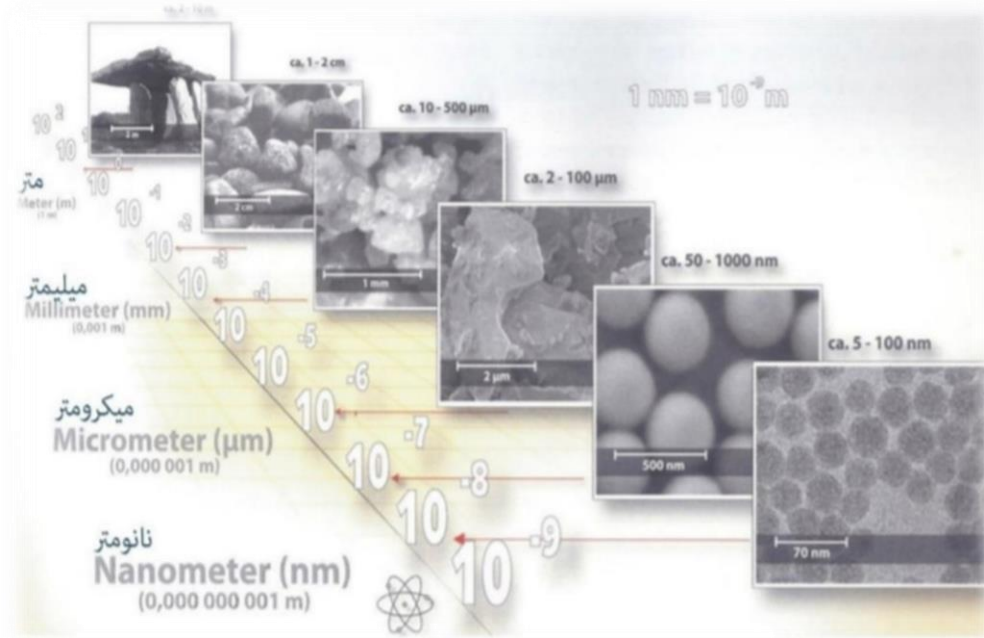
هو العلم الذي يهتم بالتعامل مع المواد في مستواها الجزيئي والذري بمقياس لا يتعدى 100 نانومتر، وكذلك يهتم باكتشاف ودراسة الخصائص المميزة لمواد النانو [7].

## 1-4 مفهوم تقنية النانو Nanotechnology

تقنية النانو تشمل الأبحاث والتطورات التقنية على المستويات الذرية والجزيئية في مجال طولي حوالي (100-1 نانو متر)، لتوفير فهم أساسي للظواهر والمواد على مقياس النانو وهي التي تستخدم و تصنع تركيبات لديها خصائص فريدة نظرا لصغر حجمها [7].

## 1-5 مقياس النانومتر Nanometer

هو وحدة قياس طولية كباقي وحدات القياس المعترف بها ، ويختص النانومتر بقياس الأشياء الصغيرة جدا التي لا ترى إلا تحت المجهر الإلكتروني " Electron Microscope " ولا ترى بالعين المجردة ، إذا كانت الأشياء أصغر من ( 10 آلاف نانومتر ) ، وفي عام ( 1670م ) ابتكر العالم " غابريل موتن " نظام القياس المتري، وهو غالبا ما يكون من أبعاد الذرة ، ويرمز لها ب { Nanometer ( nm ) } ويستخدم مصطلح النانو حالياً من أجل الدلالة على اختصاصات التقنية التي تعمل ضمن هذا المجال والتي تسمى تقنية النانو والتي غالبا ما تكون في كيمياء السطوح أو صناعة شبه الموصلات ، وتستخدم وحدة النانو أيضا لوصف الأطوال الموجية في المجال المرئي الذي يتراوح بين ( 380-700nm ) ، وكذلك في قياس الإلكترونات و الجزيئات في النواة الصغيرة جدا ، ويوضح شكل (1-1) مقياس النانو من المتر إلى النانومتر [6-9] .



شكل (1-1) مقياس النانو من المتر الى النانومتر [6]

## 6-1 الدراسات السابقة

\* الباحث عدي العويدي وآخرين في عام (2016) [10] قدم دراسات نظرية وتجريبية لمجمعات Trans-Ru. فسروا الخصائص الإلكترونية لمثل هذه الجزيئات من حيث آليات النقل (الموصلية التي يهيمن عليها LUMO). هذه النتائج لها آثار كبيرة على التصميم المستقبلي للمجمعات الفلزية العضوية للدراسات في الوصلات الجزيئية المستخدمة في أوساط الليزر. والذي أوضح قيم التوصيل العالية الغريبة لبعض الجزيئات الفلزية العضوية المستخدمة كأوساط ليزيرية فعالة.

\* بانا وآخرين في عام (2017) [11] تظهر تميز التداخل الكمي المدمر في نقل الإلكترون. يوفر التداخل الكمي المدمر في نقل الإلكترون عبر الجزيئات طريقاً غير تقليدي لقمع التيار الكهربائي. نقدم في هذا العمل موجّهات التداخل لكل تداخل ونستخدمها لوصف التداخل. قد يكون متجه التداخل عبارة عن مجموعة من المدارات الجزيئية المتعددة (MOS)، مما يؤدي إلى تداخل أكثر قوة والذي من المرجح أن يتم ملاحظته تجريبياً.

\* Guang P. Zhanga وآخرون في عام (2019) [12] تحسين أداء تبديل الموصلية في التقاطعات أحادية الجزيء ثنائي ميثيل هيدروبيرين / سيكلوفانيدين القابلة للتحويل. لا يزال تصميم المفاتيح الجزيئية ذات الاستقرار والأداء العالي يمثل تحدياً كبيراً في مجال الإلكترونيات الجزيئية. لهذا الهدف، يجب معالجة العوامل الرئيسية التي تؤثر على خصائص نقل الشحنة للأجهزة الجزيئية بعناية.

\*براء المعموري وآخرين في عام (2021)[13]، الخصائص الكهروحرارية لأسلاك أوليغوين الجزئية. Oligoynes عبارة عن أسلاك جزئية نموذجية نظرًا لنظامها المترافق والنقل النفقي المتماسك ، مما يساعد هذا النوع من الأسلاك على نقل الشحنات عبر مسافات طويلة. تمت دراسة الخصائص الكهربائية والحرارية لسلسلة من الأسلاك الجزئية Oligoynes ((ن) 3 و 5 و 7 و 9) لاستكشاف آليات النقل الأساسية للإلكترونات التي تمر عبر الجزيئات المفردة، قمنا بسبر كل من الموصلية الكهربائية ومعامل سيببك لـ Au | جزيء | تكوينات Au باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT).

\* رسول العتيجاوي وآخرون في عام (2022)[14] تعزيز الخواص الكهروحرارية للوصلات الجزئية القائمة على البورفيرين بواسطة رنين الفانو. كتسب تطبيقات البورفيرين أحادية الجزيء الانتباه باستخدام الجزيئات ككتل أولية من المكونات الإلكترونية التي تشتمل على ذرات معدنية. من الناحية النظرية ، يتم استخدام نوع واحد من أجهزة البورفيرين ذات المقياس الجزيئي في هذه المقالة ، وتتألف من جزيئات عضوية معدنية مفردة مع معادن مختلفة (Zn و Mg و Cu و Fe) ، محصورة بين أقطاب الذهب المرتبطة بمجموعات مرسة ثيول. تم حساب معاملات النقل وسبببك لتكوينات Au | جزيء | Au باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT).

\* عباس وآخرون في عام (2022) [15] أن هذا العمل حدد أحدث ما توصلت إليه أجهزة التداخل الكمي للجزيء الفردي من خلال الجمع معًا لأول مرة ، والريادة العمل على الأسلاك الجزئية. بالإضافة إلى ذلك ، يعرض استراتيجية جديدة للتحكم في التداخل الميكانيكي الكمومي وتعزيز الخصائص الإلكترونية والحرارية للأجهزة الجزئية وتطبيقاتها المهمة كأوساط ليزيرية فعالة.

## 7-1 الهدف

الهدف الرئيسي من هذا العمل هو استكشاف وفهم الأساسيات الجديدة للوصلات الجزئية المختلفة ، حيث تهدف هذه الدراسة إلى تقديم نموذج للخواص الإلكترونية والبصرية والطيفية لـ Au | الجزيء العضوي المعدني الأحادي | الوصلات الجزئية Au ، بالإضافة إلى التطبيق المخصص المناسب لهذه الهياكل قيد التحقيق في هذه الدراسة.

الخصائص المحسوبة المختلفة لهذه الهياكل النانوية ، ستسند تطبيقاتها مثل المركبات العضوية المعدنية الإلكترونية في الوسائط النشطة بالليزر ، والخلايا الشمسية الصبغية (DSSC) ، والترانزستورات ذات التأثير الميداني (OFET) ، والثنائيات العضوية الباعثة للضوء (OLED) و المسؤول عن دراسات نقل الجزيئات المفردة.

## 1-2 الجسيمات النانوية

إن الاهتمام الكبير بجسيمات النانو في السنوات الأخيرة كان نتيجة لخواصها المميزة والمبهرة. فعندما تصغر المادة وتكون ابعادها ضمن المقياس النانوي فإنها تظهر خواص فيزيائية وكيميائية جديدة ، حيث تكون خواصها تختلف وبشكل كبير جدا عن خواصها المعروفة إذا كانت في حجمها الطبيعي الكبير ( bulk ) لنفس المادة، وهذه الخاصية جعلت من جسيمات النانو " معجزة علمية جديدة " حيث أن الخصائص المعروفة لدينا عن مادة ما سوف تختلف تماما عندما تكون هذه المادة جسيم نانو ، فمثلا المواد العازلة تصبح موصلة عندما تكون جسيمات نانو و كذلك الموصلات تصبح عوازل عندما تصبح جسيمات نانو، و هكذا الكثير والكثير من السلوكيات و الخصائص المبهرة ، ويرجع أسباب هذا التغيير في الخواص والمميزات الفيزيائية والكيميائية لجسيمات النانو الى سببين رئيسيين هما [8] :

### أولا -زيادة المساحة السطحية:

أن زيادة سطح المادة يؤدي الى زيادة تفاعل المادة إي أن المادة تصبح ذات نشاط كيميائي عالي كلما زادت مساحة سطحها المتفاعل. حيث أن زيادة المساحة السطحية تعني زيادة عدد الذرات المتواجدة على السطح وأن ذرات سطح إي مادة هي المسؤولة عن عملية التفاعل الكيميائي مع الذرات الأخرى لأنها تملك إلكترونات غير مقيدة بينما الذرات في داخل المادة تكون أكثر تقيداً وبالتالي لا تشارك في عملية التفاعل الكيميائي وعليه فإنه عندما تصغر المادة فإن مساحة سطحها تزداد مما يعني زيادة نسبة الذرات المتواجدة على سطح المادة والتي تكون ذات حالات طاقة عالية مما يساعد في زيادة تفاعل هذه الذرات مع ذرات المواد المجاورة لها.



