

الخلاصة :

تقنية النانو أصبحت تقنية شائعة جدا في أجهزة الاستشعار في الآونة الأخيرة. حيث يعتقد ان استعمال هذه التقنيات , بالإضافة الى استخدام المواد النانوية يمكن ان يكون له تأثير مفيد في اداء أجهزة الاستشعار. فمن الواضح ان المواد عند الاحجام النانوية تصبح لديها عدد من الخواص الكيميائية والفيزيائية الجديدة والمثيرة للاعجاب. وعليه فان الانظمة والمواد ذات الحجم النانوي شغلت منطقة بحث جديدة في فيزياء المواد في غضون العقود الماضية. جزء من هذه الفئات المذكورة من المواد , تكون اساسا لتصنيع انواع مختلفة من أجهزة الاستشعار النانوية.

يعرف الكربون كعنصر فريد ومذهل بسبب تطبيقاته الرائعة في كثير من المجالات وهو ايضا يمكن العثور عليه بشكل كثيرة بما في ذلك الماس, الفلورين , الكرافيت , الكرافين.

في هذه الرسالة, تم استخدام نظرية دالة الكثافة (DFT) مع الدالة الهجينة (B3LYP) وبمجموعة الأساس (3-21G) وحزمة برامج الكاوسيان (Gaussian 09) لدراسة اثنين من المستشعرات النانوية المرشحة كاجهزة استشعار للاحماض النووية. ان الاحماض النووية بشكل عام هي مركبات ضرورية لجميع أشكال الحياة المعروفة, مصطلح الحمض النووي هو الاسم العام لكل من (DNA) الحمض النووي الريبوزي (RNA) والوكسين , والعنصر الاساسي في هذه النيكيوتيدات هو القواعد النيتروجينية , ومن المعلوم ان هناك خمسة قواعد نيتروجينية وهي :- الادنين ($C_5H_5N_5$) والسايوسين ($C_4H_5N_3O$) والجوانين ($C_5H_5N_5O$) والثيمين ($C_5H_6N_2O_2$) واليوراسيل ($C_4H_4N_2O_2$).

المتحسس الاول هو شريط الكرافين النانوي (GNRs) , حيث تم اخذه بثلاثة احجام سمينها :- صغير (small) ونرمز له بالرمز (SGNR), وسط (middle) ونرمز له بالرمز (MGNR), كبير (large) ونرمز له بالرمز (LGNR) وكذلك تم تشويب كل شريط من الاشرطة الثلاثة بذرة نايتروجين (N) مرة واحدة (O) مرة اخرى بدلا من ذرة الكربون في الشريط الاصلي , من اجل دراسة قابلية التحسس قبل وبعد التشويب والنتيجة كانت ان فجوة الطاقة قد قلت بعد التشويب وخاصة عند التشويب بذرة الاوكسين. التحسس الثاني هو انبوبة الكربون النانوية (CNT) بثلاثة اطوال هي (8,12,16) انكستوم . اثبتت هذه الدراسة ان (CNT) بطول $12 \text{ \AA}$ هي افضل من الاطوال الاخرى من حيث قابلية التحسس ولكل الجزيئات المدروسة. تركز الدراسة على قابلية التحسس لشريط الكرافين النانوي () وانبوبة الكربون النانوية () للقواعد النيتروجينية في شريطي ال (DNA and RNA) والتي تعتمد على التغير في فجوة الطاقة () بعد عملية الاقتران.