



نانوحسگرهای زیستی مولکولی پایه گرافین برای تشخیص مولفه‌های مولکول DNA

محمد اجمل خیشکی، محمد قاسم نژند، فرح مرصوصی*

گروه فیزیک، دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

چکیده: در این پژوهش، ویژگی‌های زیست حسگری گرافین‌های مولکولی از جمله کرونین، سیرکوم-کرونین و سیرکوم سیرکوم-کرونین از نظر اندازه، ساختار مولکولی و ویژگی‌های شیمیایی مورد بررسی قرار گرفته‌است. شبیه‌سازی‌ها با نرم افزار گوسین به روش نظریه‌ی تابعی چگالی تحت تابعی و توابع پایه‌ی B3LYP/6-31G(d,p) انجام شده‌است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که از ساختارهای مورد بررسی، دو ساختارهای کرونین و سیرکوم-کرونین به لحاظ ویژگی‌های فیزیکی همچون انرژی بستگی، و ویژگی‌های شیمیایی همچون سختی شیمیایی بالا، برای توالی یابی مولکول زیستی DNA پیشنهاد می‌شود و می‌توان از این ساختارها حسگرهایی ساخت که قابلیت تشخیص هر چهار نوکلئوبازهای مولکول DNA را داشته‌باشند.

واژگان کلیدی: حسگرهای زیستی، کرونین، نوکلئوبازهای مولکول DNA، نظریه تابعی چگالی، انرژی بستگی.

marsusi@aut.ac.ir

پژوهش‌های پزشکی در زمینه مطالعات سرطان، تشخیص ژنتیکی، میکروبی و زیست فناوری از توالی‌سنجی مولکول DNA بهره می‌برند [۵-۸]. با استفاده از فناوری نانو، عصر جدیدی از توسعه حسگرها برای آنالیز مواد در مقیاس نانو که در گذشته غیرممکن بود، آغاز شده‌است [۹-۱۴]. حسگرهای زیستی براساس برهمکنش ویژگی‌های فیزیکی یا شیمیایی و سپس تجزیه و تحلیل مشخصه‌های زیستی سبب آشکارسازی نمونه‌ها می‌شوند [۱۵-۱۶]. این حسگرهای زیستی، براساس فرآیند برهمکنش و تکنیک آشکارسازی به چند گروه تقسیم می‌شوند که شامل حسگرهای زیستی: تشدید پلاسمونی، نوری، گرمایی، ترانزیستور اثر میدانی^۲ و الکتروشیمیایی هستند [۱۷-۱۸]. نانومواد به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد شیمیایی و فیزیکی، گزینه‌های اقتصادی برای حسگرهای زیستی هستند.

۱- مقدمه

تلاش برای کشف ویژگی‌های گوناگون حسگرهای زیستی یکی از مهم‌ترین بخش‌های توسعه پژوهش‌ها در زمینه‌های گوناگون و به ویژه در زمینه علوم زیست مولکولی است. با شروع پروژه ژنوم انسانی^۱ که انقلابی عملی در تحقیقات پایه‌ای-کاربردی علوم پزشکی و علوم پایه به حساب می‌آید، تلاش برای استخراج نقشه ژنتیکی، سبب شناسایی تعداد زیادی ژن و باز نوکلئوتید مولکول DNA شده‌است [۱]. مهم‌ترین روش استخراج نقشه ژنتیکی، توالی‌سنجی رشته‌های مولکول DNA است [۲-۳]. توالی‌سنجی مولکول DNA، فرآیندی است که در آن ترتیب بازهای نوکلئوتیدی تشکیل دهنده هر رشته مشخص از مولکول DNA از طریق آشکارسازی ویژگی‌های فیزیکی، الکتریکی، نوری و مغناطیسی این بازها تعیین می‌شود [۴]. محدوده‌ی گسترده‌ای از

² Field effect transistor (FET)

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۵/۲۰

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۱/۱۴

¹ Human Genomic Project (HGP)

های دیگری از ساختارها همچون سختی شیمیایی، الکترون خواهی^۹ و انرژی یونش^{۱۰} یا یونیزاسیون مورد بررسی قرار گرفته- است. با بررسی و مقایسه‌ی ویژگی‌های الکترونی گرافین‌های مولکولی مدل شده، در نهایت دو ساختار محدودشده کرونین و سیرکوم کرونین (یعنی کرونین احاطه شده) برای پژوهش خود انتخاب کردیم [۲۱-۲۲].

