Document Type: Full length research Paper
Pages: 15-24

Study of the adsorption effects of butanone, propanal, and pyridine biomarkers on the electronic properties of graphene armchair nanoribbons for the early detection of Gastric Cancer

Fatemeh Azizi Moshirabad[1], Edris Faizabadi[*]

School of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

Received: 12.02.2026 Final revised: 02.06.2026 Accepted: 01.07.2026 Published On-Line: 05.09.2026

Doi: 10.22055/jrmbs.2026.20898

Abstract

In this study, the adsorption properties and electronic response of armchair graphene nanoribbons, as a sensing substrate for detecting three volatile organic compounds 2-butanone (C_4H_8O), pyridine (C_5H_5N), and propanal (C_3H_6O) as key biomarkers of gastric cancer, were investigated using density functional theory while taking van der Waals interactions into account. The results show that armchair graphene nanoribbons adsorb these volatile organic compounds weakly, with adsorption energies in the range of −0.3 to −0.5 eV, indicating a physisorption process without the formation of direct chemical bonds. In addition, the density-of-states analysis shows that the adsorption of each molecule leads to the appearance of distinct peaks in the density-of-states plot of the armchair graphene nanoribbon. Therefore, the armchair graphene nanoribbon can be considered a potential substrate for gas sensing of gastric-cancer-related biomarkers in non-invasive diagnostic methods.

Keywords: Graphene, Volatile Organic Compounds, Gastric Cancer, Density Functional Theory, Gas Sensor

[*] Corresponding Author: edris@iust.ac.ir

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

مقاله پژوهشی کامل

مطالعه اثرات جذب زیست نشانگرهای بوتانون و پروپانال و پیریدین بر روی خواص الکترونی نانونوار آرمچر گرافن جهت تشخیص زود هنگام سرطان معده

فاطمه عزیزی مشیرآباد، سید ادریس فیض‌آبادی*

دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

دریافت: ۱٤۰٤/۱۱/۲۳ ویرایش نهائی: ۱٤۰۵/۰۳/۱۲ پذیرش: ۱٤۰۵/۰٤/۱۰ انتشار بر خط: ۱٤۰۵/۰٦/۱٤
Doi: 10.22055/jrmbs.2026.20898

چکیده

در این پژوهش، خواص جذب و پاسخ الکترونی نانونوارهای آرمچر گرافن به‌عنوان بستر حسگری برای شناسایی سه ترکیب آلی فرار بوتانون (C_4H_8O)، پیریدین(C_5H_5N) و پروپانال (C_3H_6O) به‌عنوان نشانگرهای زیستی کلیدی سرطان معده با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی و در نظر گرفتن برهم‌کنش‌های واندروالسی، مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که نانونوارهای آرمچر گرافن این ترکیبات آلی فرار را به‌صورت ضعیف جذب می‌کنند، با انرژی‌های جذب در محدوده ۰٫۳- تا ۰٫۵- الکترون‌ولت، که بیانگر فرآیند جذب فیزیکی بدون تشکیل پیوند شیمیایی مستقیم است. همچنین بررسی چگالی حالات نشان می‌دهد که جذب هریک از مولکول‌ها موجب ایجاد قله‌های متفاوتی در نمودار چگالی حالات نانونوار آرمچر گرافن می‌شود. بنابراین نانونوار آرمچر گرافن می‌تواند به‌عنوان بستری بالقوه برای حسگری گازی زیست‌نشانگرهای مرتبط با سرطان معده در روش‌های تشخیصی غیرتهاجمی مورد توجه قرار گیرد.