الشكل (1-2) زيادة المساحة السطحية للمواد عند تصغير حجمها [8].

### ثانيا: التأثير الكمي:

تبدأ التأثيرات الكمية في التحكم في تصرفات المادة في الحجم النانوي ، فتؤثر على خواصها البصرية، الكهربائية ، المغناطيسية ، وغيرها ، فعلى سبيل المثال : من الخصائص المميزة لجسيمات النانو القدرة على

تغيير اللون، وذلك عندما يتغير حجم الجسيمات وأشكالها وهذه الظاهرة نجدها عند بعض العناصر مثل عنصر الذهب فمن المعروف أن معدن الذهب مستقر كيميائياً فهو لا يتفاعل مباشرة مع المواد، ولكن عندما نحصل على جسيمات نانو من الذهب ( Nanogold particles ) ومع تصغير هذه الجسيمات الى حجم أصغر وأصغر، أي عندما تتغير أبعاد هذه الجسيمات من 100 نانومتر الى أبعاد أصغر مثل 80 نانومتر، 60 نانومتر، 40 نانومتر و هكذا فإن لون الذهب المعروف لدينا يتغير إلى ألوان أخرى تختلف حسب اختلاف أبعاد هذه الجسيمات كما يوضح الشكل (1-3) كما أن جسيمات النانو الذهبية تتفاعل مع الأشعة تحت الحمراء وتحولها إلى حرارة، وأن الذهب في حالته العادية ( bulk ) لا يتفاعل مع الإشعاع الكهرومغناطيسي.



الشكل (1-3) تغير لون جسيمات الذهب النانوية بسبب تغير أبعادها [8].

## 2-2 أشكال المواد النانوية

تصنع المواد النانوية على عدة أشكال يمكن تصنيفها إلى ثلاث مجموعات رئيسية [4]:

**المواد النانوية أحادية الأبعاد:** تكون هذه المواد على شكل طبقة مسطحة رقيقة ذات سمك نانوي في بعد واحد فقط، ولا يشترط أن يكون بعدها الأخران بمقاييس نانوية، ومن الأمثلة عليها: رقائق السيليكون المستخدمة في صناعة الخلايا الشمسية Solar Cells، والأفلام الرقيقة Thin Films كالمستخدمة في تغليف المنتجات الغذائية بهدف وقايتها من التلوث، والرقائق أو الأغشية Thin Layers المستخدمة في طلاء الأسطح Surface Nanocoating.

**المواد النانوية ثنائية الأبعاد:** وهي المواد التي يقل فيها مقياس بعدين من أبعادها عن ( 100 ) نانومتر مثل الأنابيب النانوية Nanotubes، كأنابيب الكربون النانوية Nanotubes، الأسلاك النانوية Nano Wires، والألياف النانوية Nano Fibers، وكذلك الجزيئات المستخدمة في تصنيع الأوساط الليزرية الفعالة.

**المواد النانوية ثلاثية الأبعاد:** وهي المواد التي تقل مقاييس أبعادها الثلاثة عن ( 100 ) نانومتر، ويطلق عليها الكريات النانوية Nano Spheres كالمساحيق فائقة النعومة Ultra Nano Powders، والحببيات النانوية Nano Particles.

## 1-2-2 أهم أشكال المواد النانوية

النقاط الكمية Quantum Dots : عبارة عن تركيب نانوي شبه موصل تسمى بالنقاط لأن أبعادها محصورة في مكان ثلاثي يسمى " نقطة " ، وتعتمد خصائصها الالكترونية والضوئية على حجمها نتيجة لتأثير الأبعاد الحصر الكمي الخاضع لميكانيكا الكم، وتقوم النقطة الكمية بتقييد إلكترونات شريط التوصيل وثقوب شريط التكافؤ أو الاكسبتونات ( وهي عبارة عن زوج مرتبط من الكترونات التوصيل وثقوب التكافؤ ) ، وعندما يكون قطر النقطة الكمية يساوي ( 10 ) نانومتر، فإنه يمكن رصف 3 ملايين نقطة كمية بجانب بعضها البعض بطول يساوي عرض الإبهام [12].

## 2-2-2 الجسيمات النانوية Nano Particles

يمكن تعريف الجسيمات النانوية على أنها عبارة عن تجمع ذري أو جزيئي يتراوح عددها من بضعة ذرات (جزيئي) إلى مليون ذرة مرتبطة ببعضها بشكل كروي تقريبا بنصف قطر أقل من (100) نانومتر . وعندما يصل حجم الجسيمات النانوية إلى مقياس النانو في بعد واحد فإنها تسمى البئر الكمي Quantum Well ، أما عندما يكون حجمها النانوي في بعدين فتسمى السلك الكمي Quantum Wire ، وعندما تكون هذه الجسيمات بحجم النانو في ثلاثة أبعاد فإنها تعرف بالنقاط الكمية Quantum Dots . والتغير في الأبعاد النانوية لهذه التركيبات الثلاثة يؤثر على الخصائص الالكترونية لها، مما يؤدي إلى حدوث تغير كبير في الخصائص الضوئية للتركيبات النانوية كما حصل في الجزيئات المستخدمة في هذا البحث عند استخدامها في جهاز الليزر كأوساط فعالة.

## 3-2 الإلكترونيات الجزيئية

تُعرّف الإلكترونيات الجزيئية بأنها فرع من فروع العلم الذي يدرس خصائص النقل الإلكتروني للأنظمة المكونة من جزيئات فردية. نظراً لأن بعض الأنظمة الجزيئية لها أبعاد قليلة نانومتر، يجب اعتبار الإلكترونيات الجزيئية قسماً فرعياً من تكنولوجيا النانو [15]. تعتمد الإلكترونيات الجزيئية كتقنية مستقبلية على نهج تصاعدي، بهدف تجميع جزيئات متخصصة ومصممة لتشكيل هياكل معقدة بشكل متزايد، ومكونات نشطة، وأسلاك توصيل.

منذ عدة عقود ، ظلت بعض المشكلات الأساسية بدون إجابة ، مثل كيفية تدفق تيار كهربائي عبر جزيء واحد. يتم تصور الإلكترونات التي تنتقل عبر جزيء واحد بطريقتين مختلفتين، الأول هو نقل الإلكترون ، وهي العملية التي يتم من خلالها نقل الشحنة من أحد طرفي الجزيء إلى الطرف الآخر. والثاني هو نقل



الشحنة، والذي يستلزم تدفق التيار عبر جزيء واحد مقترن بين قطبين كلاهما متصلان ، من منظور علمي أساسي ، قد توفر إلكترونيات الجزيئات إجابات على الاستفسارات السابقة وقد تكون أداة مثالية للتحقيق في التوصيل الكهربائي والإلكتروني على المستوى الذري ، حيث تهيمن الظواهر الميكانيكية الكمومية بالكامل [15].

بالإضافة إلى ذلك، تم التعرف على ظواهر جزيئية جديدة مثل التداخل الكمي، مما يفتح طرقاً جديدة للتصميم الجزيئي وينتج عنه مقترحات لتصميم المواد الجزيئية [14] بخصائص مفيدة مثل الشكل الكهروإلكتروني المعزز لنشاط الأوساط الليزرية الفعالة. بالإضافة إلى ذلك ، قد تكون الوصلات الجزيئية مفيدة في التحقيق في المبادئ الأساسية لمسارات نقل الإلكترون. ومع ذلك ، هناك دوافع تكنولوجية إضافية ، أحدها هو استخدام الجزيئات كمكونات نشطة إلكترونيًا في مجموعة متنوعة من التطبيقات. يرتبط أحد هذه الأسباب بالحجم ، حيث يتيح الحجم الطبيعي للجزيئات (بين 1 و 10 نانومتر) كثافة تعبئة أعلى على الجهاز ، مما يؤدي إلى التكلفة والكفاءة ومزايا تبديد الطاقة [15]. تساهم هذه المفاهيم والعديد من المفاهيم الأخرى في جاذبية الإلكترونيات الجزيئية كموضوع للبحث.

## 4-2 الليزر

هو تضخيم الضوء بالانبعاث المحفز للإشعاع بالإنجليزية Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation اختصاراً (LASER) هو جهاز ينبعث منه الضوء من خلال عملية تضخيم ضوئي تعتمد على الانبعاث المستحث للإشعاع الكهرومغناطيسي، يستخدم الليزر أشعة ضوئية احادية الطول الموجي أي لها نفس طول الموجة وهي تتولد في أنواع معينة من البلورات النقية وكذلك الجزيئات النانوية. ويعمل جهاز الليزر على تسوية طور الموجات الضوئية بحيث تكون جميعها في نفس الطور، فتشدد طاقتها. يبين الشكل المجاور الموجات الضوئية التي هي في نفس الطور، فيحدث ما يسمى في الفيزياء تداخل بناء للموجات الضوئية [16].

ويمكن تشبيه نبضة شعاع الليزر بالكتيبة العسكرية حيث يتقدم جميع العسكر بخطوات متوافقة منتظمة. وبينما يشع المصباح عادي الضوء في موجات ضوئية مبعثرة غير منتظمة فلا يكون لها طاقة الليزر، فتكون كالناس في الشارع كل منهم له اتجاه غير الآخر. ولكن باستخدام لبلورات من مواد مناسبة (مثل الياقوت الأحمر) عالية النقاوة يمكن تحفيز إنتاجها لأشعة ضوئية من لون واحد (أي ذو طول موجة واحدة) وكذلك تكون في طور موجي واحد. عندئذ تتطابق الموجات على بعضها البعض - عن طريق انعكاسها عدة مرات

بين مرأتين داخل بلورة الليزر أو جزيئات الليزر كما في الليزر الجزيئي فتصبح كالعسكر في الكتبية - فتنظم الموجات وتتداخل تداخلا بناء وتخرج من الجهاز بالطاقة الكبيرة المرغوب فيها.

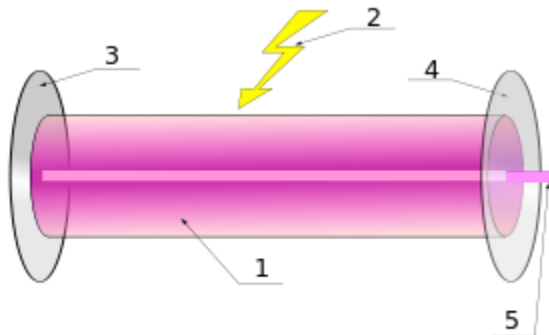


شكل (1-2) أشكال أنواع مختلفة من الليزر [17] .

## 2-5 أجزاء الليزر

هذا الشكل يوضح أجزاء جهاز الليزر:

- الوسط أو البلورة المنتجة لأشعة الليزر.
- طاقة كهربائية لتحفيز الوسط الليزري على إصدار موجات ضوئية ذات طول موجة واحدة (ضوء بلون واحد).
- عاكس للضوء (مرآة).
- عدسة خروج الشعاع وقد تكون مستوية أو عدسة مقعرة.
- شعاع الليزر الخارج (خرج ليزري).