برای محاسبات شبیه‌سازی‌های لازم از نظریه تابعی چگالی^{۱۱} استفاده شده‌است. شبیه‌سازی‌های لازم با بسته‌ی نرم افزاری گوسین نسخه (۹۸) تحت سیستم عامل لینوکس انجام گرفته و جهت تنظیم گرافیکی فایل‌های ورودی و خروجی از نرم افزار گوس ویو^{۱۲} نسخه‌ی (۰۵) استفاده شده است. در این پژوهش، برای توصیف محاسباتی چگونگی برهمکنش اتم‌ها بایکدیگر، انتخاب ما تابعی هیبریدی^{۱۳} B3LYP^{۱۴} بوده، که شامل سه تابعی همبستگی بک، و تابعی‌های همبستگی لی، یانگ و پار است. تابعی هیبریدی مذکور به مطابقت بالا با نتایج تجربی مشهور است. در نهایت، برای مدل‌سازی عددی ابر الکترونی برای ساختارهای مورد نظر از توابع پایه‌ی 6-31G استفاده شده‌است [۲۳].

۳- نتایج

همانطور که اشاره کردیم، این پژوهش به حساسیت مولکول‌های پایه گرافینی می‌پردازد که ساختارهای مورد بررسی به ترتیب از اندازه‌ی کوچک به بزرگ سه مولکول کرونین، سیرکوم کرونین و سیرکوم-سیرکوم کرونین می‌باشند که به ترتیب دارای فرمول شیمیایی C₂₄H₁₂، C₅₄H₁₈ و C₉₆H₂₄ هستند. ساختار بهینه شده‌ی گرافین‌های مولکولی یاد شده در جدول ۱ آمده‌است:

در این مقاله، تمرکز ما روی حسگرهای زیستی-الکتروشیمیایی است. علت اهمیت حسگرهای زیستی الکتروشیمیایی به خاطر داشتن گزینش‌پذیری و حساسیت بالا، و همچنین سادگی و هزینه‌ی پایین آن‌ها است. اساس عملکرد این حسگرهای زیستی برهمکنش شیمیایی بین مولکول‌ها و یون مصرفی یا الکترون است که باعث تغییر در ویژگی‌های الکتریکی قابل اندازه‌گیری مانند جریان الکتریکی، پتانسیل و قدرت یونی درمحلول‌ها می‌شود [۱۹]. در دو دهه‌ی گذشته، نانومواد در تهیه و ساخت حسگرهای زیستی الکتروشیمیایی به طور قابل توجهی الگوی پیشرفت حسگرهای زیستی را تغییر داده‌اند.

پژوهشگران بطور معمول روی ویژگی‌های گرافین متمرکز می‌شوند ولی در این پژوهش مولکول‌های پایه گرافینی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در این پژوهش ویژگی‌های زیستی حسگری سه ساختار گرافین محدود شده‌ی مولکولی برای توالی یابی مولکول زیستی DNA مورد بررسی قرار گرفته‌است. گرافین‌های مولکولی نسبت به گرافین‌هایی با مساحت بزرگتر از نظر شیمیایی پایدارتر هستند چرا که براساس مدل ذره در جعبه هرچقدر اندازه‌ی قطعه‌ی گرافینی بزرگتر شود گاف انرژی آن کوچکتر و در نتیجه نرمی شیمیایی^۳ آن بیشتر می‌شود [۲۰].

۲- روش کار

برای بررسی و پژوهش روی این موضوع که ساختارهای گرافینی در چه حالتی قابلیت تشخیص مولکول‌های زیستی مورد نظر را دارند و در چه صورتی عملکرد آن‌ها بهتر می‌شود ما محاسبات خود را با مدل‌سازی و سپس بهینه‌سازی ساختارهای گرافین و نوکلئوبازهای^۴ مولکول DNA شروع کردیم. در این پژوهش، سه مولکول پایه گرافینی کرونین^۵، سیرکوم کرونین^۶ و سیرکوم-سیرکوم کرونین^۷ مورد بررسی قرار گرفته‌است. سپس، در این محاسبات انرژی بستگی^۸ بین گرافین‌های مولکولی و نوکلئوبازهای مختلف بدست می‌آید تا با مقایسه‌ی آن بهترین ساختار تمایزگر مشخص شود. افزون بر انرژی بستگی، ویژگی-

⁹ Electron affinity

¹⁰ Ionization Energy

¹¹ Density functional theory (DFT)