کلیدواژگان: نانونوار آرمچرگرافن، ترکیبات آلی فرار، سرطان معده، نظریه تابعی چگالی، چگالی حالات (DOS)، حسگر گاز

مقدمه

سرطان معده [1] (GC) یکی از شایع‌ترین و کشنده‌ترین انواع سرطان در جهان محسوب می‌شود و بر اساس آمار سازمان جهانی بهداشت [2] (WHO) ، سالانه بیش از یک میلیون مورد جدید ابتلا گزارش می‌شود که اغلب در مراحل پیشرفته شناسایی می‌گردند و نرخ بقای پنج‌ساله

* نویسنده مسئول: edris@iust.ac.ir

[1] Gastric Cancer

[2] World Health Organization

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.
این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص ٤.۰ بین‌المللی می‌باشد

آن کمتر از ۳۰ درصد است [٤-۱]. با وجود پیشرفت‌های قابل‌توجه در روش‌های درمانی مانند جراحی، شیمی‌درمانی و ایمونوتراپی، نرخ مرگ‌ومیر بالای این بیماری عمدتاً به‌دلیل تشخیص دیرهنگام در مراحل پیشرفته است [۵,٦]. تشخیص زودهنگام می‌تواند نرخ بقا را به‌طور چشمگیری افزایش دهد (تا بیش از ۹۰ درصد در مراحل اولیه) و امکان آغاز درمان‌های قطعی را فراهم کند [۷].

روش‌های تشخیصی متداول فعلی مانند آندوسکوپی، بیوپسی، تصویربرداری پیشرفته و تست‌های سرولوژیکی، علی‌رغم دقت نسبی، روش‌هایی تهاجمی، پرهزینه و نیازمند تجهیزات پیچیده و تخصص بالینی بالا هستند که دسترسی به آن‌ها به‌ویژه در کشورهای در حال توسعه محدود است و استفاده روتین از آن‌ها برای غربالگری گسترده جمعیت را غیرعملی می‌سازد [۸,۹]. از این‌رو، توسعه روش‌های تشخیصی غیرتهاجمی، سریع، ارزان قیمت و قابل‌اعتماد که بتوانند در مراحل اولیه بیماری نشانگرهای مرتبط با سرطان معده را شناسایی کنند، یک نیاز بالینی مهم و اولویت‌دار در تحقیقات به شمار می‌رود. در سال‌های اخیر، تحلیل بازدم[1] به‌عنوان یک رویکرد نوین غیرتهاجمی، بسیار امیدبخش و کم‌هزینه برای غربالگری و تشخیص زودهنگام انواع بیماری‌ها از جمله سرطان‌ها مطرح شده است [۱۰]. این روش بر پایه شناسایی ترکیبات آلی فرار[2] (VOCs) موجود در بازدم بیمار استوار است که این ترکیبات به‌عنوان نشانگرهای زیستی(biomarkers) ناشی از تغییرات متابولیکی و بیوشیمیایی در بدن هستند [۱۱]. از این رو تحلیل بازدم به‌دلیل غیرتهاجمی بودن (بدون نیاز به خون‌گیری یا بیوپسی)، سرعت و سهولت جمع‌آوری نمونه، هزینه پایین در مقایسه با روش‌های تصویربرداری یا آزمایشگاهی پیشرفته، قابلیت تکرار برای پیگیری مداوم بیماران، و پتانسیل غربالگری گسترده با توسعه دستگاه‌های پرتابل قابل استفاده در کلینیک‌ها یا حتی منزل، دارای مزایای متعددی است.

مطالعات بالینی متعددی نشان داده‌اند که برخی ترکیبات آلی فرار خاص در بازدم بیماران مبتلا به سرطان معده به طور معناداری افزایش می‌یابند و می‌توانند به‌عنوان نشانگرهای کلیدی عمل کنند [۱۲]. در میان این ترکیبات، پیریدین (C_5H_5N) یک ترکیب حلقوی حاوی نیتروژن است که از فرآیندهای تخمیر میکروبی غیرطبیعی و تغییرات میکروبیوم معده ناشی می‌شود و غلظت آن در بازدم بیماران به‌طور قابل‌توجهی بالاتر از افراد سالم است [۱۳]. بوتانون (C_4H_8O) یک کتون چهارکربنه است که محصول پراکسیداسیون لیپیدی و متابولیسم غیرطبیعی اسیدهای چرب بوده که قابلیت تفکیک بیماران سرطان معده از افراد سالم با حساسیت و ویژگی بالا را دارد [۱٤,۱۵]. پروپانال (C_3H_6O) نیز یک آلدهید سه‌کربنه است که از استرس اکسیداتیو و پراکسیداسیون لیپیدی ناشی شده که به‌عنوان نشانگر بالقوه گزارش شده است [۱۵,۱٦]. بنابراین این سه نشانگر را به‌دلیل تکرار بیشتر در تحقیقات و ارتباط قوی‌تر با پاتوفیزیولوژی سرطان معده، به‌عنوان نشانگرهای اولویت‌دار برای توسعه حسگرها مورد بررسی قرار دادیم. ترکیبات آلی فرار اغلب در غلظت‌های بسیار پایین ظاهر می‌شوند، بنابراین حسگرهایی با حساسیت بالا و گزینش‌پذیری مناسب