ويعمل جهاز الليزر على توليد و انعكاس ضوء ذو لون واحد، أي ذو طول موجة واحدة بين المرآة الخلفية (3) وعدسة خروج شعاع الليزر (4). ويتم ذلك بتحفيز الوسط الليزري (1) على إنتاج ذلك اللون من الضوء؛ وهي خاصية من خصائص البلورة المختارة أو الوسط الليزري المستخدم (يمكن أن يكون الوسط غاز معين ، مثل ثاني أكسيد الكربون او وسط يتكون من جزيئات نانوية) وبعد انعكاس أشعة الضوء داخل الوسط عدة مرات بين (3) و (4) تصل الموجات الضوئية المتجمعة إلى وضع التناسق. عندئذ تتميز الموجات الضوئية بانتظام طورها(خطوتها) وتخرج من العدسة (5) كشعاع ليزر شديد الطاقة.

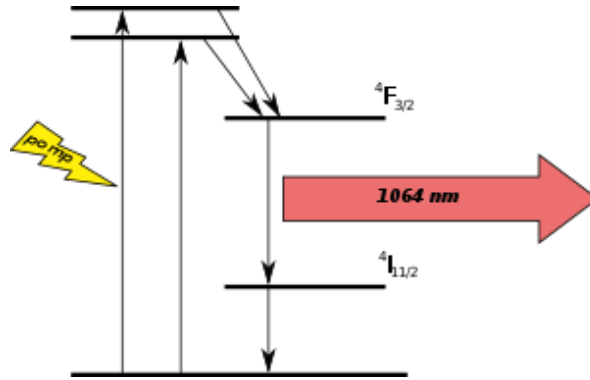
## 6-2 طريقة عمل الليزر

الشكل يوضح مستويات الطاقة للإلكترونات في ذرة النيوديميوم . في حالة عدم إثارة ذرة النيوديميوم تشغل الإلكترونات المستوى القاعدة (مستوى الطاقة السفلي في الشكل). ولكن يمكن إثارة الإلكترون بواسطة جهاز يصدر أشعة من الخارج أو كهرباء (تسمى مضخة) فيثار الإلكترون ويرتفع إلى مستوى طاقة أعلى ؛ إلا أنه لا يبقى فيه طويلا وخلال ما هو أقل من ثانية يهبط إلى مستوى طاقة متوسط  $F$  ، وفي هذا المستوى من الطاقة يستطيع الإلكترون البقاء فيه عدة ثوان [18].

تعمل المضخة الضوئية على إثارة عدد كبير من الإلكترونات في الوسط الليزري وتبقى عدة ثوان في المستوى  $F$  ؛ إلا أنها سرعان أن تهبط كمجموعة من مستوى الطاقة  $F$  إلى مستوى الطاقة المنخفض  $I$  . انتقال الإلكترونات في البلورة من مستوى الطاقة المرتفع  $F$  إلى مستوى الطاقة المنخفض  $I$  يكون مصحوبا بإطلاقه شعاع ضوء ذو طول موجة طولها 1064 نانومتر (هذه خاصية بلورة الليزر). تنطلق تلك الأشعة ذات طول الموجة 1064 نانومتر دفعة واحدة وتنعكس عدة مرات بين المرآتين فتتناسق أطوال تلك الموجات وتخرج من المرآة النصف شفافة (4 في الشكل) وتكون بذلك قد تتناسقت ووصلت إلى قوتها وتصيب الهدف.

فمن مواصفات الشعاع الخارج (شعاع الليزر) الهامة أن لون ضوئه واحد، أصفر أو أزرق أو بنفسجي، أو قد يكون أشعة تحت الحمراء، كما توجد ليزرات تصدر أشعة إكس .وبالنسبة إلى جهاز الليزر فهناك خاصيتان:

- **نصف قطر الانحناء:** قد يكون سطح العدسة الداخلي مستويا أو مقعرا وذلك بحسب الغرض المرغوب فيه. ويطل على السطح الداخلي للعدسة بطلاء فضي نصف عاكس حتى يستطيع شعاع الليزر الخروج من الوسط إلى الخارج. وإذا كانت هناك رغبة في تجميع الشعاع الخارج وتركيزه في بؤرة يكون السطح الخارجي للعدسة مقعرا. كما يطل على السطح الخارجي بطلاء يمنع الانكسار، لكي يتيح خروج شعاع الليزر الناتج من دون فاقد.



- **معامل انعكاس العدسة:**

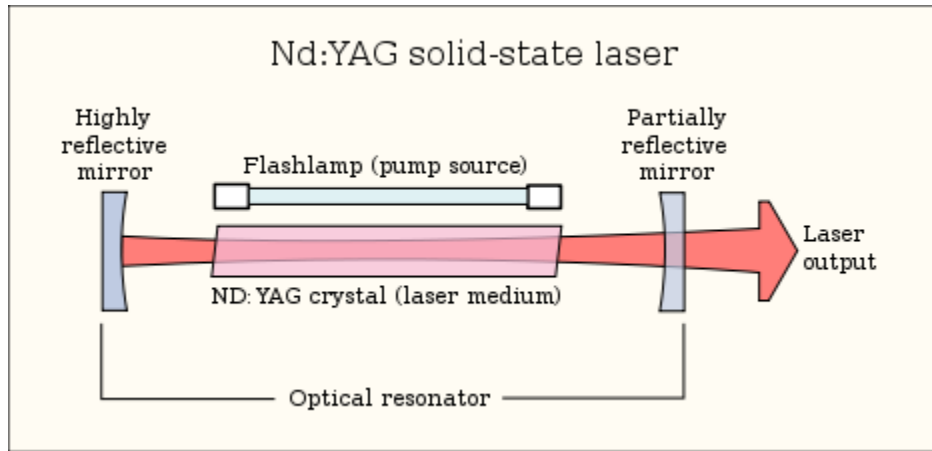
يعتمد عدد الانعكاسات لأشعة الضوء المتراكمة داخل الوسط الليزري على نوع الوسط المستخدم. ففي "ليزر الهيليوم-نيون" نحتاج إلى درجة انعكاس للمرآة بنسبة 99% لكي يعمل الجهاز بكفاءة. وأما في حالة

"ليزر النيتروجين" فلا حاجة للانعكاس الداخلي (درجة انعكاس 0%) حيث أن ليزر النيتروجين يتميز بدرجة فائقة على إنتاج الأشعة. ومن جهة أخرى تعتمد خواص العدسة المتعلقة بانعكاس الضوء على طول موجة الضوء. ولهذا يُعطي للخواص الضوئية للعدسة عناية خاصة عند تصميم جهاز ليزر [18].

## 7-2 الوسط الليزري

الوسط الليزري أو الوسط الفعال هو العامل الرئيسي لتحديد الطول الموجي للعملية، ولخصائص الليزر الأخرى. الأوساط الليزرية للمواد المختلفة لها طيف خطي أو طيف واسع. الأوساط الليزرية ذات الطيف الواسع تسمح بضبط ترددات الليزر. هناك المئات إن لم يكن الآلاف من الأوساط الليزرية التي تم توليد شعاع الليزر بها. (انظر قائمة أنواع الليزر للحصول على قائمة الأكثر أهمية). الوسط الليزري يتم إثارته عن طريق مصدر الضخ لتحقيق الأسكان المعكوس، وفي الوسط الليزري ينتج الأصدار التلقائي أو المحثوث للفوتونات، ثم يتم تضخيمها في المجاوبة. أمثلة للأوساط الليزرية تشمل [19]:

- السوائل مثل صبغة الليزر. وعادة ما تكون مذيبات عضوية كيميائية، مثل الميثانول، إيثانول أو الايثيلين، والتي تضاف إليها الأصباغ الكيميائية مثل الكومارين، رودامين، فلوريسين. التكوين الكيميائي الدقيق لجزيئات الصبغة يحدد الطول الموجي لعملية الليزر السائل.
- الغازات مثل ثاني أكسيد الكربون، الأرجون، الكريبتون والخلطات مثل الهيليوم-النيون. هذا الليزر غالبا ما يتم ضخه عن طريق التفريغ الكهربائي.
- المواد الصلبة مثل البلورات والزجاج. المادة الصلبة المضيئة عادة ما تكون مخلوطة مع بعض الشوائب مثل الكروم، النيوديميوم، الإربيوم تشمل الإيتريوم الألومنيوم العقيق، الإيتريوم الليثيوم الفلورايد، الياقوت ومختلف أنواع الزجاج. أمثلة أوساط ليزر الحالة الصلبة تشمل: ياقوت تيتانيوم، الياقوت الكروميوم (عادة معروفة باسم روبي)، كروميوم ليثيوم (الكروم مع الليثيوم الستروننتيوم الألومنيوم فلوريد).
- أشباه الموصلات نوع من البلورات الصلبة مع توزيع أحادي أو مادة بمستويات أحادية مختلفة والتي بها تسبب حركة الإلكترونات عمل الليزر. ليزر أشباه الموصلات عادة ما يكون صغيرا، ويمكن ضخه بواسطة تيار كهربائي بسيط، مما يمكن استخدامهم في أجهزة استهلاكية مثل مشغلات القرص المضغوط [20].
- الأوساط الليزرية من الجزيئات النانوية كالجزيئات المستخدمة في البحث.



شكل (2-2) شكل توضيحي لوسط ليزري فعال [19,20].

## 1-3 مقدمة

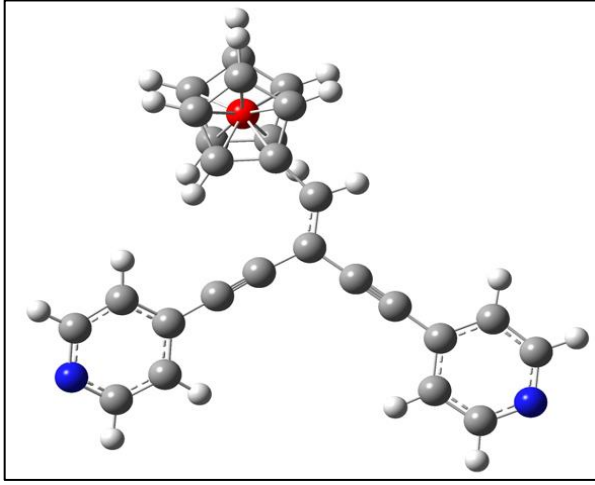
يوضح الشكل (4.1) التراكيب الجزيئية المناسبة الاثني عشر للسلسلة المختلفة المقترحة من المركبات العضوية المعدنية التي تم بحثها في هذا البحث. يناقش في هذا الفصل الخصائص الإلكترونية للمركبات لثلاث مجموعات ارتباط مختلفة. يجمع التصميم الجزيئي بين ثلاث خصائص هيكلية رئيسية: أولاً تحتوي الجزيئات على وحدات تثبيت طرفية بيريديل ، وثيول ، وثيوماثيل (Bicyclobentedine metal-2pyridyl) ، و (Bicyclobentedine metal-2benzthiomathyl) و (Bicyclobentedine metal-2benzthiol) ؛ ثانياً تحتوي كل جزيء على واحدة من اثنتي عشرة وحدة أساسية مختلفة ، مع وجود معادن (Fe و Co) و (Pt و Ru) في المركز و ثالثاً يحدث الاقتران بين الوحدة الأساسية ومجموعة الارتباط، مما يؤدي إلى سلسلتين متماثلتين المعزولة درسنا الخصائص الإلكترونية للمركبات في حالتها الأساسية وحالتها المثارة ؛ درسنا الهياكل المريحة للحصول على أفضل تحسين هندسي للهياكل ؛ ودرسنا حالة الإثارة للحصول على قياس الامتصاص وأطياف الانبعاث.

