



طراحی یک نانوحسگر جدید برای تشخیص پوترسین و کاداورین در مواد پروتئینی در حال فساد بر پایه نقاط کوانتومی کربنی

مهدی یوسفیان*

گروه شیمی، دانشکده شیمی و مهندسی شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

چکیده: عدم تشخیص فساد مواد غذایی به‌ویژه فرآورده‌های گوشتی در بسیاری از موارد به مسمومیت‌های غذایی و موارد حاد حتی منجر به مرگ خواهد شد. از این رو، آگاهی از کیفیت مواد غذایی مورد مصرف و به‌طور ویژه تشخیص فساد فرآورده‌های گوشتی می‌تواند نقش بسزایی را در کاهش عوارض ناشی از مصرف فرآورده‌های گوشتی فاسد داشته باشد. گوشت زمانی که شروع به تجزیه ند، ترکیباتی شناخته شده به عنوان آمین‌های بیوژنیک مانند کادورین و پوترسین را تولید می‌کند. از این رو، در این پژوهش به طراحی یک نانوحسگر با دقت بالا بر پایه نقاط کوانتومی کربنی پرداخته شده است تا این مواد به عنوان نخستین علامت فساد گوشت، در کمترین غلظت ممکن و در سریعترین زمان شناسایی شوند. هنگامی که نقاط کوانتومی کربنی در معرض گاز مشخصی قرار می‌گیرد توانایی آن برای انتقال جریان الکتریکی دستخوش تغییرات می‌شود که از روی این تغییرات می‌توان نوع گاز را شناسایی کرد. هرچه واکنش بین گاز و سطح نقاط کوانتومی کربنی قوی تر باشد تغییرات در ساختار و همچنین باندهای انرژی جاذب بیشتر خواهد بود. انرژی جاذب پوترسین و کاداورین جذب شده بر روی نقاط کوانتومی کربنی نشانگر آن است به ترتیب برابر با $3/64$ - و $4/56$ - الکترون ولت است که نشان از یک جذب شیمیایی قوی می‌باشد. تغییرات باند گپ نقاط کوانتومی کربنی هنگامی که ملکول پوترسین جذب سطح می‌شود برابر $0/71$ الکترون ولت و برای جذب کاداورین برابر $0/59$ الکترون ولت است.

واژگان کلیدی: نقاط کوانتومی کربنی، مواد پروتئینی در حال فساد، حسگر، کاداورین، پوترسین.

*mahdi7462@gmail.com

میکرواورگانیسیم‌ها باشند. در طول ذبح کردن، پوست کردن و برش زدن، بیشتر میکرواورگانیسیم‌هایی از دستگاه گوارش و سطح خارجی حیوان به لاشه منتقل می‌شوند، اما تعداد بیشتری از طریق محیط اطراف و بطور کلی تجهیزات افزوده می‌شوند. انواع مختلفی میکرواورگانیسیم‌ها افزوده می‌شوند، و در شرایط معمولی انواع زیادی از میکرواورگانیسیم‌های عامل فساد حضور دارند و چنانچه شرایط موجو برای آنها مساعد باشد، رشد خواهند کرد. گوشت یک محیط کشت ایده‌آل برای بسیاری از میکرواورگانیسیم‌هاست چون رطوبت بالایی دارد، غنی از مواد نیتروژنی است و مواد معدنی و فاکتورهای کمکی رشد به فراوانی در آن وجود

۱- مقدمه

گوشت بهترین منبع پروتئینی برای انسان بوده ولی در عین حال سریع فاسد می‌شود و اگر فاسد و آلوده باشد و نظارت بهداشتی و دقت لازم بر آن صورت نگیرد می‌تواند انواع و اقسام بیماری‌ها را به انسان منتقل کند. بافت‌های حیوان سالم در مقابل عفونت به وسیله ترکیبی از موانع فیزیکی و فعالیت سیستم ایمنی بدن محافظت می‌شوند. در نتیجه اندام‌های داخلی و ماهیچه‌های یک لاشه تازه کشتار شده بایستی به نسبت عاری از

دارند. همچنین، معمولاً مقداری گلیکوژن دارد و شرایط مطلوبی برای بیشتر میکروارگانیسم‌ها را دارد. فرایند فساد فرآورده‌های گوشتی، اغلب با تولید ترکیبات نیتروژنی مانند آمین‌های فرار و دیگر ترکیبات شیمیایی مانند انواع اسیدها، الکل‌ها، استرها، کتون‌ها و آلدئیدها همراه است.