1 Breath Analysis

2 Volatile Organic Compounds

ضروری است تا تحلیل بازدم به یک ابزار تشخیصی بالینی قابل اعتماد تبدیل شود.

در دهه‌های اخیر، نانومواد کربنی به‌دلیل خواص منحصربه‌فرد فیزیکی و شیمیایی، توجه فراوانی را در زمینه حسگرهای گازی جلب کرده‌اند [۱۷]. در میان آن‌ها، گرافن و مشتقات آن مانند نانونوارهای‌گرافن[1] (GNRs) به‌عنوان گزینه‌های بسیار امیدبخش برای تشخیص ترکیبات آلی فرار مطرح شده‌اند [۱۸]. گرافن، یک لایه تک‌اتمی از اتم‌های کربن در شبکه شش‌ضلعی، دارای رسانایی الکتریکی و حرارتی عالی، استحکام مکانیکی فوق‌العاده و نسبت سطح به حجم بی‌نظیر است که آن را برای حسگری ایده‌آل می‌سازد [۱۹]. نانونوارهای گرافنی، با توجه به نوع برش دو دسته هستند، نانونوارهای آرمچر[2] که اغلب به‌دلیل رفتار نیمه‌هادی ذاتی، نبود حالت‌های مغناطیسی لبه‌ای و پاسخ الکترونیکی قوی‌تر نسبت به جذب مولکول‌های گازی، نسبت به‌نوع دیگر یعنی نانونوارهای زیگزاگ که رفتار فلزی یا نیمه‌فلزی و خواص مغناطیسی لبه‌ای از خود نشان می‌دهند برای کاربردهای حسگری گزینه‌ای مناسب‌تر محسوب می‌شوند [۲۰] همچنین نانونوار آرمچر گرافن نسبت به سایر نانومواد کربنی مانند نانولوله‌ها یا گرافن دوبعدی، مزایایی مانند گاف نواری قابل تنظیم، نسبت بالای لبه به سطح (برای جذب بهتر مولکول‌ها)، امکان عامل‌دار کردن لبه‌ها و رفتار نیمه‌رسانایی مناسب برای حسگرها هستند [۲۱].

روش‌های محاسباتی

تمام محاسبات این پژوهش با استفاده از نرم‌افزار کوآنتوم اسپرسو [۲۲] و در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) انجام شد. برای توصیف انرژی تبادل-همبستگی، تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) در قالب تابع PBE به‌کار گرفته شد. از آنجا که مکانیسم جذب ترکیبات آلی فرّار بر روی نانونوارهای آرمچر گرافن عمدتاً تحت تأثیر نیروهای واندروالس است [۲۳,۲٤]، تصحیح Grimme-D3 برای لحاظ‌کردن دقیق برهم‌کنش‌های بلندبرد وان در والس در تمامی محاسبات اعمال شده است.

برهم‌کنش بین هسته‌های یونی و الکترون‌های ظرفیت با استفاده از شبه‌پتانسیل‌های PAW [۲۵] مدل‌سازی شده است که دقت بالا و کارایی مناسبی را در محاسبات مبتنی بر امواج تخت فراهم می‌کند [۲٦]. برای بسط امواج تخت، مقدار برش انرژی موجک‌ها ٤۰Ry انتخاب شد که این مقادیر پس از بررسی همگرایی انرژی و نیروها مناسب تشخیص داده شدند.

مدل و فرمول بندی

نانونوار گرافن از نوع آرمچر که لبه‌های آن با اتم‌های هیدروژن اشباع شدند تا پیوندهای آویزان از بین رفته و اثرات لبه‌ای مصنوعی حذف شود. و برای جلوگیری از برهم‌کنش ساختگی بین سلول‌های دوره‌ای، فاصله خلأ حدود ۱۵Å در راستای عمود بر صفحه نانونوار در نظر گرفته شد.