يتم رسم الجزيئات الموصي بها في البداية باستخدام برنامج [21] Avogadro. تم استخدام نهج DFT نظرية دالة الكثافة Lee-Yang-Parr B<sub>3</sub>LYP جنباً إلى جنب مع مجموعات أساس SDD في حزمة Gaussian 09 من البرامج للتحقيق في الحالة الأرضية والميزات الطيفية لهذه الجزيئات [22]. يتم التحقيق في خصائص الحالات المثارة والحالات الانتقالية لجزيئات الاسترخاء باستخدام نظرية دالة الكثافة المعتمدة على الزمن، TD-DFT.

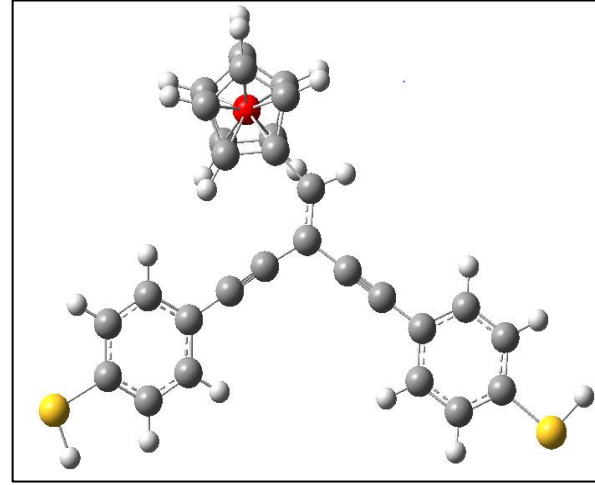
## 2-3 التراكيب الجزيئية والأمثلية الهندسية

يتضح في الشكل (4.1) أن (حلقات البيريديل مع الثيول والثيوميثيل) موجودة على جانبي المعدن ثنائي كلوبنتين ، كما هو الحال في فصل الإلكترون بين الوحدات الجزيئية والحلقات العطرية. تم دراسة تأثير إدخال مجموعة ارتباط في حلقات البيريديل. لاستكشاف تأثير عدم التناظر مقارنة بمركبات التناظر، تم تصميم العديد من المركبات التي تنتمي إلى مجموعات فرعية مختلفة. نحن نحقق في تأثير قبول انتقال الإلكترون ومجموعات التبرع بالإلكترون. تم تحديد جميع المعلمات الهندسية باستخدام طريقة B<sub>3</sub>LYP جنباً إلى جنب مع مجموعات أساس SDD في برنامج Gaussian 09. تتطابق المعلمات الهندسية المشتقة من حسابات DFT [22] جيداً مع تلك التي تم الحصول عليها من بيانات الأشعة السينية  $C-C = 1.421 \text{ \AA}$  ،  $C-C-C = 120$  درجة. توضح هياكل الاسترخاء للمركبات في الشكل (4.1) أنها تظهر جميعها تشابهاً شبه مستو.

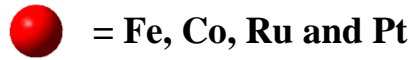
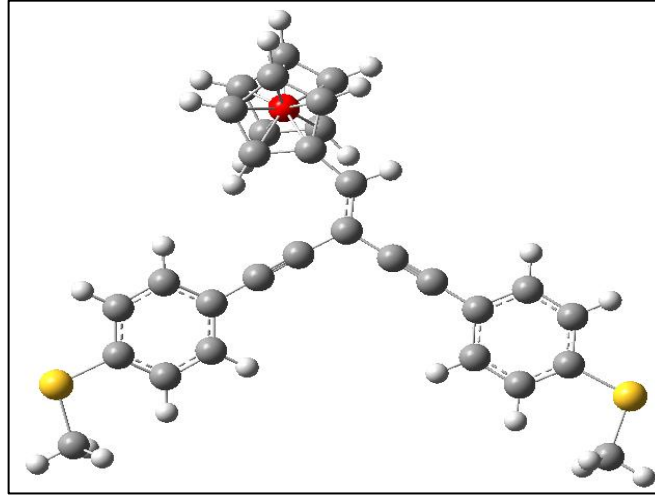
### Bicyclobentedine-Pyridyl-metal



### Bicyclobentedine-Thiol-metal



### Bicyclobentedine-ThioMethyl-metal

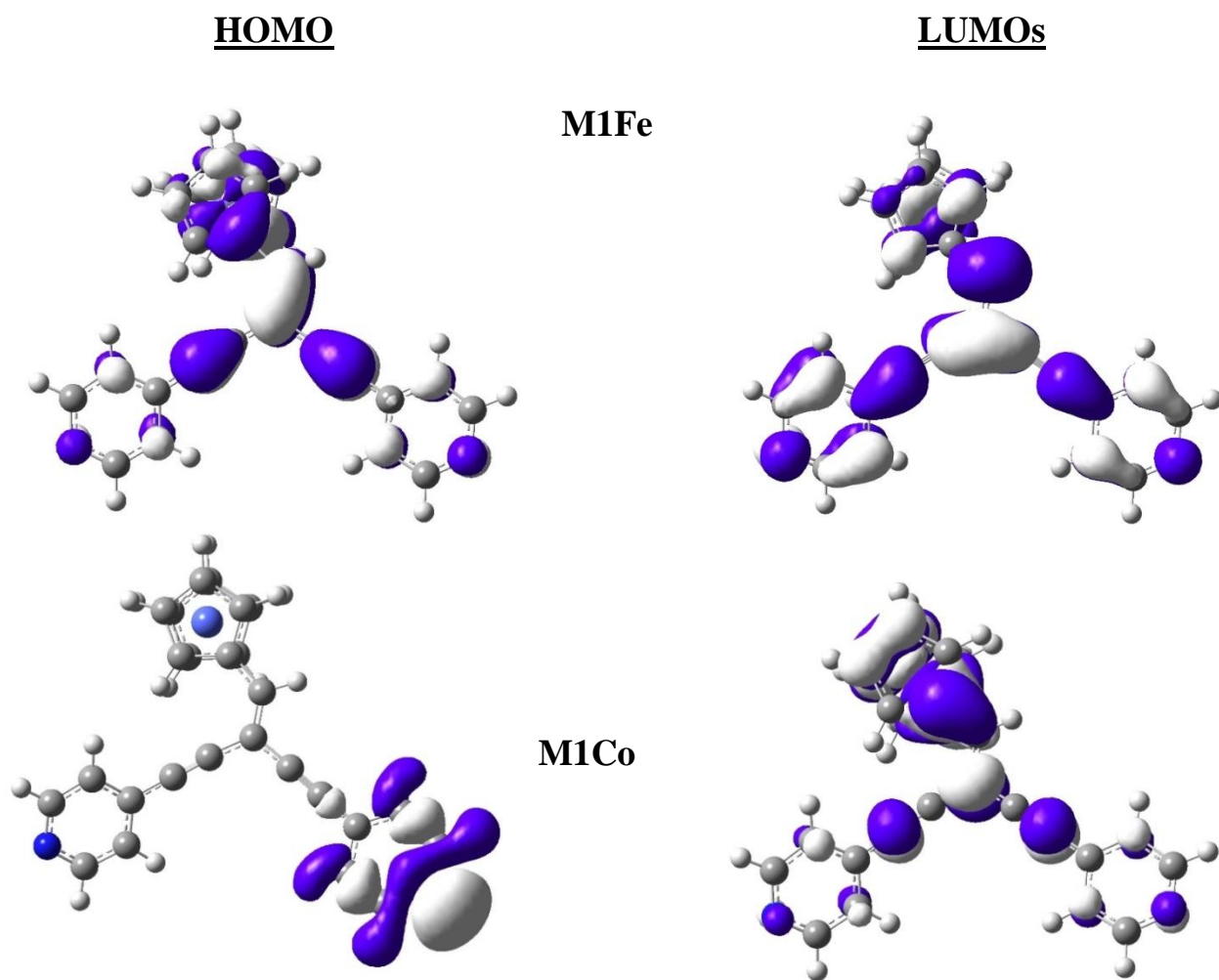


### شكل (1-3) الأمثلية الهندسية للجزيئات المدروسة

يوضح الشكل 3.1 الأشكال الهندسية المريحة لجميع الجزيئات في الطور المثالي مع مجموعات معدنية ومثبتة متنوعة، حيث يوضح الشكل أن هناك ثلاث مجموعات من المعدن ثنائي الحلقات بناءً على مجموعات الارتباط المرتبطة بالجزيئات. تحتوي المجموعة الأولى على معدن ثنائي ثنائي كلوبنتين متصل بحلقات فينيل عبر مجموعات ارتباط بيريديل على كلا الجانبين، بينما تحتوي المجموعة الثانية على معدن ثنائي ثنائي كلوبنتين مع مجموعة تثبيت ثيول إضافية. بالإضافة إلى ذلك، تحتوي المجموعة الثالثة على معدن ثنائي كلوبنتين مرتبط بحلقات فينيل عبر مجموعات تثبيت ثيوميثيل على كلا الجانبين.

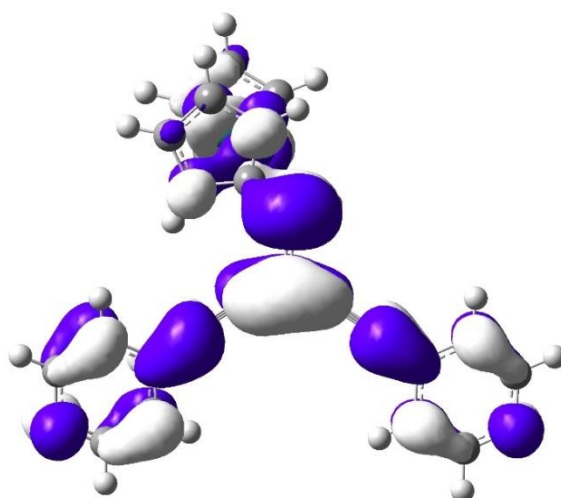
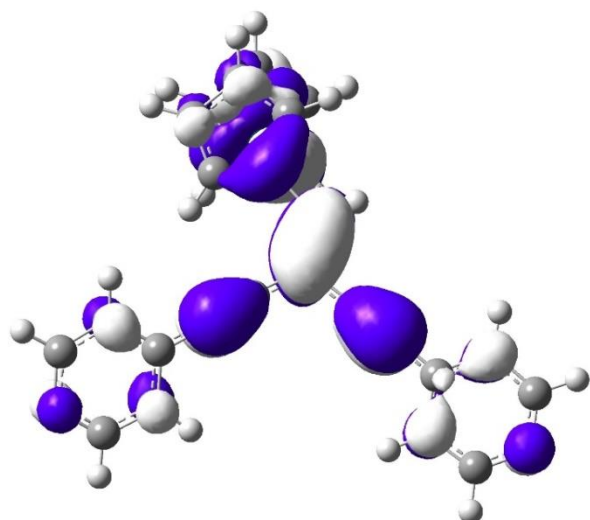
### 3-3 الخواص الإلكترونية للجزيئات

للحصول على فهم أفضل للخصائص الإلكترونية للجزيئات والسلوك الكهربائي للوصلات، تم استخدام النظرية القائمة على DFT [22]. للتحقق من توزيع وتكوين المدارات الجزيئية الحدودية، أجريت التحليلات الأولى للتراكيب الإلكترونية لجميع المركبات العضوية المعدنية على مستوى نظرية B<sub>3</sub>LYP باستخدام مجموعة أساس SDD. يوضح الشكل (3.2) قطعاً لأعلى مدارات جزيئية مشغولة وأدنى مدارات جزيئية غير مشغولة (HOMO و LUMO ، على التوالي).