¹² GaussView

¹³ Hybrid functional

¹⁴ Becke, three-parameters, Lee-Yang-Parr

³ Chemical softness

⁴ Nucleobase

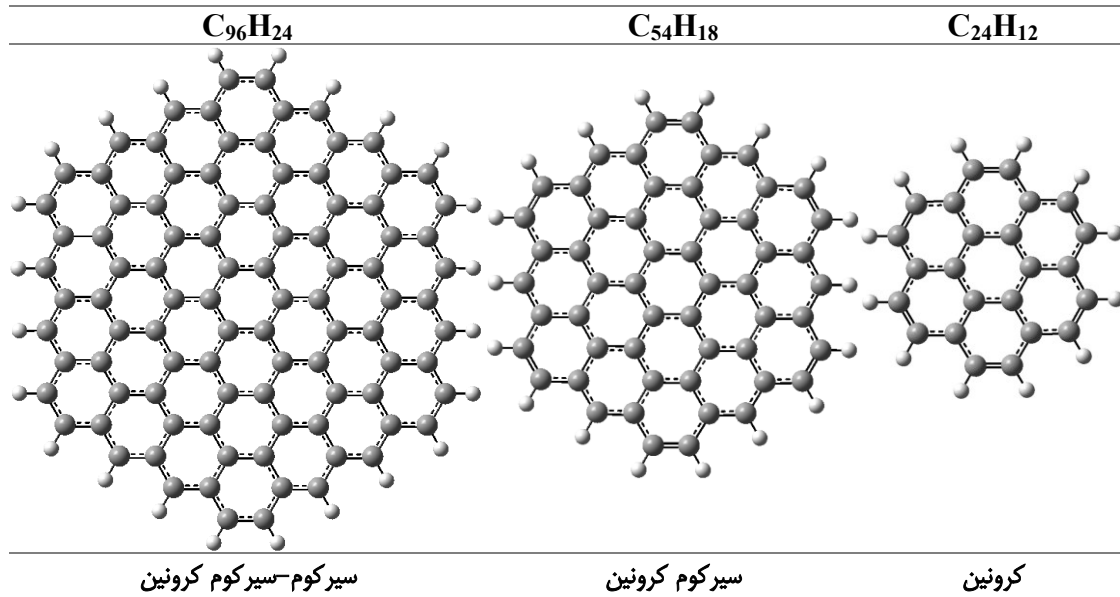
⁵ Coronene

⁶ Circumcoronene

⁷ Circumcircumcoronene

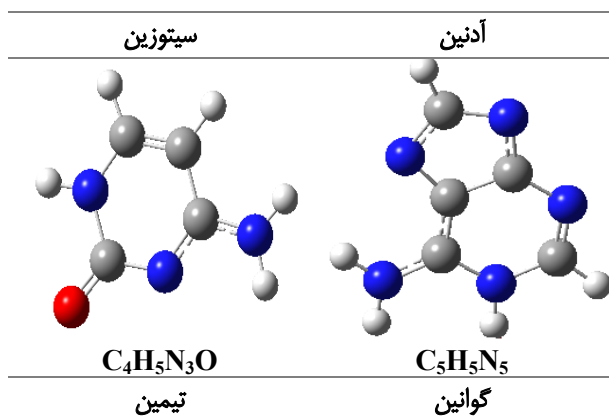
⁸ Binding Energy

جدول ۱. از چپ به راست به ترتیب ساختار مولکول‌های پایه گرافینی کرونین، سیرکوم کرونین و سیرکوم-سیرکوم کرونین.



DNA صورت می‌گیرد. مولکول DNA از چهار مولفه‌ی آدنین^{۱۷}، سیتوزین^{۱۸}، گوانین^{۱۹} و تیمین^{۲۰} تشکیل شده است. ساختارهای بهینه‌شده‌ی چهار مولفه‌ی نوکلئوبازهای مولکول DNA در جدول ۳ آمده است:

جدول ۳. ساختارهای نوکلئوبازهای DNA، شناسایی شده در جدول زیر قرار گرفته است.



سطح انرژی مربوط به ساختار بهینه‌ی سه مولکول مد نظر با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی محاسبه شده است که داده‌های ترازهای مهم انرژی در جدول ۲ آمده است. در جدول زیر، برای گرافین‌های مولکولی مورد بررسی، اطلاعاتی همچون HOMO^{۱۵} یعنی بالاترین اوربیتال اشغال شده و پایین‌ترین اوربیتال خالی یعنی LUMO^{۱۶} و در نهایت گاف بین این دو اوربیتال که بطور معمول با H-LGap بیان می‌شود آمده است:

جدول ۲. مقادیر ترازهای HOMO، LUMO، و گاف H-LGap، برحسب (eV) برای مولکول‌های پایه گرافینی.

گرافین‌های مولکولی	HOMO	LUMO	H-LGap
$C_{24}H_{12}$	-۵/۴۸۸	-۱/۴۰۶	۴/۰۸۲
$C_{54}H_{18}$	-۴/۹۶۳	-۲/۱۱۲	۲/۸۵۱
$C_{96}H_{24}$	-۴/۶۷۰	-۲/۵۳۹	۲/۱۳۱

حالا به این موضوع خواهیم پرداخت که کدامیک از مولکول‌های بالا قدرت تفکیک و در نتیجه تمیز بالاتری در مواجه شدن با اجزا تشکیل دهنده‌ی مولکول DNA از خود نشان می‌دهد. در این پژوهش قضاوت در مورد چگونگی مواجهه و تمیز اجزا مولکولی با بررسی تغییر جاذبه‌ی بین مولکولی یا به عبارت دیگر انرژی بستگی بین دو ساختار گرافین مولکولی و مولفه‌های مولکول