تعداد اتم‌های موجود در ابر سلول‌های تشکیل‌دهنده بسته به‌نوع ساختار با کمترین تعداد ۸۰ اتم (نانونوار آرمچر گرافن) و بیشترین تعداد ۹۳ اتم (سیستم شامل بوتانون و

[1] Graphene Nanoribbons

[2] Armchair

نانونوار آرمچر گرافن) بوده است. تمام سیستم‌ها چه نانونوارهای منفرد و چه ساختارهای جذب‌شده به‌طور کامل بهینه شده‌اند تا معیار همگرایی انرژی برابر با 10^{-5}Ry برآورده شود.

همچنین برای اشغال حالات الکترونی از روش توزیع فرمی دیراک استفاده شد. نمونه‌برداری ناحیه بریلوئن با شبکه ۱ × ۱ × ۸ انجام شد که برای این ساختار مناسب است.

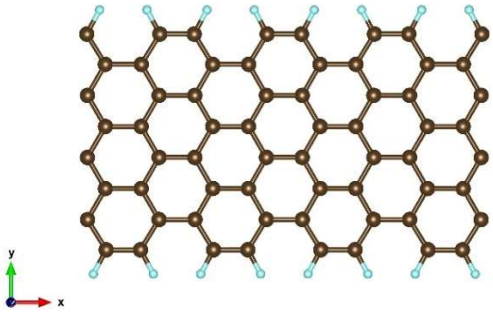
بنابراین این چارچوب محاسباتی ترکیبی از DFT مبتنی بر PBE، تصحیحات واندروالس Grimme-D3، شبه پتانسیل‌ها PAW و تحلیل دقیق چگالی حالات مدلی معتبر برای بررسی رفتار جذب مولکول‌های نشانگر سرطان معده بر روی نانونوار آرمچر گرافن فراهم می‌کند. این روش امکان مقایسه سیستماتیک انرژی‌های جذب، تغییرات ساختار الکترونی و ویژگی‌های مرتبط با حسگری را برای نانونوار آرمچر گرافن را مهیا می‌سازد. برای سه مولکول زیست‌نشانگر سرطان معده بوتانون، پریدین و پروپانال انرژی جذب از رابطه استاندارد زیر محاسبه شد:

$$E_{ads} = E_{G+M} - E_G - E_M$$

که در آن E_{G+M} انرژی کل سیستم مولکول جذب‌شده بر روی گراف، E_G انرژی نانونوار آرمچر گرافن و E_M انرژی مولکول در حالت آزاد و بهینه است. مقادیر منفی انرژی جذب نشان‌دهنده جذب پایدار هستند.

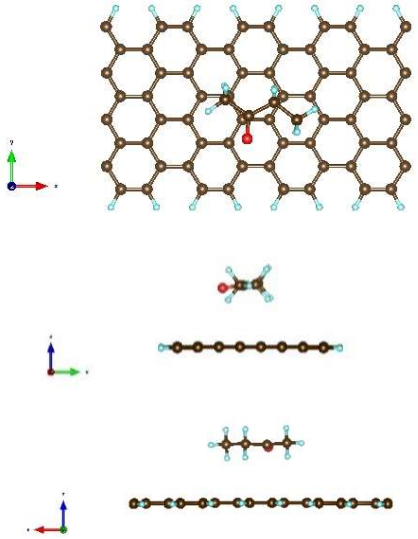
نتایج و بحث

با توجه به‌اینکه توان محاسباتی کامپیوترهای مورد استفاده برای این تحقیق بسیار بالا بوده و از کامپیوترهای پر قدرت موجود در ایران استفاده شده است نتایج نشان می‌دهد که پس از بهینه‌سازی هندسی، هیچ تغییر ساختاری قابل‌توجهی در شبکه گرافن بدون نقص رخ نمی‌دهد و مولکول‌ها تقریباً در فاصله تعادلی خود از سطح باقی می‌مانند، موضوعی که ماهیت فیزیکی جذب را تأیید می‌کند.