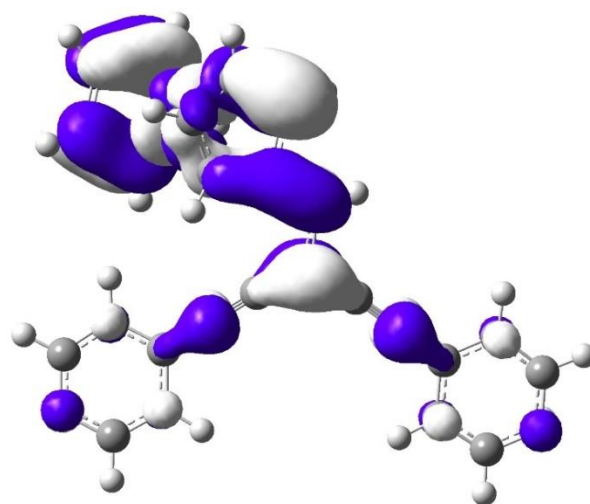
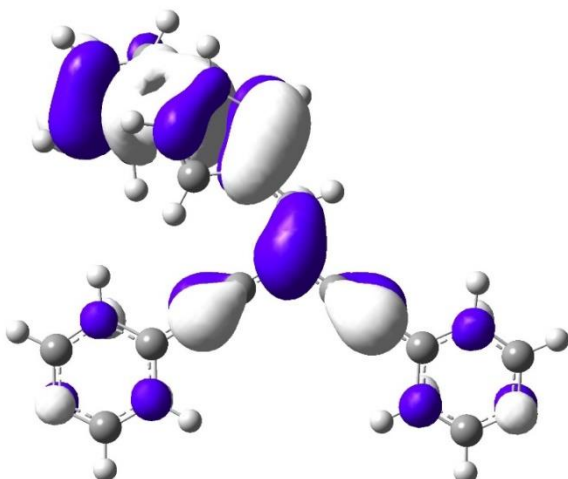




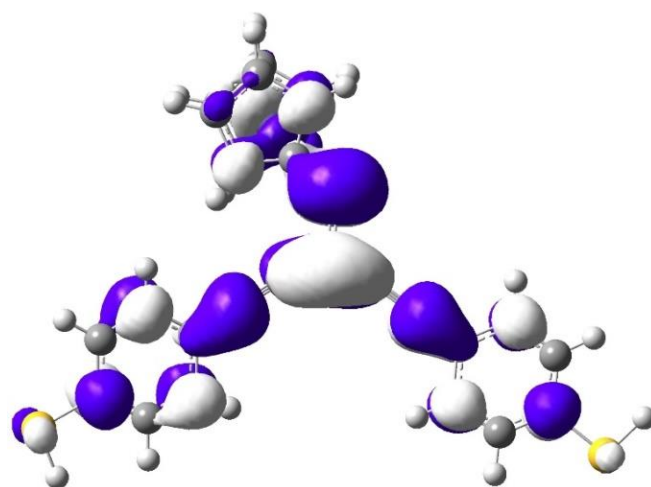
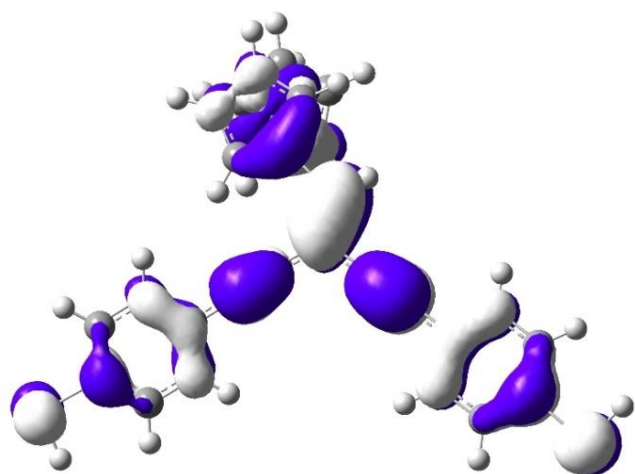
**M1Ru**



**M1Pt**



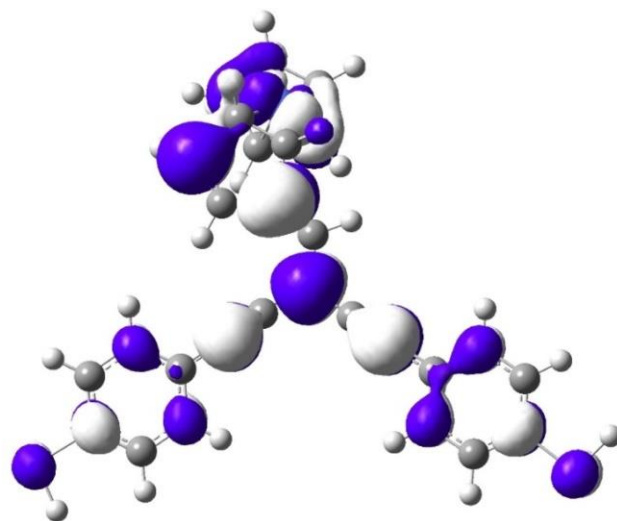
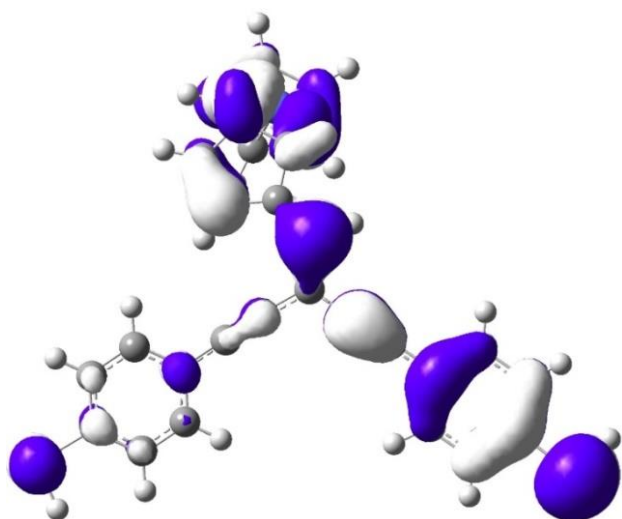
**M2Fe**



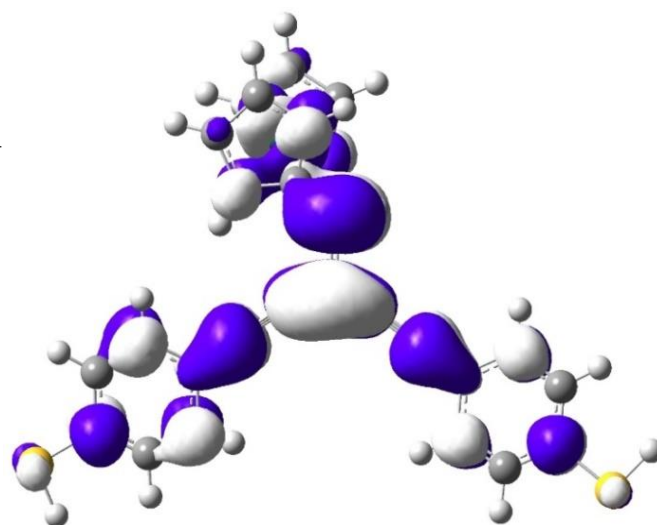
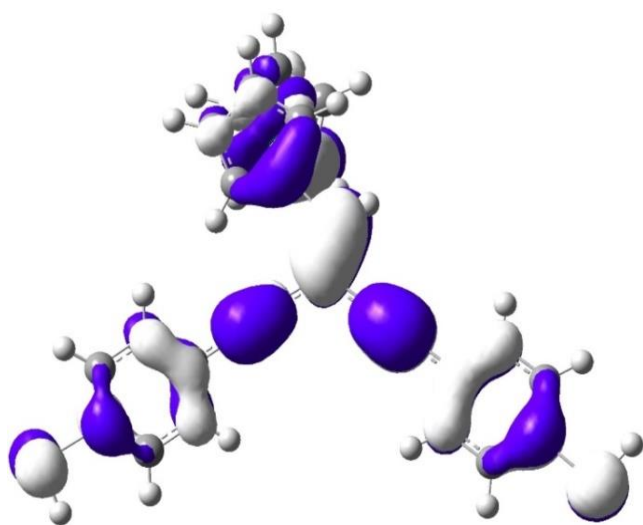
**HOMO**

**LUMO**

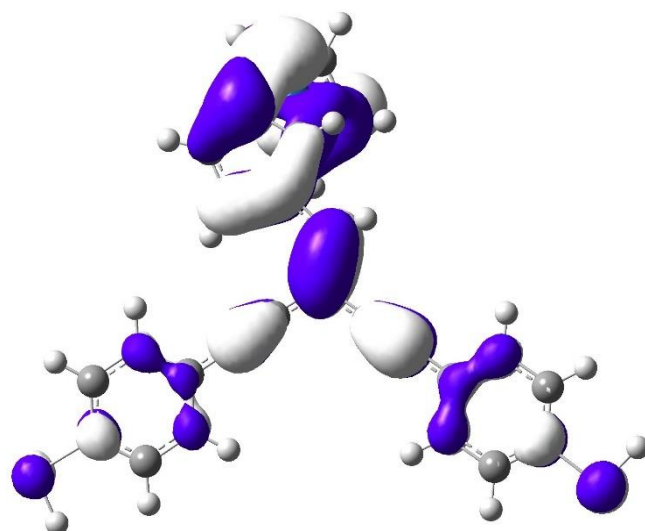
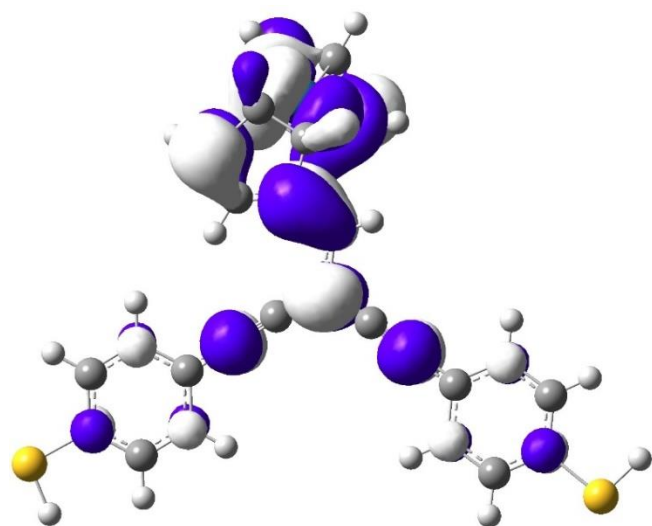
**M2Co**