¹⁷ Adenine
¹⁸ Cytosine
¹⁹ Guanine
²⁰ Thymine

¹⁵ HOMO: Highest Occupied Molecular Orbital
¹⁶ LUMO: Lowest Unoccupied Molecular Orbital

کرد [۲۴]. با استفاده از رابطه‌ی زیر سختی شیمیایی (η) مولکول‌های مختلف را می‌توان به دست آورد:

$$\eta = \frac{E_{LUMO} - E_{HOMO}}{2} \quad (1)$$

از طرفی پایداری شیمیایی گرافین‌های مولکولی مورد بررسی را نیز با محاسبه‌ی انرژی یونیزاسیون مربوط به هریک از ساختارها می‌توان بدست آورد. با استفاده از رابطه‌ی زیر انرژی یونش (IP) مولکول را می‌توان با تقریب خوبی بدست آورد:

$$IP = -E_{HOMO} \quad (2)$$

با محاسبه‌ی الکترون خواهی هریک از گرافین‌های مولکولی مورد بررسی می‌توان تمایل ساختار آن‌ها به گرفتن الکترون را باهم مقایسه کرد. میزان الکترون‌خواهی (EA) یک ساختار را از رابطه‌ی زیر می‌توان تقریب زد [۲۵]:

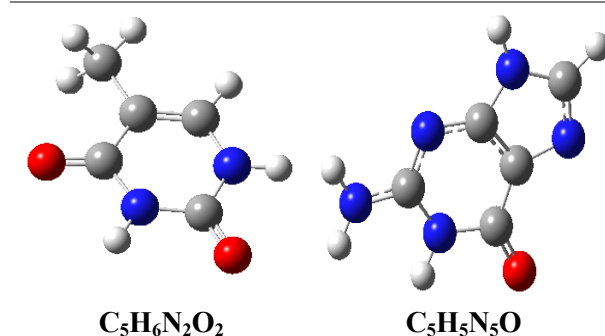
$$EA = -E_{LUMO} \quad (3)$$

نتایج مربوط به محاسبه‌ی سختی شیمیایی، انرژی یونش و الکترون خواهی مربوط به سه ساختار گرافین مولکولی مورد بررسی در جدول ۴ آمده‌است:

جدول ۴. سختی شیمیایی، انرژی یونش و الکترون خواهی برحسب (eV) برای مولکول‌های پایه گرافینی مورد مطالعه.

گرافین‌های مولکولی	η	IP	EA
C ₂₄ H ₁₂	۲,۰۴۱	۵,۴۸۸	۱,۴۰۶
C ₅₄ H ₁₈	۱,۴۲۵	۴,۹۶۳	۲,۱۱۲
C ₉₆ H ₂₄	۱,۰۶۶	۴,۶۷۰	۲,۵۳۹

با استفاده از نتایج جدول ۴، می‌توان متوجه شد که هرچقدر اندازه‌ی گرافین‌های مولکولی بزرگتر می‌شود سختی شیمیایی یا به عبارت دیگر پایداری شیمیایی آن‌ها کمتر می‌شود. پس در نتیجه مولکول کرونین پایدارترین ساختار در بین سه گرافین مولکولی مورد بررسی است.