در این پژوهش، نقاط کوانتومی کربنی به عنوان حسگر بررسی شده است. این حسگر در برابر ترکیبات آزاد شده از گوشت فاسد یعنی برخی از آمین‌های بیوژنیک مانند پوترسین و کادورین واکنش نشان داده و هدایت الکتریکی آن تغییر می‌کند. کادورین یک ترکیب دیم ناپایدار تولید شده با فساد بافت حیوانی است و سمی است. پوترسین نیز یک ترکیب شیمیایی ارگانیک است که به مواد خوراکی مرتبط است و توسط تجزیه آمینو اسیدها در موجودات زنده و مرده تولید می‌شوند و در دوزهای بالا سمی هستند [۲۱]. این ترکیب عمدتاً همان بوی نامناسبی است که نشان از گوشت در حال فساد است. حسگر یک وسیله الکتریکی است که تغییرات فیزیکی یا شیمیایی را اندازه‌گیری و آن‌ها را به سیگنال‌های الکتریکی تبدیل می‌کند.

حسگرها در واقع ابزار ارتباط با دنیای خارج و کسب اطلاعات محیطی و نیز داخلی هستند، و یا به‌طور کلی ابزارهایی هستند که تحت شرایط خاص، از خود واکنش‌های پیش‌بینی شده و مورد انتظار نشان می‌دهند. با توجه به وجود آمدن وسایل الکترونیکی و تحولات عظیمی که در چند دهه اخیر و در خلال قرن بیستم به وقوع پیوسته است، امروزه نیاز به ساخت حسگرهای دقیق‌تر، کوچک‌تر و با قابلیت‌های بیشتر احساس می‌شود. حسگرهایی که امروزه مورد استفاده قرار می‌گیرند، دارای حساسیت بالایی هستند به طوری که به مقادیر ناچیزی از هر گاز، گرما یا تشعشع حساسند [۳-۵]. بالا بردن درجه حساسیت، بهره و دقت این حسگرها نیاز به کشف مواد و ابزارهای جدید دارد. با آغاز عصر نانوفناوری، حسگرها نیز تغییرات شگرفی داشته‌اند. یکی از نامزدهای ساخت حسگرها، نقاط کوانتومی کربنی هستند.

نانوحسگرها براساس نوع ساختارشان به سه دسته نقاط کوانتومی، نانولوله‌های کربنی و نانوازارها تقسیم بندی می‌شوند. نقطه-های کوانتومی ذرات نیمه هادی بسیار کوچک هستند که از لحاظ اندازه فقط چندین نانومتر هستند. این ذرات آن‌قدر کوچک هستند که خواص نوری و الکتریکی آن‌ها با ذرات بزرگتر خودشان

متفاوت است. این مواد موضوع اصلی در فناوری نانو هستند. در صورت استفاده از جریان الکتریسیته یا نور بسیاری از انواع نقاط کوانتومی فرکانس‌های خاصی را نشر می‌کنند و این فرکانس‌ها با تغییر اندازه نقاط، شکل و مواد، باعث ایجاد بسیاری از کاربردها می‌شوند [۸-۶].

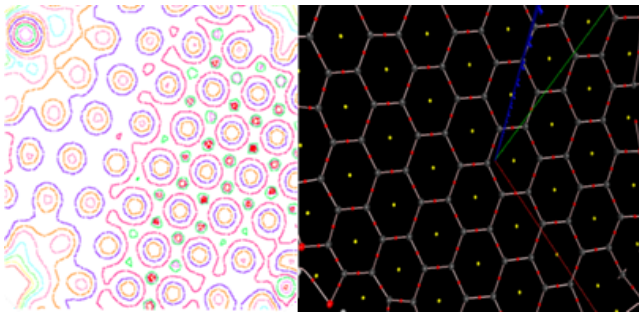
در زبان علم مواد، مواد نیم‌رسانا نانومقیاس به شدت الکترون‌ها یا حفره‌های الکترون را محدود می‌کنند. نقاط کوانتومی گاهی اوقات به‌عنوان اتم‌های مصنوعی نامیده می‌شود، یعنی همان‌طور که در مورد اتم‌ها یا مولکول‌های طبیعی رخ می‌دهد، نقطه کوانتومی تنها یک جسم با حالت‌های گسسته الکترونیکی است [۹].

