الخلاصة :

تلعب المركبات العضوية دورا كبيرا في حياتنا. في هذه الدراسة ، تم استخدام طريقة DFT مع دالية B3LYP ومجموعة الأساس 6-31G لغرض ترشيح متحسس نانوي لمركبين عضويين هما TNT و NQ في حزمة برامج Gaussian09 من خلال معرفة عاملين اساسيين لكل متحسس وهما: السالفة بين الجزيئة العضوية والمتحسس الكرافين ، وكذلك التغيير لفجوة الطاقة للمتحسس حيث يستعمر عندها الوسيلية لجهاز التحسس. كما قمنا بتطوير المتحسس الكرافيني عن طريق ذرات تعويضية وهي Al، Cu و Ge ، واظهرت النتائج تحسن في الاداء لوحظ من خلال التغير الحاصل في فجوة الطاقة ، حيث وجدنا أن فجوة الطاقة تتأثر بشدة بجميع الجزيئات العضوية ، وكان عنصر Al الافضل لمتحسس TNT و NQ. وتم كذلك حساب بعض الصفات الإلكترونية مثل توزيع HOMO و LUMO ، طاقة الالسالفة ، الطاقة الكلية ، كثافة الحالات ، طيف الأشعة تحت الحمراء وكذلك التحسين الهندسي للجزيئات العضوية والمتحسس. ثم استخدمنا نظرية دالية الكثافة (DFT) و نظرية دالية الكثافة المعتمدة على الزمن (TD-DFT) مع دالية B3LYP ومجموعة الاساس 6-31G لتحسين بعض الصبغات العضوية التي تستخدم في الخلايا الشمسية المتحسسة للضوء عن طريق دراسة طيف الاشعة فوق البنفسجية UV-Vis وسعرفة مستويات الطاقة الانتقالية للالكترون ومدى طيف الامتصاص. وقمنا بتطوير هذه السطات عن طريق اضافات طرفية لجزيئات عضوية حيث زادت الامتصاصية وقلت طاقة الانتقال في DSSC التي تستخدم TiO_2 كجامع للشحنات. وتم دراسة بعض الصفات الإلكترونية مثل توزيع HOMO و LUMO وفجوة الطاقة وشدة التذبذب والتحسين الهندسي لهذه الصبغات العضوية.