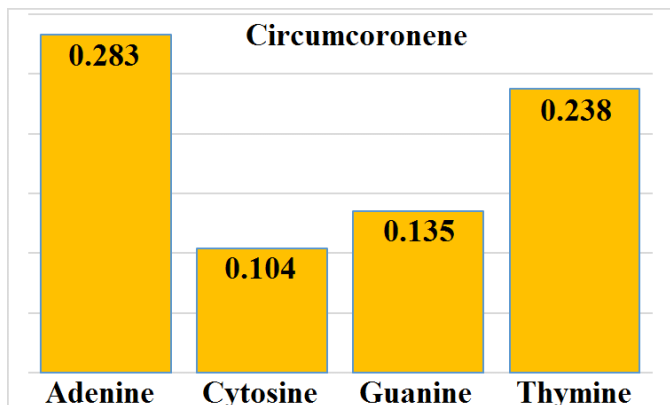
۳- تحلیل نتایج

نخست به توصیف ساختارهای جدول ۱ می‌پردازیم. کوچکترین ساختار مورد بررسی، کرونین با فرمول شیمیایی C₂₄H₁₂ است که طول پیوندهای C-C این ساختار در لبه‌ها ۱,۳۷۳ و در بین ساختار ۱,۴۲۲ آنگستروم است. ساختار دیگر که از کرونین قدری بزرگتر است سیرکوم کرونین با فرمول شیمیایی C₅₄H₁₈ است که طول پیوندهای C-C این ساختار ۱,۳۶۷ در لبه‌ها و در بین ساختار این طول ۱,۴۲۲ آنگستروم است. بزرگترین ساختار جدول ۱ با فرمول شیمیایی C₉₆H₂₄ سیرکوم-سیرکوم کرونین نامیده می‌شود که طول پیوندهای C-C این ساختار ۱,۳۶۲ در لبه‌ها و در بین ساختار این طول ۱,۴۲۲ آنگستروم است. همچنین، طول پیوندهای C-H برای سه ساختار مورد بررسی حدود ۱,۰۸۶ آنگستروم است. پس با مشاهده‌ی طول پیوند ساختارهای مدل شده می‌توان نتیجه گرفت که هراندازه تعداد اتم‌های لبه نسبت به اتم‌های مرکزی ساختار کمتر می‌شود طول پیوند اتم‌های کربن لبه نیز کوچکتر می‌شود.

نتیجه‌ی دیگری که می‌توان از داده‌های جدول ۱ بدست آورد، این مساله است که با وجود اینکه گرافین یک نیمه فلز^{۲۱} محسوب می‌شود یعنی دارای گاف انرژی صفر است اما گرافین‌های مولکولی دارای گاف انرژی است بطوریکه هرچقدر ابعاد مولکول کوچکتر می‌شود اندازه‌ی آن گاف هم بزرگتر می‌شود. وجود گاف انرژی برای یک ساختار باعث سختی شیمیایی آن می‌شود.

با بدست آوردن سختی شیمیایی هریک از گرافین‌های مولکولی، می‌توان پایداری شیمیایی سه ساختار فوق را با یکدیگر مقایسه

²¹ Semimetal



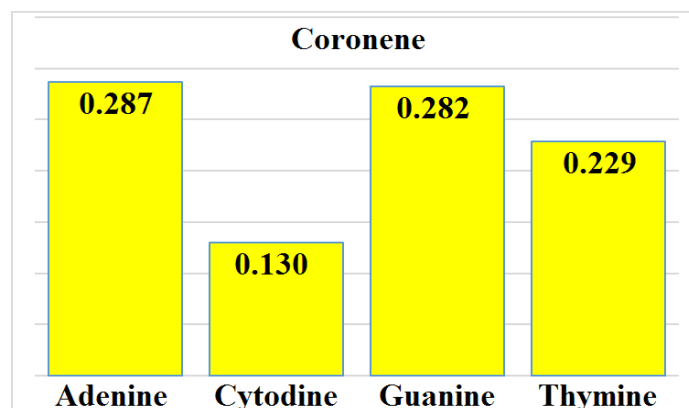
شکل ۲۰. مقایسه‌ی انرژی بستگی بین سیرکوم کرونین و چهار نکلئوبازهای مولکول DNA برحسب (eV).

پس اگر ابزارهای تشخیصی برپایه‌ی دو گرافین مولکولی کرونین و سیرکوم کرونین ساخته‌شوند قابلیت تشخیص هر چهار نکلئوبازهای DNA را خواهند داشت. شکل موقعیت بهینه‌ی نکلئوبازها نسبت به کرونین و سیرکوم کرونین^{۲۲} در جدول ۵، برای مطالعه و بررسی آمده است.

پس از اینکه مشخص شد کرونین پایدارترین مولکول شیمیایی و در نتیجه مناسبترین گرافین مولکولی برای استفاده در حسگرهای زیستی است حالا نوبت آن است که مشخص شود آیا کرونین می‌تواند بین نکلئوبازهای مولکول DNA تمایزی قائل شود. برای این کار انرژی بستگی بین کرونین و چهار نکلئوبازهای DNA را محاسبه می‌کنیم. رابطه‌ی زیر انرژی بستگی بین مولکول کرونین و هریک از نکلئوبازهای مورد نظر را مشخص می‌کند [۲۶-۲۸]:

$$BE = E_{total} - (E_{Coronene} + E_{Nucleobase}) \quad (۴)$$

نتایج محاسبه‌ی انرژی بستگی بین کرونین و چهار نکلئوبازهای DNA در شکل ۱ بصورت نمودار ستونی آمده است:

