

Title	INNOVATIVE MODELING OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF STRAINED GRAPHENE FOR SENSING APPLICATIONS
Supervisor	Dr. SAFIA ALHARBI
Students	AISHA ALANZY/ JUMANAH ALMUTLAQ/ REEM ALHARBI
Abstract	This project investigates the structural and electronic properties of strained graphene using Density Functional Theory (DFT) through the Quantum ESPRESSO computational simulation package. The study aims to explore the influence of mechanical strain on the physical and electronic behavior of graphene and evaluate its potential for advanced sensing applications. Graphene is considered one of the most promising two-dimensional nanomaterials due to its exceptional characteristics, including outstanding electrical conductivity, remarkable mechanical flexibility, and high chemical stability, which make it highly suitable for nanoelectronics and modern sensing technologies. The research methodology involved applying both uniaxial and biaxial strain with varying percentages ($\pm 10\%$) to analyze their effects on the crystal structure, lattice constant, and atomic bond length. In addition, the electronic properties of graphene were examined through detailed analysis of the electronic band structure and Density of States (DOS). The obtained results demonstrated that strain engineering significantly modifies the electronic behavior of graphene, enabling tunable electronic properties and enhanced sensitivity toward external interactions. Furthermore, the findings indicate that controlling the applied strain can substantially improve the performance of graphene in chemical sensing, biosensing, and flexible electronic applications. This highlights the potential of strained graphene for the development of highly sensitive and efficient sensing devices. The significance of this project lies in its contribution to contemporary research on two-dimensional materials and its role in advancing innovative solutions in nanotechnology and future electronic systems.
المخلص باللغة العربية	يتناول هذا المشروع دراسة الخصائص التركيبية والإلكترونية للجرافين المُجهَد باستخدام نظرية دالة الكثافة (Density Functional Theory - DFT) من خلال حزمة المحاكاة الحاسوبية Quantum ESPRESSO ، بهدف استكشاف تأثير الإجهاد الميكانيكي على السلوك الإلكتروني والفيزيائي للجرافين وإمكانية توظيفه في تطبيقات الاستشعار المتقدمة. ويُعد الجرافين من أبرز المواد النانوية ثنائية الأبعاد نظرًا لما يمتلكه من خصائص استثنائية تشمل التوصيلية الكهربائية العالية، و المرونة الميكانيكية، والاستقرار الكيميائي، مما يجعله مادة واعدة في مجالات الإلكترونيات النانوية وتقنيات الاستشعار الحديثة. اعتمدت الدراسة على تطبيق إجهاد أحادي وثنائي المحور بنسب مختلفة ($\pm 10\%$) لتحليل تأثيره على البنية البلورية وثابت

	الشبكة وطول الروابط الذرية، بالإضافة إلى دراسة التركيب الإلكتروني من خلال تحليل تركيب الحزم الإلكترونية (Band Structure) وكثافة الحالات الإلكترونية (Density of States - DOS). وقد أظهرت النتائج أن هندسة الإجهاد تؤدي إلى تغييرات ملحوظة في الخصائص الإلكترونية للجرافين، بما في ذلك تعديل السلوك الإلكتروني وتحسين الاستجابة تجاه المؤثرات الخارجية، الأمر الذي يفتح المجال للتحكم في خصائص المادة بما يتناسب مع متطلبات التطبيقات التقنية المختلفة. كما بينت النتائج أن التحكم في الإجهاد المطبق يسهم في تحسين كفاءة الجرافين في تطبيقات الاستشعار الكيميائي والحيوي والإلكترونيات المرنة، مما يعزز من إمكانية استخدامه في تطوير أجهزة استشعار عالية الحساسية وكفاءة الأداء. وتبرز أهمية هذا المشروع في دعمه للتوجهات البحثية الحديثة المرتبطة بالمواد ثنائية الأبعاد، والمساهمة في تطوير حلول مبتكرة في مجالات النانو تكنولوجي والإلكترونيات المستقبلية.
--	--