۲- روش محاسبات

بهینه‌سازی ساختار مولکولی با روش نظریه تابعی چگالی DFT و در سطح نظری B3LYP/6-311+G(d,p) و توسط نرم افزار گوسین ۰۹ [۱۰] بدون هیچگونه ملاحظات تقارنی انجام شده است. در بخش نخست نقاط کوانتومی کربنی به عنوان مدل اصلی انتخاب گردیده که شامل ۱۱۴ اتم کربن و ۳۲ اتم هیدروژن و ۳۶ اتم اکسیژن است و قطر میانگین آن برابر ۲ نانومتر است. متوسط طول پیوند کربن-کربن حدود ۱/۴۲ آنگسترم است. در کاربری حسگرهای شیمیایی، نقاط کوانتومی کربنی با تشکیل کانال‌های هادی میان دو الکتروود فلزی، برای مکانیسم تشخیصی استفاده می‌شود.

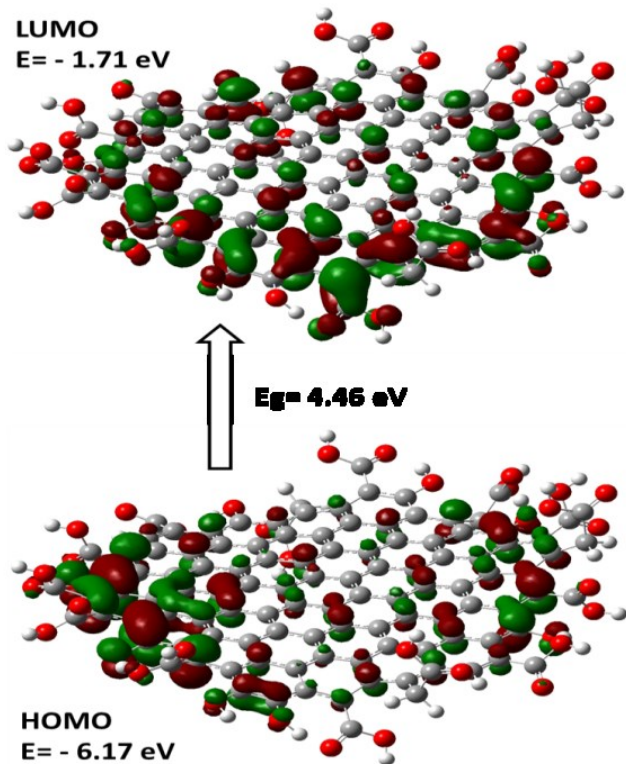
اساس این مکانیسم بر آن است که مولکول‌های دهنده و گیرنده الکترون با انتقال و یا جذب الکترون از نقاط کوانتومی کربنی، حاملین بار و یا حفره‌هایی ایجاد نموده و در نتیجه هدایت نقاط کوانتومی کربنی را تغییر می‌دهند. در بخش پسی ساختار ملکولی کادورین و پوترسین در همان سطح محاسباتی بهینه شدند. سپس به بررسی جذب این دو ترکیب بر سطح نقاط کوانتومی کربنی پرداخته شد.

پارامترهای توپولوژیکی (چگالی الکترونی و گرادیان چگالی الکترونی) از نظریه اتم‌ها در مولکول (AIM) با استفاده از نرم‌افزار AIM2000 به‌دست آمده است [۱۱]. محاسبات اوربیتال مولکولی (HOMO-LUMO) نیز به کمک نظریه تابعی چگالی DFT و در همان سطح محاسباتی فوق صورت گرفته است. در



شکل ۲: گراف مولکولی و نمودار کنتوری سیستم نقاط کوانتومی کربنی

نتایج نشان می‌دهد که پس از عامل‌دار کردن نقاط کوانتومی کربنی، خواص فیزیکی مکانی اطراف اتم تعبیه شده دستخوش تغییرات مهمی می‌شود که منتج به تغییر در فعالیت شیمیایی مکانی خواهد شد. اوربیتال‌های مولکولی جبهه‌ای در تفسیر پایداری و واکنش پذیری سیستم‌ها نقش بسیار مهمی دارند.