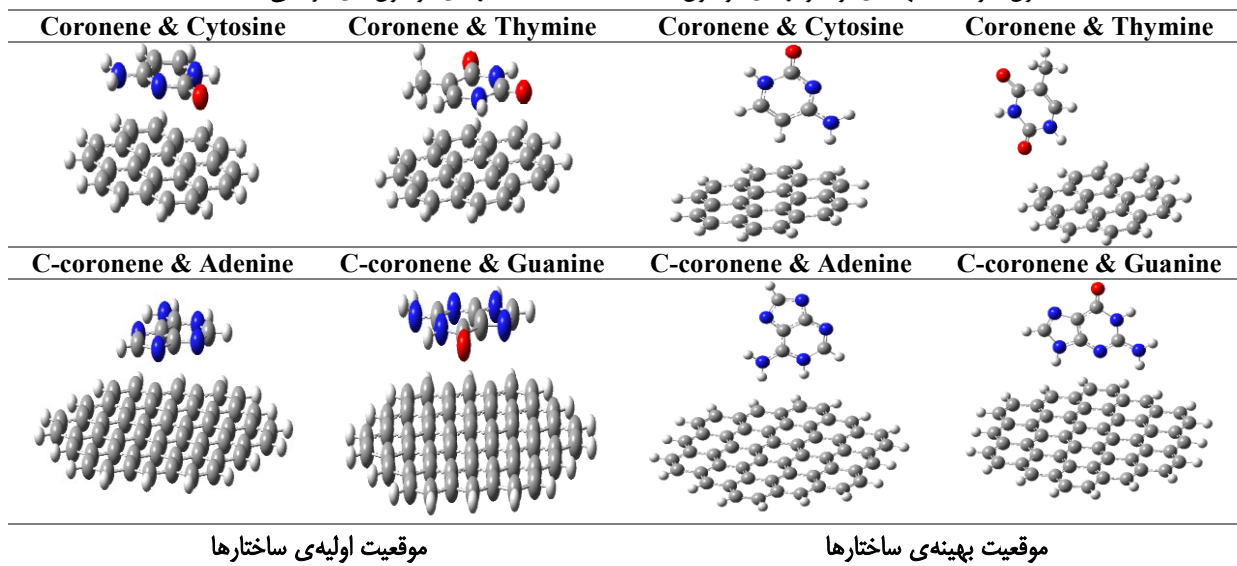


شکل ۱. مقایسه‌ی انرژی بستگی بین کرونین و چهار نکلئوبازهای مولکول DNA برحسب (eV).

با توجه به نتایج مربوط به انرژی بستگی بین کرونین و چهار نکلئوبازهای DNA، می‌توان نتیجه گرفت که کرونین تمایز قابل توجهی با انرژی بستگی بین آدنین و گوانین نمی‌گذارد. پس باید برای تشخیص این دو نکلئوباز، در کنار کرونین از ساختاری دیگر نیز کمک گرفته‌شود. برای این حل مساله سیرکوم کرونین پیشنهاد می‌شود چرا که این گرافین مولکولی خلا تشخیص کرونین را پوشش می‌دهد شکل ۲ این مساله را نمایان می‌کند:

²² Abbreviation: C-coronene

جدول ۵. وضعیت بهینه‌ی نوکلئوبازهای مولکول DNA، نسبت به ساختارهای مولکول‌های گرافینی متناسب.



ی وارد بر آن از جانب گرافین‌های مولکولی افزایش می‌یابد. همچنین اگر نوکلئوبازهای در فاصله‌ای بیشتر از مقدار بهینه داشته باشند برحسب افزایش نیروی جاذبه مواجه خواهند شد. از آنجایی که هر نوکلئوباز فاصله‌ی بهینه‌ی مربوط به خود را دارد برای همین در یک فاصله‌ی معین برهمکنش ترکیب کرونین-سیرکوم کرونین با مولفه‌های باز مولکول DNA متفاوت خواهد بود. در نتیجه از این ویژگی ترکیب یادشده‌ی گرافین‌های مولکولی می‌توان برای توالی یابی مولکول DNA استفاده کرد.

۴- نتیجه‌گیری

در این تحقیق ویژگی‌های گرافین‌های مولکولی جهت استفاده در حسگرهای توالی یاب مولفه‌های مولکول DNA، مورد بررسی قرار گرفته‌است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که ترکیب دو ساختار کرونین-سیرکوم کرونین افزون بر اینکه نسبت به گرافین پایداری شیمیایی بالاتری دارند؛ همچنین، از بابت امکان تشخیص و تمیز به علت تفاوت برهمکنش با هریک از نوکلئوبازها، بهترین ترکیب از بین گرافین‌های مولکولی به شمار می‌روند. گرافین‌های مولکولی در مقایسه با سایر مولکول‌هایی همچون الماس‌واره‌ها^{۳۳} که برای توالی یابی بکار می‌روند [۲۹]؛ با روش‌های کم هزینه‌تری تولید می‌شود، بنابراین گزینه‌ی مناسبی برای استفاده در حسگرهای توالی یاب زیستی برای مولفه‌های نوکلئوبازی مولکول DNA است.