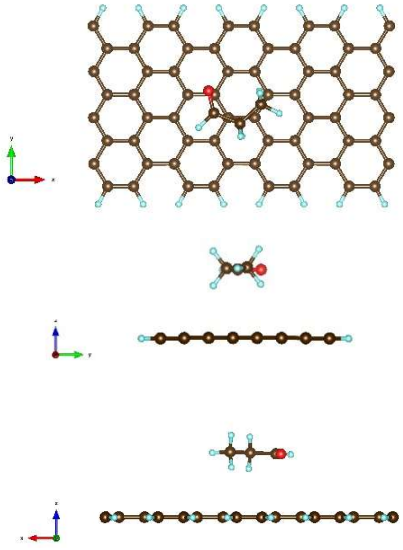


شکل ۱. ساختار بهینه شده نانونوار آرمچر گرافن

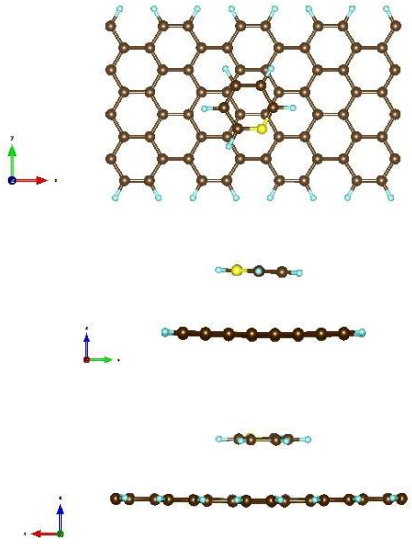
ابتدا ساختار بهینه‌شده نانونوار آرمچر گرافن بدون حضور مولکول‌ها در شکل ۱ نشان داده شده است. پس از فرآیند بهینه سازی، شبکه شش‌ضلعی گرافن بدون ایجاد تغییر شکل قابل‌توجه و با حفظ تقارن کلی خود در حالت پایدار قرار می‌گیرد. این رفتار بیانگر پایداری ذاتی نانونوار آرمچر گرافن و نبود تنش ساختاری قابل‌توجه در ساختار اولیه است. در ادامه، پیکربندی‌های بهینه‌شده جذب مولکول‌های بوتانون، پروپانال و پیریدین بر روی نانونوار آرمچر گرافن در شکل ۲ ارائه شده‌اند.



الف



ب



ج

شکل۲. ساختارهای بهینه شده‌ی جذب بوتانون(الف)، پروپانول(ب) و پیریدین(ج) روی نانونوار آرمچر گرافن در صفحه‌های xy، yz و zx.

مقایسه ساختار نانونوار آرمچر گرافن پیش و پس از جذب سه نشانگر نشان می‌دهد که پس از قرارگیری هر یک از این مولکول‌ها و انجام بهینه‌سازی هندسی، تغییر محسوسی در هندسه کلی نانونوار آرمچر گرافن ایجاد نمی‌شود و تنها جابه‌جایی‌های بسیار جزئی و موضعی در نزدیکی ناحیه جذب مشاهده می‌گردد. این موضوع به‌خوبی نشان می‌دهد که فرآیند جذب عمدتاً از نوع فیزیکی بوده و بدون تشکیل پیوند شیمیایی مستقیم میان مولکول‌ها و اتم‌های کربن گرافن صورت می‌گیرد. و مولکول‌ها در فاصله‌ای مشخص و نسبتاً ثابت از سطح نانونوار قرار می‌گیرند که این فاصله تعادلی حاصل رقابت میان جاذبه‌های واندروالسی و دافعه‌های کوتاه‌بُرد الکترونی است. تفاوت در جهت‌گیری و فاصله تعادلی بین مولکول‌ها به ویژگی‌های ساختاری و الکترونی آن‌ها بازمی‌گردد؛ به‌گونه‌ای که بوتانون (شکل۲الف) به‌دلیل اندازه بزرگ‌تر و سطح تماس مؤثرتر که با توجه به