شکل ۳: نمودار سطح هم دانسیته برای اوربیتال‌های جبهه‌ای HOMO و LUMO محاسبه شده با روش LYP³DFT/B

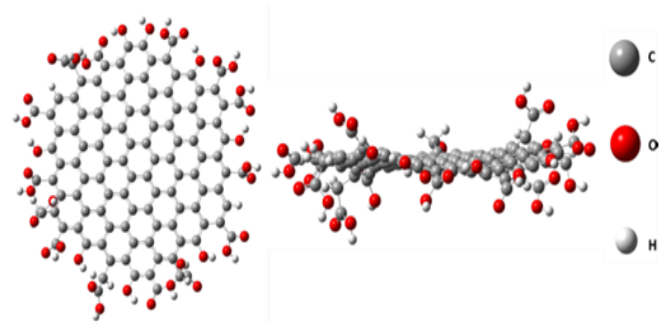
دیگرام انرژی‌های HOMO-LUMO نقاط کوانتومی کربنی در شکل ۳ نشان داده شده‌اند. رنگ‌های قرمز و سبز به ترتیب نشانگر فازهای مثبت و منفی هستند. همانگونه که در شکل مشخص است، تقریباً کلیه اوربیتال‌های جبهه‌ای در نواحی اطراف هترو اتم‌ها متمرکز هستند. این مطلب بیانگر آن است که این

نهایت محاسبات MPES و DOS نیز برای بررسی دقیق جذب و عملکرد حسگری نقاط کوانتومی کربنی انجام شد.

۳- نتایج و بحث

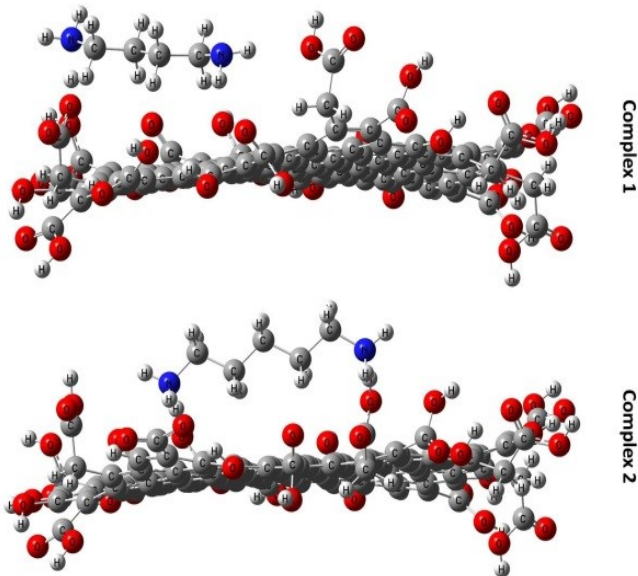
۳-۱- بررسی ساختاری و الکترونی نقاط کوانتومی کربنی

شکل ۱، ساختار بهینه شده نقاط کوانتومی کربنی را از دو نمای بالا و جانبی را نشان می‌دهد.



شکل ۱: ساختار بهینه شده نقاط کوانتومی کربنی از دو نمای بالایی و جانبی و نماد اتم‌های مربوطه

برای بررسی جزئیات بیشتر در خصوص ماهیت برهم‌کنش‌های درون مولکولی در سیستم نانو لوله تک دیواره تعبیه شده با اتم پالادیم از نظریه اتم‌ها در مولکول‌ها و برقراری رابطه میان مکانیک کوانتومی و مفهوم پیوند شیمیایی و قدرت پیوند از طریق محاسبه تابع توزیع چگالی الکترونی استفاده شده است. در این تئوری امکان استخراج طرح‌های توپولوژیکی چگالی الکترونی و تعریف پیوندهای شیمیایی از طریق مسیر پیوند و نقطه بحرانی پیوند فراهم می‌آید. در اینجا هر نقطه‌ای از فضا با یک چگالی بار، $\rho(\mathbf{r})$ ، گرادیان $\rho(\mathbf{r})$ ، تابع لاپلاسین $\nabla^2 \rho(\mathbf{r})$ و ماتریس مشتقات دوم (ماتریس هشین) مشخص می‌شود. اگر میان اتم‌ها پیوند شیمیایی برقرار باشد، آنگاه خط سیری به نام مسیر پیوند آن‌ها را مستقیم به یکدیگر متصل می‌سازد. نقطه‌ای با کمینه مقدار $\rho(\mathbf{r})$ در طول مسیر پیوند، نقطه بحرانی نامیده می‌شود و در نتیجه هر مسیر پیوندی شامل دو مسیر اتصال دهنده هسته‌ها به نقطه بحرانی هستند. شکل ۲ گراف مولکولی و نمودار کانتوری بدست آمده از محاسبات تئوری تابعی چگالی را برای سیستم مورد مطالعه نشان می‌دهد.