همانطور که در شکل بالا مشاهده می‌شود، میدان‌های الکتریکی ابرالکترونی گرافین‌های مولکولی باعث دور شدن نوکلئوبازها از کرونین و سیرکوم کرونین شده‌است. با مقایسه‌ی فاصله‌ی اولیه و بهینه‌ی نوکلئوبازها از گرافین‌های مولکولی، می‌توان محدوده‌ی جاذبه و دافعه‌ی گرافین‌های مولکولی را برای مولفه‌های مولکول DNA مشخص کرد. در جدول زیر فاصله‌ی اولیه و بهینه‌ی نوکلئوبازهای مورد بررسی نسبت به کرونین و سیرکوم کرونین به همراه انرژی بستگی متناظر آمده‌است.

جدول ۶. فاصله‌ی اولیه و بهینه‌ی نوکلئوبازها از گرافین‌های مولکولی کرونین و سیرکوم کرونین برحسب آنگستروم، به همراه انرژی بستگی بین آن‌ها برحسب الکترون ولت در جدول زیر آمده‌است.

ساختارها	طول فاصله میان ساختارها (Å)		انرژی بستگی (eV)
	موقعیت اولیه	موقعیت بهینه	
Coronene & Cytosine	۳،۰۴۵	۳،۶۲۰	۰،۱۳۰
Coronene & Thymine	۳،۰۷۹	۳،۴۱۵	۰،۲۲۹
C-coronene & Adenine	۳،۱۰۵	۳،۴۶۷	۰،۲۸۳
C-coronene & Guanine	۳،۱۰۲	۳،۶۳۲	۰،۱۳۵

فاصله‌ای که در جدول بالا برای موقعیت بهینه آمده‌است نشانگر این مفهوم است که در این فاصله کمترین نیرو از جانب گرافین-های مولکولی بر نوکلئوبازهای مورد بررسی وارد می‌شود بطوریکه اگر فاصله‌ی نوکلئوبازها از فاصله‌ی بهینه کمتر باشد نیروی دافعه-

²³ Diamondoids

تشکر و قدردانی

بر خود لازم می‌دانیم، از آزمایشگاه شبیه‌سازی نانو پژوهشسرای رازی ری بخاطر در اختیار گذاشتن سیستم‌های محاسباتی، برای شبیه‌سازی‌های اولیه تشکر نماییم. همچنین، از کمک‌های بی‌دریغ خانم شیعه‌زاده دبیر توانمند فیزیک برای ویرایش گزارش این پژوهش صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مراجع

- [1] M. L. Metzker, "Emerging technologies in DNA sequencing," *Genome research*, 15, 1767-1776, 2005.
- [2] K. K. Murray, "DNA sequencing by mass spectrometry," *Journal of Mass Spectrometry*, 31, 1203-1215, 1996.
- [3] L. Sastre, "New DNA sequencing technologies open a promising era for cancer research and treatment," *Clinical and Translational Oncology*, 13, 301-306, 2011.
- [4] M. Xu, D. Fujita, N. Hanagata, "Perspectives and challenges of emerging single-molecule DNA sequencing technologies," *Small*, 5, 2638-2649, 2009.
- [5] M. Morey, A. Fernandez-Marmiesse, D. Castineiras, J. M. Fraga, M. L. Couce, J. A. Cocho, "A glimpse into past, present, and future DNA sequencing," *Molecular genetics and metabolism*, 110, 3-24, 2013.
- [6] K. Neveling, R.W. Collin, C. Gilissen, R.A. van Huet, L. Visser, M.P. Kwint, S.J. Gijzen, M.N. Zonneveld, N. Wieskamp, J. de Ligt, A.M. Siemiatkowska, "Next-generation genetic testing for retinitis pigmentosa," *Human mutation*, 33, 963-972, 2012.
- [7] D. Pushkarev, N. F. Neff, S. R. Quake, "Single-molecule sequencing of an individual human genome," *Nature biotechnology*, 27, 847-852, 2009.
- [8] P. Kapranov, L. Chen, D. Dederich, B. Dong, J. He, K.E. Steinmann, A.R. Moore, J.F. Thompson, P.M. Milos, W. Xiao, "Native molecular state of adeno-associated viral vectors revealed by single-molecule sequencing," *Human gene therapy*, 23, 46-55, 2011.
- [9] F. Marsusi, M. Qasemnazhand, "Opto-Electronic Properties of Novel Structures: Sila-Fulleranes," 18th International Conference on

Materials and Structural Integrity; Vancouver, Canada, 2016.

[10] K.S. Novoselov, V.I. Fal, L. Colombo, P.R. Gellert, M.G. Schwab, K. Kim, "A roadmap for graphene," *nature*, 490, 192-200, 2012.

[11] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, and F. Marsusi, "Photoluminescence in a Glucose-coated Sila-fullerane and Its Nanomedicine Applications," 2021.

[12] Y.H. Yun, E. Eteshola, A. Bhattacharya, Z. Dong, J.S. Shim, L. Conforti, D. Kim, M.J. Schulz, C.H. Ahn, N. Watts, "Tiny medicine: nanomaterial-based biosensors," *Sensors*, 9, 9275-9299, 2009.