**M2Ru**



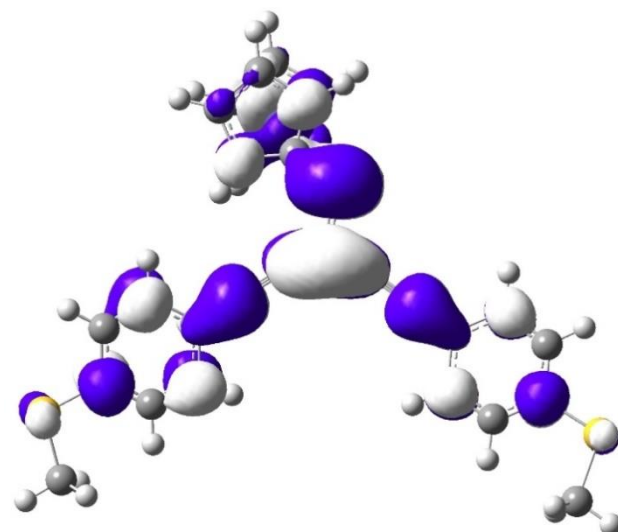
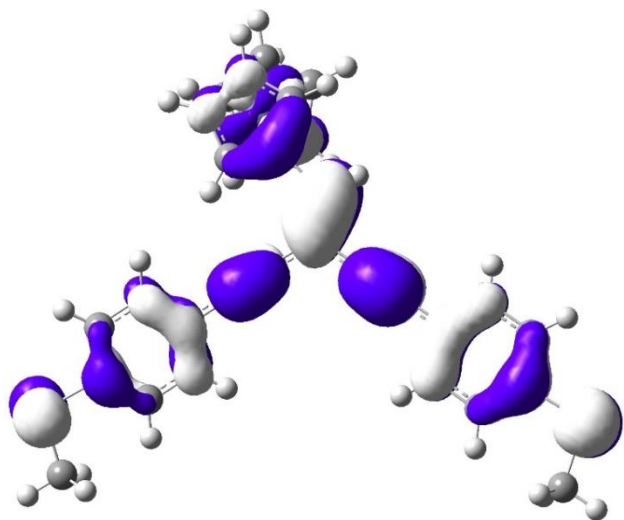
**M2Pt**



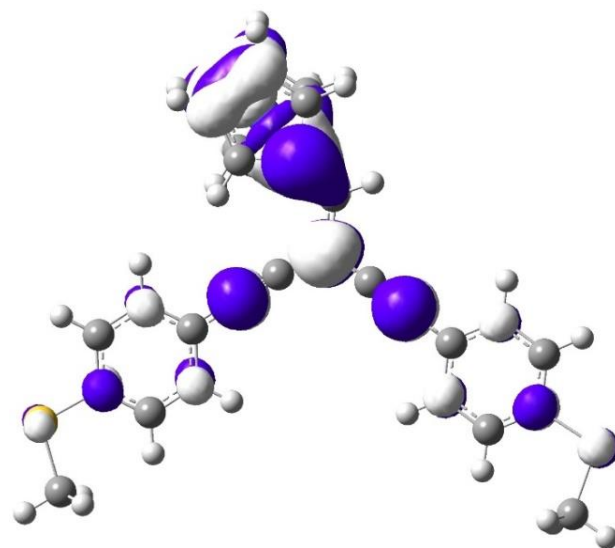
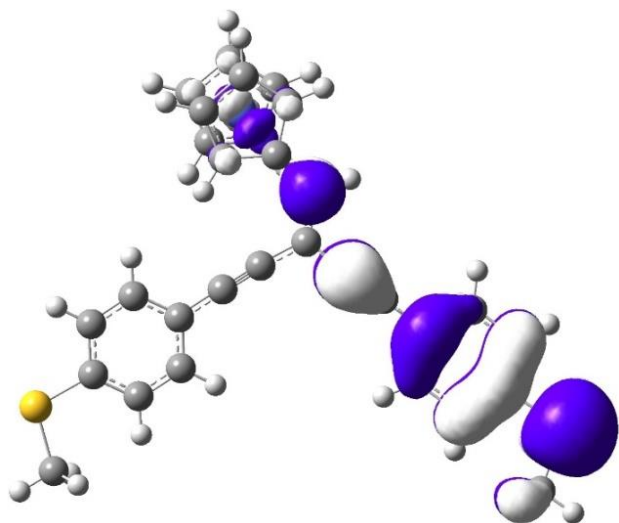
HOMO

LUMO

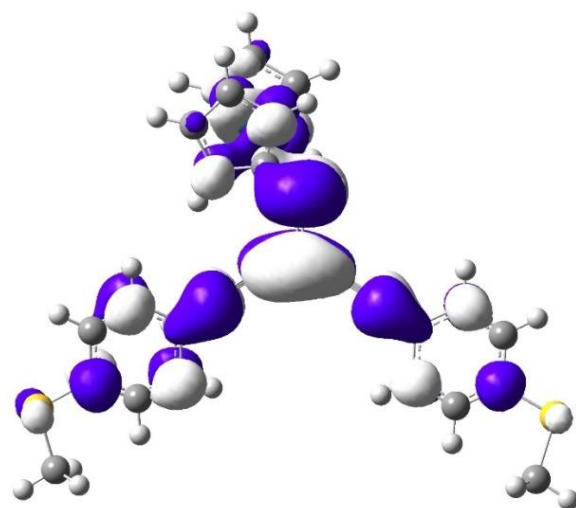
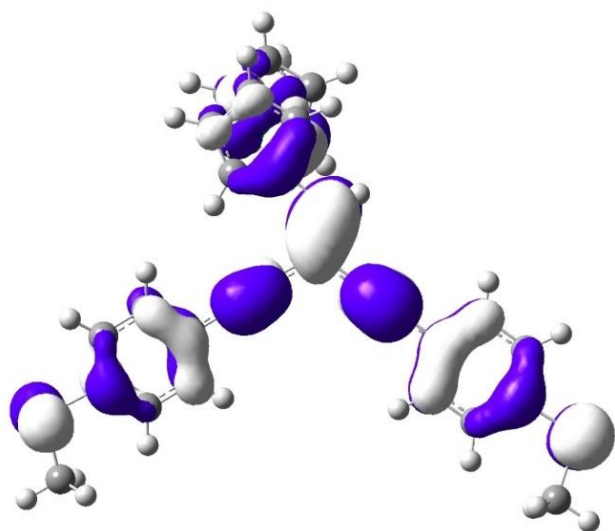
M3Fe

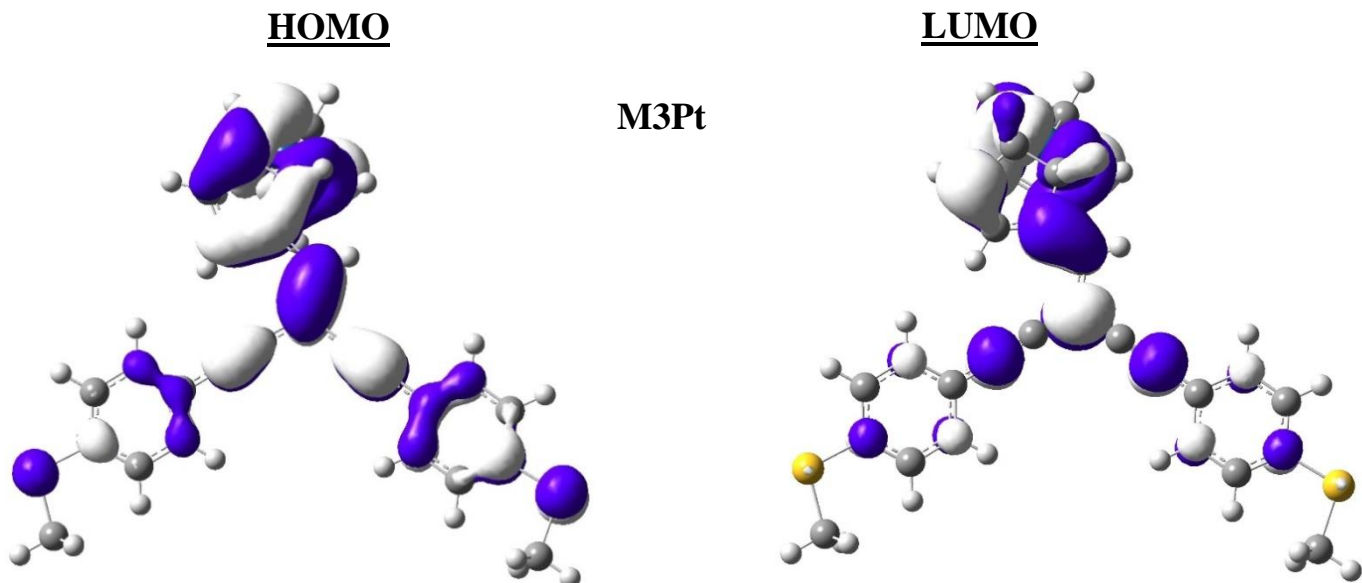


M3Co



M3Ru





**Figure 3.2. The iso-surfaces ( $\pm 0.02$  (e/bohr<sup>3</sup>)<sup>1/2</sup>) of the HOMOs and LUMOs for all molecules isolated.**

لتحليل وفهم سلوك أطراف امتصاص المركبات، يلزم دراسة هيكلها الإلكترونية. يتم سرد الطاقات المدارية الحدودية (HOMO و LUMO) وفجوة H-L للمركبات المعزولة في الجدول (3.1). وفقاً للبيانات الواردة في هذا الجدول، تظهر بعض المركبات التي تم فحصها عدم تحديد موقع LUMO وتوطين HOMO. يتم تغيير طاقات المركبات التي تم فحصها بشكل كبير كما هو موضح في الجدول. أظهرت النتائج أن HOMO و LUMO متميزان بوضوح، مما يعني أن الهياكل المختلفة لها تأثير كبير على الخصائص الإلكترونية وأن مجموعة الارتباط والمعدن لهما تأثير على طاقات HOMO و LUMO.