شکل ۵: ساختار کاملاً بهینه شده کمپلکس ۱: هیبرید نقاط کوانتومی کربنی و ملکول پوترسین و کمپلکس ۲: هیبرید نقاط کوانتومی کربنی و ملکول کاداورین

مقادیر انرژی جذب بر اساس معادله زیر بدست می‌آیند:

$$E_{ads} = E_{tot} \left(\frac{M}{GQD} \right) - \{ E_{tot}(M) + E_{tot}(GQD) \} \quad (1)$$

در این رابطه $E_{tot} \left(\frac{M}{GQD} \right)$ انرژی کل سیستم پوترسین یا کاداورین جذب شده بر روی نقاط کوانتومی کربنی، $E_{tot}(M)$ انرژی کل پوترسین یا کاداورین و $E_{tot}(GQD)$ انرژی کل نقاط کوانتومی کربنی است.

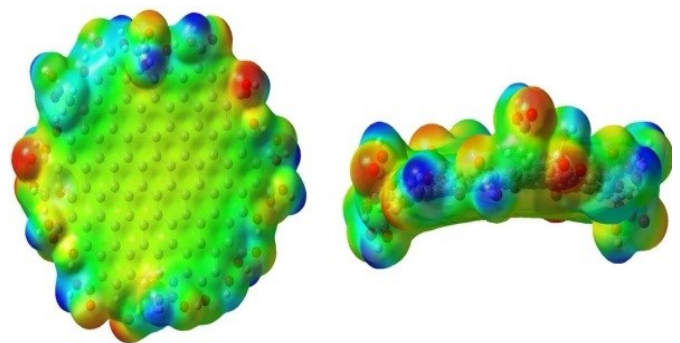
جدول ۱: مقادیر انرژی کل، ممان دوقطبی و انرژی جذب سیستم‌های بررسی شده با روش DFT/B3LYP6-311+G(d,p)

سیستم	انرژی کل	ممان دوقطبی	انرژی جذب
کوانتوم دات	-۰۲۸/۶۹۹۲	۶۲/۲	-
پوترسین	-۸۵۲/۲۶۵	۰۰/۰	-
کاداورین	-۶۷۱/۳۰۴	۵۵/۲	-
کمپلکس ۱	-۰۱۴/۷۲۵۸	۷۰/۳	-۶۴/۳
کمپلکس ۲	-۸۶۷/۷۲۹۶	۳۲/۱۰	-۵۶/۴

مقادیر انرژی جذب که بیشتر از مقادیر تعریف شده برای جذب فیزیکی هستند، قطعاً نشانگر جذب قوی شیمیایی هستند. بر اساس مقادیر انرژی جذب، جذب هر دو ملکول پوترسین و کاداورین بر سطح نقاط کوانتومی کربنی با انرژی بسیار بالایی

نواحی در واکنش‌پذیری این بخش از سیستم به عنوان مکان فعال عمل می‌کند. توزیع یکنواخت و کاملاً متقارن اوربیتال‌های جبهه‌ای در سایر قسمت‌های نقاط کوانتومی کربنی قابل مشاهده است.

بررسی نمودارهای MPE اطلاعات مفیدی در خصوص واکنش‌پذیری سیستم‌های مولکولی ارائه می‌کند. نمودارهای توزیع پتانسیل الکترواستاتیکی برای ساختارهای بهینه شده با استفاده از روش DFT/B3LYP/6-311+G(d,p) رسم شده اند. در نمودارهای MPE نقاط کوانتومی کربنی (شکل ۴) قسمت‌هایی که به رنگ قرمز هستند، نواحی الکترون‌گاتیو (نوکلئوفیلی) و قسمت‌هایی که به رنگ آبی نشان داده شده اند، نشانگر مناطق مثبت (الکتروفیل) هستند. قسمت‌های سبز و زرد نقاط کوانتومی کربنی مناطق با بار منفی کمتر هستند.