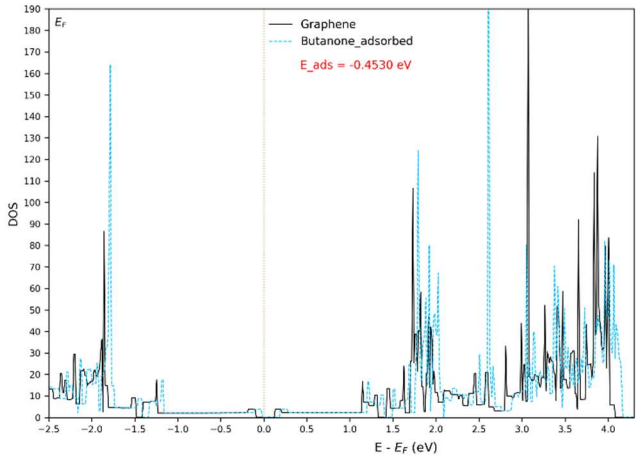
جدول۱ انرژی جذب بیشتری هم نسبت به دو نشانگر دیگر دارد، آرایشی پایدارتر روی سطح اتخاذ می‌کند، پروپانال (شکل۲ب) به‌علت ابعاد کوچک‌تر و قطبیت‌پذیری کمتر در فاصله‌ای کمی بزرگ‌تر قرار می‌گیرد و پیریدین (شکل۲ج) با قرارگیری تقریباً موازی حلقه آروماتیک خود نسبت به صفحه گرافن، برهم‌کنش‌های π–π قابل‌توجهی برقرار می‌کند که فاصله تعادلی آن نسبت به دو مولکول دیگر کمی بیشتر است.

نشانگر	فاصله تعادلی بعد از جذب(Å)	انرژی جذب (eV)
بوتانون	۲٫۸۷	−۰٫٤٦٥
پروپانال	۲٫۷۷	−۰٫۳٥٥
پیریدین	۳٫۳٦	−۰٫٤۳۷

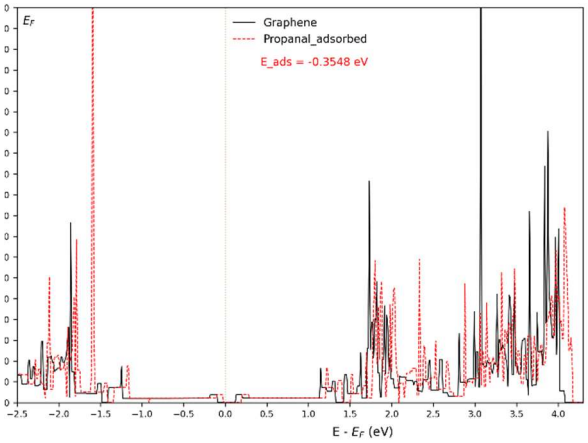
جدول۱. انرژی‌های جذب و فاصله‌های تعادلی نشانگرهای زیستی بعد از جذب روی نانونوار آرمچر گرافن.

تفاوت انرژی جذب میان بوتانون و پروپانال به‌ویژگی‌های ساختاری و الکترونی این دو مولکول بازمی‌گردد. بوتانون به‌دلیل اندازه بزرگ‌تر، توزیع گسترده‌تر چگالی الکترونی و قطبیت‌پذیری بیشتر، سطح تماس مؤثرتری با شبکه π الکترونی گرافن برقرار می‌کند و همین موجب تقویت نیروهای واندروالسی و پایداری بیشتر جذب آن می‌شود. حضور دو گروه آلکیلی در اطراف گروه کربونیل نیز باعث افزایش قابلیت‌پذیری مولکول برای برهم‌کنش با سطح گرافن می‌گردد. در مقابل، پروپانال کوچکتر است و ابر الکترونی محدودتری دارد و به‌دلیل قطبیت‌پذیری کمتر، توانایی القای دوقطبی و ایجاد برهم‌کنش پایدار با سطح گرافن ضعیف‌تر است؛ بنابراین انرژی جذب پایین‌تری از خود نشان می‌دهد. علاوه بر این، در جذب پیریدین حضور اتم نیتروژن و جفت‌الکترون ناپیوندی آن موجب تقویت دافعه الکترواستاتیکی موضعی شده و سیستم برای دستیابی به کمینه انرژی، فاصله تعادلی بزرگ‌تری را اختیار می‌کند و انرژی جذب کمتری دارد.