**Table 3.1: The HOMO, LUMO and H-L gap for all compounds.**

Compounds	HOMO (eV)	LUMO (eV)	H-L gap(eV)
<b>Group 1</b>			
BCP-Fe	-5.728	-2.477	3.251
BCP-Co	-8.984	-6.428	2.556
BCP-Ru	-5.721	-2.486	3.235
BCP-Pt	-5.344	-3.085	2.259

<b>Group 2</b>			
<b>BCPT-Fe</b>	<b>-5.268</b>	<b>-1.995</b>	<b>3.273</b>
<b>BCPT-Co</b>	<b>-8.255</b>	<b>-6.438</b>	<b>1.817</b>
<b>BCPT-Ru</b>	<b>-5.232</b>	<b>-1.988</b>	<b>3.244</b>
<b>BCPT-Pt</b>	<b>-5.211</b>	<b>-3.339</b>	<b>1.872</b>
<b>Group 3</b>			
<b>BCPTM-Fe</b>	<b>-5.145</b>	<b>-1.891</b>	<b>3.254</b>
<b>BCPTM-Co</b>	<b>-7.775</b>	<b>-5.824</b>	<b>1.951</b>
<b>BCPTM-Ru</b>	<b>-5.111</b>	<b>-1.883</b>	<b>3.228</b>
<b>BCPTM-Pt</b>	<b>-5.103</b>	<b>-3.252</b>	<b>1.851</b>

أشارت النتائج إلى أن وجود إلكترون يجذب إلى N أو S في مجموعات الربط المختلفة على جانبي المركبات يؤدي إلى انخفاض في LUMO وبالتالي انخفاض في H-Lgap أو فجوة الطاقة. بالإضافة إلى ذلك ، يؤدي وجود روابط C-C ثلاثية ومزدوجة إلى انخفاض في طاقة LUMO وتقليل فجوة الطاقة بسبب عدم تمركز كل من طاقات HOMO و LUMO [22،23].

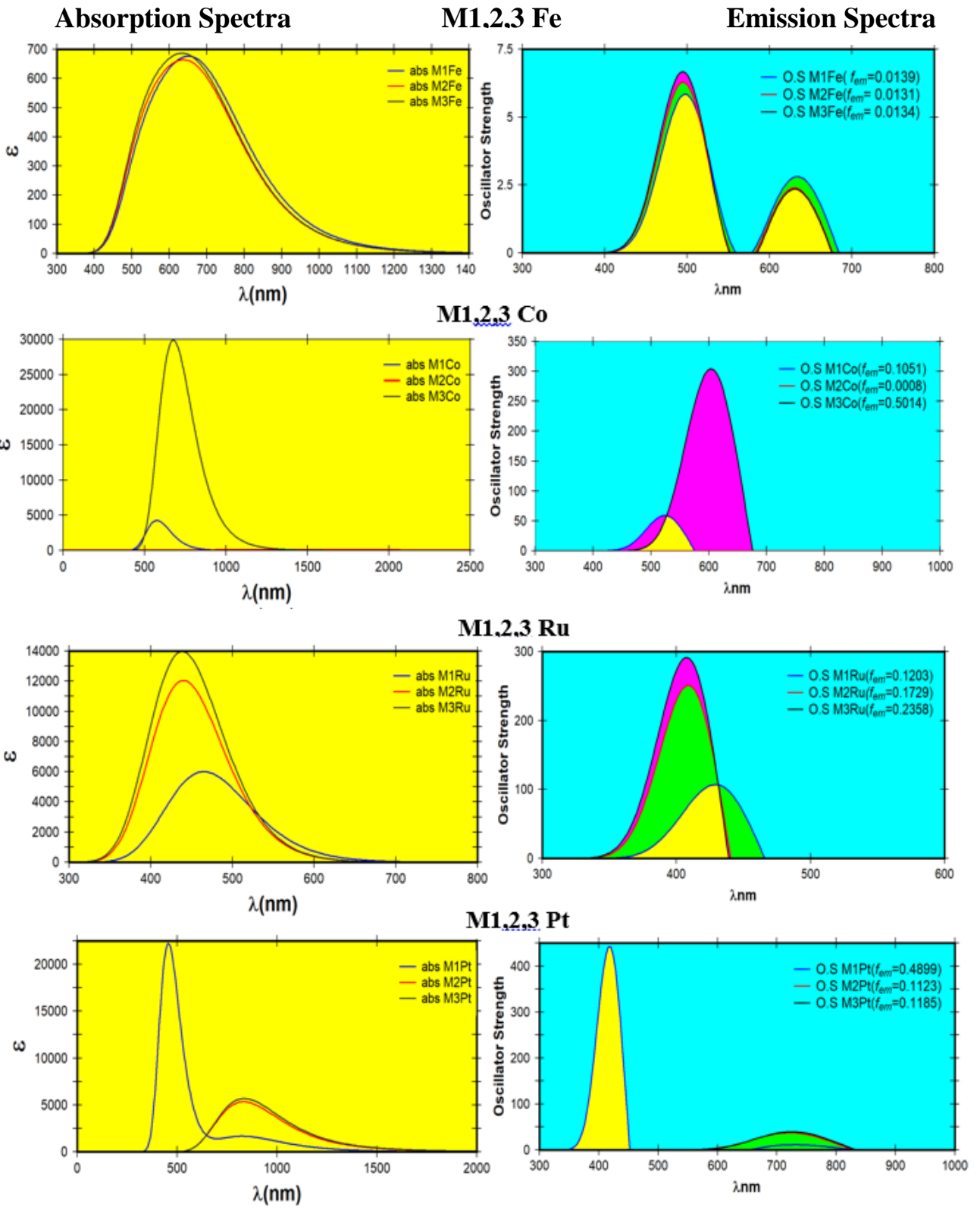
تلعب المدارات الجزيئية الحدودية FMOs دورًا مهمًا في تحديد حالات الشحنة المنفصلة للمركبات. كما هو موضح، فإن كل فلز عضوي تم فحصه له حالات فصل إلكترون ممتازة. وفقًا لتوزيع HOMO و LUMO في الشكل (3.2)، يحدث توطين قوي لـ HOMOs على الوحدات الفرعية المانحة ثنائية البننادين المعدنية إلى العمود الفقري في المركبات، في حين يحدث إلغاء تموضع قوي لـ LUMO على الجسور بين المعدن و Bicyclopentadiene في جزيئات المركز، مما يشير إلى أن كثافة الإلكترون تتحرك على طول العمود الفقري في المركبات. نظرًا لأن كثافة الإلكترون لـ LUMO تتركز في الغالب على الوحدات المستقبلية

، فقد تؤدي التحولات الإلكترونية للمركبات المدروسة من HOMO إلى LUMO إلى نقل الشحنة داخل الجزيء من الوحدات المانحة إلى مجموعات المرساة على الوحدات المستقبلية عبر الجسر المترافق بين الجانبين.

### 4-3 أطيف الأشعة المرئية وفوق البنفسجية (الخواص البصرية)

تم فحص وتقييم أطيف الأشعة فوق البنفسجية والمرئية للمواد قيد البحث باستخدام نهج TD-SCF للمجال المعتمد على الزمن مع نفس المجموعات الوظيفية والأساسية الهجينة كما هو الحال في طريقة SDD-DFT/B<sub>3</sub>LYP. العامل الحاسم في تحديد ما إذا كان يمكن استخدام المركب كمواد كهروضوئية هو طيف امتصاص المركب الذي يساوي الطيف الشمسي. كما هو موضح في الشكل (3.3)، تظهر المركبات انتقالات مباشرة وغير مباشرة من نطاق التكافؤ إلى نطاق التوصيل بأطوال موجية امتصاص (690.82، 576.08، 471.31، 449.03) نانومتر، على التوالي للمجموعة 1؛ ضمن هذه المجموعة، تحدث الإرسالات المباشرة وغير المباشرة بنسب متفاوتة، كما يتضح من نسبة الإرسال المباشر باللون الأحمر في الجدول (3.2). المركبات في المجموعة 2 تنتقل بشكل مباشر أو غير مباشر من التكافؤ إلى التوصيل عند أطوال موجات الامتصاص (684.42، 1318.10، 442.3، 821.48) نانومتر، على التوالي. يعرض المركب M3Co أيضًا انتقالًا مباشرًا من HOMO إلى LUMO بطول موجة يبلغ 684.46 نانومتر؛ يُظهر هذا الجزيء أعلى انتقال مباشر يصل إلى 95%، وهو ما لم يتم ملاحظته في الجزيئات الأخرى. قيم الشدة ( $\epsilon = a.u$ ) أو طاقة الامتصاص  $E_{abs}$  (eV) وطول موجة الامتصاص  $\lambda_{max}$  (نانومتر) وقوة المذبذب O.S والخاصية المدارية الجزيئية MOC% وحالات الانتقال موضحة في الجدول (3.2).





شكل (3.3): أطيف الامتصاص والانبعث لجميع المركبات.

**Table 3.2: The Absorption spectra calculations of the compounds.**

Compounds	$E_{\text{abs}}$ ( $\epsilon=$ a.u)	$\lambda_{\text{max}}$ (nm)	O.S	MO character %
<b>Group 1</b>				
BCP-Fe	661	690.82	0.0139	H-2->L+3 (13%), H-1->L+4 (27%), <b>HOMO-&gt;LUMO (18%)</b> , HOMO->L+3 (21%), H-2->LUMO(9%), H-2->L+7 (3%), HOMO->L+7 (6%)
BCP-Co	4268	576.08	0.1051	H-11->L+1 (22%), H-10->LUMO (38%), H-1->LUMO (28%), H-10->L+2 (5%), H-9->L+1 (2%)
BCP-Ru	5958	471.31	0.1203	H-2->LUMO (24%), <b>HOMO-&gt;LUMO (50%)</b> , H-3->LUMO (4%) H-3->L+2 (3%), H-2->L+2 (5%), H-1->L+3 (3%), HOMO->L+2 (6%)
BCP-Pt	21988	449.03	0.4899	<b>HOMO-&gt;LUMO (12%)</b> , HOMO->L+1 (76%) H-7->LUMO (4%), H-1->LUMO (3%), H-1->L+1 (2%)
<b>Group2</b>				
BCPT-Fe	630	684.42	0.0131	H-2->LUMO (15%), H-2->L+5 (25%), H-1->L+4 (30%), <b>HOMO-&gt;LUMO (10%)</b> , HOMO->L+5 (13%) H-2->L+7 (3%)
BCPT-Co	52	1318	0.0008	H-7->L+1 (27%), H-3->L+1 (18%) H-2->L+1 (14%), HOMO->L+1