شکل ۴: پتانسیل الکترونی سطح برای سیستم نقاط کوانتومی کربنی از دو نمای فوقانی و جانبی

۲-۳- بررسی جذب پوترسین و کاداورین توسط نقاط کوانتومی کربنی

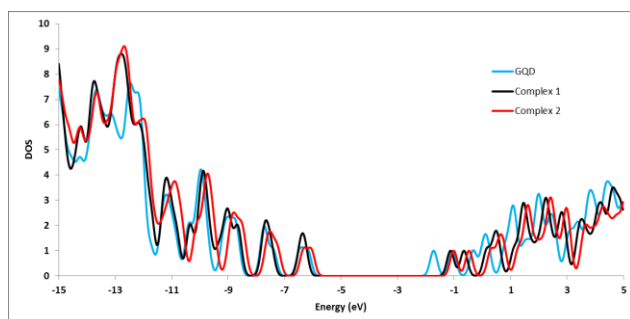
برای یافتن ساختار پایدار جهت‌گیری‌های مختلف پوترسین و کاداورین نسبت به سیستم نقاط کوانتومی کربنی بررسی شده است که در نهایت ساختار بهینه کمپلکس‌ها در پایدارترین حالت از منظر جانبی در شکل ۵ مشاهده می‌شوند. مقادیر انرژی کل و انرژی جذب در جدول ۱، گزارش شده است.

گرهای بر اساس نتایج DFT، سختی و پتانسیل شیمیایی پارامترهای مهمی برای مطالعه پایداری حسگری هستند. نتایج در جدول ۲ گزارش شده‌اند.

جدول ۲: توصیف‌گرهای پایداری و واکنش‌پذیری سیستم‌های مورد مطالعه

توصیف‌گر	کمپلکس ۱	کمپلکس ۲	کاداورین	پوترسین	کوآتوم‌دات
HOMO	-۲۸۶	-۵۶	-۲۶۹	-۸۰۹	-۱۷۶
LUMO	-۱۱۱	-۱	۱۸۷	۳۹۷	-۷۱۱
$\Delta E_{\text{HOMO-LUMO}}$	۱۷۵	۵۵	۹۵۱۶	۹۱۷	۳۶۴
Ionization potential (IP)	۲۸۶	۵۶	۲۶۹	۸۰۹	۱۷۶
Electronaffinity (EA)	۱۱۱	-۱	-۱۸۷	-۳۹۷	-۷۱۱
Chemical potential (μ)	-۷۰۳	-۵۲۴	-۲۹۱	-۲۶۱	-۹۴۴
Chemical hardness (η)	۵۸۲	۵۲۲	۳۷۸	۵۴۸	۲۳۲
Global electrophilicity index (ω)	۳۲۲	۳۶۲	۱۰۰	۹۰	۲۸۲

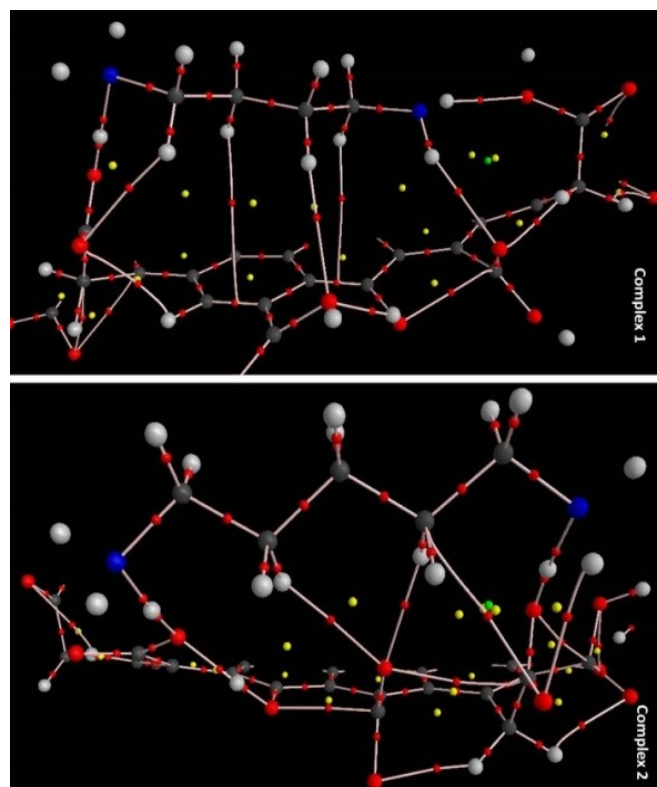
محاسبات چگالی الکترونی تمامی سیستم‌های مورد مطالعه قبل و پس از جذب انجام شده است (شکل ۷). باند گپ در اطراف سطح فرمی کامل پهن است. در مورد کمپلکس ۱ و ۲ تغییرات در اطراف سطح فرمی نسبت به نقاط کوانتومی کربنی بیشتر است. در مورد کمپلکس‌های ۱ و ۲ جابجایی به سمت راست رخ می‌دهد. کمترین میزان باند گپ در خصوص نقاط کوانتومی کربنی مشاهده می‌شود و در هر دو کمپلکس باند گپ افزایش یافته که نشان از کاهش هدایت الکتریکی است. با اندازه‌گیری میزان افزایش باند گپ می‌توان نوع ملکول مورد نظر را شناسایی کرد، این میزان افزایش هنگامی که ملکول پوترسین جذب سطح حسگر شود برابر 0.71 الکترون ولت و برای جذب کاداورین برابر 0.59 الکترون ولت است. شدت پیک‌ها قبل از نقطه فرمی نسبت به پیک‌های نقاط کوانتومی کربنی کمتر است، در حالی که این روند پس از نقطه فرمی افزایشی است.