[13] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, "Theoretical study of structural and electronic properties of sila-dodecahedrane as an optical-chemical sensor by density functional theory method," *Nanoscale*, 8, 4, 32-41, 2021.

[14] A. Srivastava, I. Kumar, S. Anusiewicz, W. Velickovic, and N. Misra. "Atomic clusters: theory & experiments," *Frontiers in Chemistry*, 9, 2021.

[15] M. N. Velasco-Garcia, "Optical biosensors for probing at the cellular level: a review of recent progress and future prospects," *Seminars in cell & developmental biology*, 20, 27-33, 2009.

[16] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, and F. Marsusi, "Optical response of sila-fulleranes in interaction with glycoproteins for environmental monitoring," *Frontiers in Physics*, 340, 2021.

[17] M. Sharifi, M., H. Pashaei Adl, H. Tajalli, and A. Bahrapour, "Design of surface plasmon resonance biosensor with one dimensional photonic crystal for detection of cancer," *Iranian Journal of Physics Research*, 16, 133-138, 2019.

[18] M. Qasemnazhand, F. Khoeini, and M. Badakhshan, "Investigation of electron transport properties in Fullerene and Fullerane nanocages," *Iranian Journal of Physics Research*, 21, 441-448, 2021.

[19] S. M. Monavari, F. Marsusi, N. Memarian, M. Qasemnazhand, "Biosensors based on carbon nanotubes and carbon nano-rings: A DFT study," *Research Square*, 2022.

[20] E. V. Basiuk, M. Martínez-Herrera, E. Álvarez-Zauco, L. V. Henao-Holguín, I. Puente-Lee, V. A. Basiuk, "Noncovalent functionalization of graphene with a Ni (II) tetraaza," *Dalton Transactions*, 43 7413-7428, 2014.

- [21] M. Qasemnazhand, F. Khomeini, and F. Marsusi, "Fullerene, fullerane and the fulleryne: A comparative thermodynamic study for a new member of the carbon cage family," *Results in Physics*, 106066, 2022.
- [22] P.V. Medeiros, G.K. Gueorguiev, S. Stafström, "Benzene coronene and circumcoronene adsorbed on gold, and a gold cluster adsorbed on graphene: Structural and electronic properties," *Physical Review B*, 85, 205423-205429, 2012.
- [23] M. Qasemnazhand, F. Marsusi, "Theoretical Study of Opto-Electronic properties of Silafulleranes Using Density Functional Theory," *journal of research on many body systems*, 7, 77-87, 2017.
- [24] M. Qasemnazhand, F. Khomeini, F. Marsusi, "Predicting the new carbon nanocages, fullerynes: a DFT study," *Scientific reports* 11, 1, 1-14, 2021.
- [25] M. Qasemnazhand, F. Khomeini, F. Marsusi, "Fulleryne, a new member of the carbon cages family," *arXiv preprint arXiv*, 2003, 09835, 2020.
- [26] F. Marsusi, M. Qasemnazhand, "Silafulleranes: promising chemically active fullerene analogs," *Nanotechnology*, 27, 275704-275714, 2016.
- [27] M. Qasemnazhand, F. Khomeini, S. Shekarforush, "Electronic transport properties in stability phase of cumulene/B7/cumulene molecular bridge by Density functional theory and tight binding method," *New Journal of Chemistry*, 43, 42, 16515-16523, 2019.
- [28] A. K. Srivastava, I. Anusiewicz, S. Velickovic, W. M. Sun, N. Misra. "Atomic Clusters: Theory & Experiments," *Frontiers in Chemistry*, 9, 2021.
- [29] G. Sivaraman, M. Fyta, "Chemically modified diamondoids as biosensors for DNA," *Nanoscale*, 6, 4225-4232, 2014.

Graphene based molecular bio-nanosensors to identify the components of DNA

Mohammad ajmal Khishkai, Mohammad Qasemnazhand, Farah Marsusi*

Department of Physics, Amirkabir university of technology, P.O. Box 15875-4413, Tehran, Iran

Abstract: Trying to discover the different characteristics of biosensor systems is the most important part of research development in various fields, especially in the field of biomolecular science. In this research, the biosensor properties of molecular graphene (Coronene, Circumcoronene and Circumcircumcoronene) have been investigated for their molecular size and chemical properties. Among the three mentioned structures, two of them (coronene and Circumcoronene) have been selected based on their properties for sequencing DNA molecules. Calculations were performed with the B3LYP hybrid function and 6-31G(d,p) basis set. After performing the necessary simulations and calculations, the results show that these graphene molecular structures can be used as biosensors.

Keywords: Biosensor, Coronene, DNA, Density Functional Theory, Binding Energy.