				(19%) H-13->L+1 (4%), H-10->L+1 (7%), H-4->L+1 (6%)
BCPT-Ru	12040	442.3	0.1729	H-2->LUMO (16%), H-1->LUMO (32%), <b>HOMO-&gt;LUMO (35%)</b> , H-4->LUMO (3%), H-2->L+4 (3%), H-1->L+4 (4%)
BCPT-Pt	5340	821.48	0.1123	H-3->LUMO (32%), H-2->LUMO (14%), <b>HOMO-&gt;LUMO (40%)</b> , H-6->LUMO (9%), H-1->LUMO (4%)
<b>Group3</b>				
BCPTM-Fe	648	683.87	0.0134	H-2->LUMO (15%), H-2->L+5 (26%), H-1->L+4 (30%), HOMO->L+5 (11%), H-2->L+7 (2%), <b>HOMO-&gt;LUMO (8%)</b>
BCPTM-Co	29788	684.46	0.5014	<b>HOMO-&gt;LUMO (95%)</b> , H-11->LUMO (2%)
BCPTM-Ru	13919	442.19	0.2358	H-2->LUMO (18%), H-1->LUMO (19%), <b>HOMO-&gt;LUMO (43%)</b> , H-4->LUMO (3%), H-4->L+4 (2%), H-2->L+4 (4%), H-1->L+5 (2%), HOMO->L+4 (2%)
BCPTM-Pt	5678	825.12	0.1185	H-5->LUMO (10%), H-4->LUMO (27%), H-2->LUMO (14%), <b>HOMO-&gt;LUMO (41%)</b> , H-3->LUMO (3%)

الشكل (3.3) يسلط الضوء على العديد من النتائج الهامة. الأول موضح في جميع الأشكال، وهو يوضح كثافة الامتصاص ( $\epsilon$ ) كدالة للأطوال الموجية. يوضح أن شدة الامتصاص زادت بشكل كبير مع زيادة قوة التذبذب. تختلف شدة الامتصاص ( $\epsilon$ ) للمجموعات (ThioMethyl و Thiol و Pyridyl) وفقاً لمجموعة الارتباط والمعدن المستخدم، حيث يكون لمعدن الكوبالت في المجموعة الثانية (thiol) أقل كثافة امتصاص (52a.u) ومعدن الكوبالت في المجموعة الثالثة ذات أعلى كثافة امتصاص (thiomethyl:29788 a.u). ليس هذا فقط، ولكن يمكننا أن نرى تغييراً حاداً في قمم الامتصاص، حيث يحدث أقصى امتصاص عند 684.46 نانومتر. بالمقارنة، كانت أقل كثافة امتصاص للجزيء ( $\epsilon$ ) عند 1318 نانومتر، مما يشير إلى انتقال سريع من المجال المرئي إلى مجال الأشعة تحت الحمراء. نتيجة لهذه النتائج، قد نفترض أن تغيير مجموعة الارتباط والتركيب المعدني لا يؤثر فقط على كثافة الامتصاص، بل يؤدي أيضاً إلى إزاحة فعالة عند الأطوال الموجية.

النتيجة الثانية المهمة معروضة في الشكل (3.3)، والذي يوضح قوة مذبذب الانبعاث ( $f_{em}$ ) كدالة للأطوال الموجية. ومن المثير للاهتمام، أن مجموعة المرساة Co-ThioMethyl تنتج أعلى قوة مذبذب أنبعاث (0.5014)، بينما يعطي Co-Thiol أدنى قيمة للانبعاث (0.0008). ترتيب شدة الامتصاص ( $\epsilon$ ) لثلاث مجموعات ( $\epsilon_{M1Fe} > \epsilon_{M3Fe} > \epsilon_{M2Fe}$ ) وترتيب قوة مذبذب الانبعاث ( $f_{em}$ ) هو ( $f_{em} M1Fe > f_{em} M3Fe > f_{em} M2Fe$ )، ترتيب قوة المذبذب ( $\epsilon_{M3Co} > \epsilon_{M1Co} > \epsilon_{M2Co}$ )، وترتيب قوة المذبذب هو ( $f_{em} M3Co > f_{em} M1Co > f_{em} M2Co$ )، وترتيب قوة مذبذب الانبعاث ( $f_{em}$ ) هو ( $f_{em} M3Ru > f_{em} M2Ru > f_{em} M1Ru$ )، وترتيب قوة المذبذب هو ( $\epsilon_{M1Pt} > \epsilon_{M3Pt} > \epsilon_{M2Pt}$ )، وترتيب قوة المذبذب هو ( $f_{em} M3Pt > f_{em} M2Pt > f_{em} M1Pt$ ) كما هو موضح في الجدول (4.2) توفر هذه النتائج تقنية نظرية محتملة لاختيار الهياكل والمواد المناسبة للاستخدام كوسيط ليزر نشط، وثنائيات ضوئية، وخلايا شمسية.

### 5-3 الاستنتاجات

لقد بحثنا في الخصائص الإلكترونية والبصرية لثلاث مجموعات مختلفة للجزيئات المعدنية العضوية باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية DFT ودالة Green. ركز البحث على خصائص نقل الجزيء الفردي إلى الأقطاب الكهربائية باستخدام مجموعة متنوعة من المعادن والموثبات، بما في ذلك اللبنات الأساسية للجزيئات، وهي مركبات فلزية عضوية مثل BiCyclobentedine متصلة بمجموعات الارتباط في نهايات الجزيئات.

قد تساعد نتائج هذا البحث في تطوير هذا النوع من البحث العلمي من خلال تقديم تنبؤات واستنتاجات معقولة وموثوقة ، والتي يمكن تلخيصها على النحو التالي:

\* في الختام ، النتائج التي تم عرضها في الفصل الثالث تعرض دراسة نظرية باستخدام طرق نظرية دالة الكثافة للتحقيق في الخواص الكهروضوئية للجزيئات المعدنية العضوية. لقد ثبت أن الهياكل المعدنية العضوية القائمة على جزيئات (BiCyclobentedine-metal- anchor groups) يمكن أن تكون أجهزة قوية لتطبيقات الإلكترونيات الضوئية ، خاصة بالنسبة للوسائط الليزرية الفعالة، حيث قدمت هذه التراكيب قيمة عالية لقوة مذبذب الانبعاث ( $f_{em}$ ).

\* فيما يتعلق بالحدثة، يمكن الاستنتاج من النتائج الواردة في الفصل الثالث، أن هذا العمل حدد أحدث ما توصلت إليه أجهزة التداخل الكمي للجزيء الفردي من خلال الجمع معاً لأول مرة، عمل رائد في مجال الأسلاك الجزيئية كأوساط ليزرية فعالة. بالإضافة إلى ذلك، يعرض استراتيجية جديدة للتحكم في التداخل الميكانيكي الكمومي وتعزيز الخصائص الإلكترونية والبصرية للأجهزة الجزيئية وتطبيقاتها.

## المصادر

- [1] Joseph , T. and Morrison M. ,”Nanotechnology in Agriculture and Food Institute of Nanotechnology “,(2006).
- [2] Zhang , W. ,”Nanotechnology for Water Purification and Waste Treatment ,(2005).
- [3] باشا ، أحمد ،”مستقبلات الفيزياء في عالم متغير “ ، دار الرشاد, (2010).
- [4] الاسكندراني ، محمد ، ” تكنولوجيا النانو من اجل غد أفضل “ ، عالم المعرفة ، الكويت(2010) .
- [5] حجازي، أحمد ،” تكنولوجيا النانو الثورة التكنولوجية الجديدة“ ، دار كنوز المعرفة للنشر والتوزيع ، الأردن, (2012).
- [6] عبد اهلل احمد عبد اهلل حسب اهلل, ”تأثير تطبيقات تقنية النانو على المواد المستخدمة في الواجهات الخارجية للمباني “, جامعة القاهرة ، كلية الهندسة، أطروحة ماجستير, (2015).
- [7] علا حربة ، ” العمارة في ظل تقنية النانو “, كلية العمارة , جامعة البعث، مجلة جامعة البعث ، المجلد39 ، العدد 18 ، (2017) .
- [8] فؤاد نمر الرفاعي ”مفاهيم أساسية في تقنية النانو“ , كلية العلوم ، جامعة ذي قار (2018).
- [9] العلي ، ليلي ، ” النقاانة النانوية في الطب النانوي “ ، مجلة القدم العلمي ، العدد (66) ، (2018).
- [10] Oday A. Al-Owaedi, David C. Milan, Marie-Christine Oerthel, Sören Bock, Dmitry S. Yufit, Judith A. K. Howard, Simon J. Higgins, Richard J. Nichols, Colin J. Lambert, Martin R. Bryce, Paul J. Low. Experimental and Computational Studies of the Single-Molecule Conductance of Ru(II) and Pt(II) trans-Bis(acetylide) Complexes. *Organometallics*, 2016, 35, p. 2944–2954.
- [11] Panu Sam-ang and Matthew G Reuter, “Characterizing destructive quantum interference in electron transport”, *New Journal of Physics*, Volume 19, (2017).
- [12] Guang-Ping Zhanga, Yan-Qi Mua, Jin-Ming Zhaoa, Hui Huangb, Gui-Chao Hua, Zong-Liang Lia, Chuan-Kui Wang, “Optimizing the conductance switching performance in photos witch able

- dimethyldihydropyrene/cyclophanediene single-molecule junctions”, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 109, Pages 1-5, May (2019).
- [13] Baraa A. A. Al-Mammory, Oday A. Al-Owaedi, Enas M. Al-Robayi, “Thermoelectric Properties of Oligoynes-Molecular Wires”, *Journal of Physics: Conference Series*, Volume 1818, (2021).
- [14] Rasool M. Al-Utayjawee, Oday A. Al-Owaedi, “Enhancement of Thermoelectric Properties of Porphyrinbased Molecular Junctions by Fano Resonances”, *Journal of Physics: Conference Series*, Volume 1818, (2022).
- [15] عباس إبراهيم، أيمن محمد، عدي أركان، " الخواص الكمية للمواد النانوية لمفارق الجزيئات العضوية المعدنية المستخدمة كأوساط ليزرية فعالة"، أطروحة دكتوراه، قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة بابل، (2022).
- [16] محمد الكوسا، " فيزياء الليزر وتطبيقاتها"، جامعة دمشق، (2005).
- [17] بيلا لينكل، ترجمة عبودي قيصر، " الليزرات"، جامعة الموصل، (1998).
- [18] حسام الدين عدنان عبد الامير، تولىف وتوصيف الجهاز البصري لتطبيقات البيئة ذات درجة الحرارة العالية باستخدام الاستئصال بالليزر، الجامعة التكنولوجية، قسم هندسة الليزر، (2021).
- [19] داليا عبد العال، ياسين زيدان، "تكنولوجيا الليزر وتطبيقاتها"، مجلة العمارة والعلوم، المقال 40 ، المجلد 5 ، العدد 24 ، نوفمبر 2020 ، الصفحة 679-699 .
- [20] Degriigny C., Tanguy,E., and Renelagall "Laser cleaning of tarnished silver and copper threads on Museum textiles" – *Journal of cultural Heritage* -2018- pp 1-5.
- [21] Marcus D Hanwell, Donald E Curtis, David C Lonie, Tim Vandermeersch, Eva Zurek & Geoffrey R Hutchison, “Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform”, *Journal of Cheminformatics* volume 4, Article number: 17 (2012).
- [22] E. Artacho, J. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordej, D. Sanchez-Portal and J. Soler, "SIESTA-trunk-462", *Fundación General Universidad Autónoma de Madrid*, (2013).