شکل ۷: نمودار چگالی الکترونی حالات نقاط کوانتومی کربنی (GGD)، کمپلکس ۱: هیبرید نقاط کوانتومی کربنی و ملکول پوترسین و کمپلکس ۲: هیبرید نقاط کوانتومی کربنی و ملکول کاداورین

انجام می‌شود که نشان دهنده عملکرد خوب حسگر پیشنهادی برای شناسایی کمترین مقادیر پوترسین و کاداورین در محیط است.

گراف مولکولی برای کمپلکس‌ها با استفاده از برنامه AIM2000 بدست آمده و در شکل ۶ نشان داده شده است. نقاط بحرانی و نیز مسیرهای پیوند خطی میان مولکول هیستیدین و نانولوله کربنی عامل دار شده با پالادیم قابل مشاهده هستند.



شکل ۶: گراف مولکولی و نمودار کنوری، کمپلکس ۱: هیبرید نقاط کوانتومی کربنی و ملکول پوترسین و کمپلکس ۲: هیبرید نقاط کوانتومی کربنی و ملکول

همانطور که مشاهده می‌شود، برهم‌کنش‌های بسیار زیادی بین نقاط کوانتومی کربنی و ملکول‌های مورد مطالعه وجود دارد که اغلب از نوع واندروالسی هستند. این تعداد زیاد پیوند به نوعی دلیل وجود انرژی جذب بسیار بالا در دو کمپلکس می‌باشد که می‌تواند حتی منجر به حذف این ترکیبات از محیط نیز شود.

توصیف‌گرهای پایداری کلی از جمله سختی و نرمی شیمیایی کلی، پتانسیل شیمیایی و ضریب نوکلئوفیلیسیته، در بررسی واکنش‌پذیری شیمیایی نقش بسیار مهمی ایفا می‌کنند. توصیف-

۴- نتیجه گیری

درک دنیای شیمیایی و سطح مولکولی و شناسایی ملکولها در مقیاس بسیار کم در تشخیص زود هنگام فساد مواد غذایی و جلوگیری از بیماری های مربوطه بسیار حائز اهمیت هستند. اما روش های شناسایی مولکولی عموماً بر اساس تکنیک های پیچیده، گران قیمت و زمان بر استوار هستند. از آنجا که بسیاری فرآیندهای شیمیایی شامل برهم کنش های الکترواستاتیکی هستند، احتمال تشخیص الکترونیکی آنها در زمان واقعی کوتاه بسیار ضروری است. پتانسیل های بسیار نقاط کوانتومی کربنی در کاربری شناسایی، این مواد را به عنوان کاندیدهای ایده آلی برای طراحی حسگرهای جدید معرفی می کند. هدایت عالی نقاط کوانتومی کربنی و خاصیت کاتالیستی آنها، نقش مهم تشخیصی شان را برجسته می سازد. این مواد سرعت انتقال بار را بهبود بخشیده و در نتیجه زمان پاسخدهی را کوتاه و حساسیت را افزایش می دهند. مقایسه میان انرژی جذب پوترسین و کاداورین جذب شده نشانگر آن است که هر دو با انرژی های جذب $3/64$ - و $4/56$ - الکترون ولت پایدارترین ساختار جذب شیمیایی را نشان می دهند. در ادامه محاسبات چگالی حالات نتایج فوق را تأیید کرده و تغییر انرژی گپ نقاط کوانتومی کربنی پس از جذب نشانگر تغییر هدایت الکتریکی آنهاست. از طرفی محاسبات MPES محل های مستعد در واکنش های الکتروفیلی و نوکلئوفیلی را به نمایش می گذارند. محاسبات چگالی الکترونی حالات برای نقاط کوانتومی کربنی پیش و پس از جذب پوترسین و کاداورین تغییرات باند گپ در اطراف سطح فرمی و جابجایی به سمت راست را نشان می دهد. با توجه به این نتایج می توان نقاط کوانتومی کربنی را یک گزینه بسیار مناسب برای تشخیص پوترسین و کاداورین در گوشت و مواد پروتئینی در حال فساد دانست.

مراجع

[1] L. Maixnerová, A. Horvitz, G. Kuncová, M. Příbyl, M. Šebela, M. Koštejn, "Enzymatic sensor of putrescine with optical oxygen transducer-

mathematical model of responses of sensitive layer," Chemical Papers, 69, 158-166, 2015.

[2] C. Izquierdo, J. C. Nebel, L. Pardo, A. Gonzalez, "Identifying human diamine sensors for death related putrescine and cadaverine molecules," PLoS computational biology, 14, e1005945, 2018.

[3] M. Majumder, I. Biswas, A. K. Chakraborty, P. S. Devi, N. R. Bandopadhyay, "Piezoelectric behaviour of flexible ZnO-paper nanocomposite," Sensor Letters, 15, 531-535, 2017.

[4] M. Yoosefian, N. Etmianan, "Leucine/Pd-loaded (5, 5) single-walled carbon nanotube matrix as a novel nanobiosensors for in silico detection of protein," Amino acids, 50, 653-661, 2018.

[5] M. Yoosefian, "A high efficient nanostructured filter based on functionalized carbon nanotube to reduce the tobacco-specific nitrosamines, NNK," Applied Surface Science, 434, 134-141, 2018.

[6] M. Kaura, M. Kaura, V. K. Sharma, "Nitrogen-doped graphene and graphene quantum dots: A review on synthesis and applications in energy, sensors and environment," Advances in Colloid and Interface Science, 259, 44-64, 2018.

[7] D. Zhang, L. Wen, R. Huang, H. Wang, X. Hu, D. Xing, "Mitochondrial specific photodynamic therapy by rare-earth nanoparticles mediated near-infrared graphene quantum dots," Biomaterials, 153, 14-26, 2018.

[8] T. K. Mondal, D. Dinda, S. K. Saha, "Nitrogen, sulphur co-doped graphene quantum dot: An excellent sensor for nitroexplosives," Sensors and Actuators B: Chemical, 257, 586-593, 2018.

[9] R. C. Ashoori, "Electrons in artificial atoms," Nature, 379, 413-419, 1996.

[10] M. Frisch, G. Trucks, H. B. Schlegel, G. Scuseria, M. Robb, J. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. Petersson, Inc., Wallingford, CT, 2009.

[11] R. F. Bader, "A bond path: a universal indicator of bonded interactions," *The Journal of Physical Chemistry A*, 102, 7314-7323. 1998.



Designing a new nanosensor to detect putrescine and cadaverine in spoiling protein materials based on carbon quantum dots

Mehdi Yoosefian*

Department of Nanotechnology, Faculty of Science and modern technologies, Graduate University of Advanced Technology, Kerman

Abstract: Failure to detect food corruption, especially meat products, will in many cases lead to food poisoning and finally cases death. Therefore, knowledge of the quality of used foodstuffs and, specially, the detection of meat products corruption can have a significant role in reducing the complications of consumption of corrosive meat products. Meat, when it begins to decompose, produces compounds known as biogenic amines such as cadaverine and putrescine. Hence, in this study, a high-precision nanosensor based on carbon quantum dots was designed to identify these as the first sign of meat corruption at the lowest possible concentration at the fastest time. When the quantum dot is exposed to a specific gas, its ability to transfer electrical current undergoes changes that can be identified by the type of gas. A stronger reaction between the gas and the surface of the carbon quantum dots will cause more changes in the structure as well as the energy levels of the adsorbent. The adsorption energy of putrescine and cadaverine adsorbed on carbon quantum dots is equal to -3.64 and -4.56 eV, respectively, which indicates a strong chemical absorption. Band gap changes of carbon quantum dots when the putrescine molecule is adsorbed on the surface is equal to 0.71 eV and when cadaverine is adsorbed it is equal to 0.59 eV.

Keywords: Putrescine, Sensor, Carbon quantum dots, Cadaverine, Fetid protein substances.