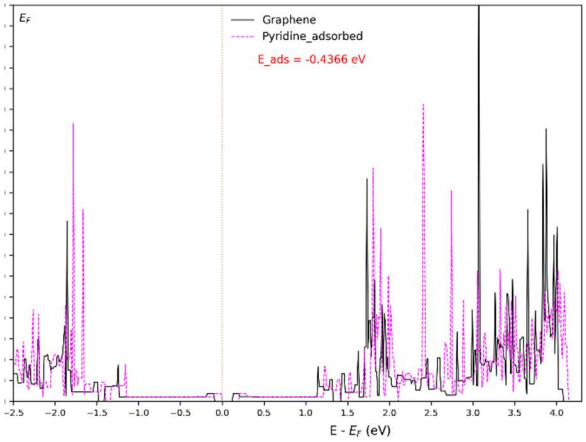
چگالی حالت‌ها (DOS) که نقش مهمی در بررسی اثرات جذب هر یک از مولکول‌های نشانگرهای زیستی روی ساختار الکترونی نانونوار آرمچر گرافن دارد، محاسبه شده است. توزیع حالت‌های مجاز الکترونی را برحسب انرژی نمایش می‌دهد و به‌طور خاص، تغییرات نزدیک سطح فرمی (E_F) را آشکار می‌کند، ناحیه‌ای که تعیین‌کننده تعداد حامل‌های بار و در نتیجه رسانایی ماده است. بنابراین، مقایسه نمودار DOS نانونوار آرمچر گرافن با حالت جذب‌شده امکان ارزیابی اثر جذب بر جابجایی و تغییر شدت حالت‌ها در اطراف E_F و شواهدی از برهم‌کنش و انتقال بار بین مولکول و سطح گرافن را فراهم می‌کند.



الف



ب



ج

شکل۳. نمودار های چگالی حالات برای جذب نشانگرهای (الف) بوتانون به رنگ آبی، (ب) پروپانال به رنگ قرمز و (ج) پیریدن به رنگ بنفش بر روی نانونوار آرمچر گرافن و نمودار چگالی حالات نانونوار آرمچر گرافن قبل از جذب مولکول ها رنگ مشکی

در هر سه نمودار، منحنی آبی پیوسته مربوط به گرافن خالص و منحنی نارنجی خط‌چین مربوط به گرافن پس از جذب مولکول (بوتانون، پروپانال و پیریدین) است. محور افقی انرژی نسبت به سطح فرمی $(E - E_F)$ و محور عمودی چگالی حالت‌ها (DOS) را نشان می‌دهد، خط عمودی نقطه‌چین نیز محل سطح فرمی را مشخص می‌کند.

در شکل۳الف) پس از جذب بوتانون، تغییرات قابل توجهی در شدت و موقعیت برخی پیک‌ها، به‌ویژه در ناحیهٔ نوارهای والانس (انرژی‌های منفی) و همچنین در ناحیه بالای سطح فرمی مشاهده می‌شود. این تغییرات نسبت به گرافن خالص بیانگر برهم‌کنش الکترونی بین بوتانون و سطح گرافن است که با انرژی جذب منفی نیز سازگار بوده و نشان می‌دهد جذب از نوع فیزیکی اما مؤثر بر ساختار الکترونی است.

همچنین در شکل۳ب) نیز جذب پروپانال منجر به‌ظهور و تقویت پیک‌هایی در ناحیهٔ والانس، به‌خصوص حوالی چند الکترون‌ولت پایین‌تر از سطح فرمی شده است. با این حال، الگوی تغییرات DOS و شدت پیک‌ها با بوتانون متفاوت است و تغییرات نزدیک سطح فرمی محدودتر دیده می‌شود که با انرژی جذب کمتر پروپانال نسبت به بوتانون هم‌خوانی دارد.

نمودار پیریدین که شکل۳ج) آورده شده است، بیشترین تغییر را در توزیع چگالی حالت‌ها نشان می‌دهد. پیک‌های جدید و بسیار تقویت‌شده در ناحیه والانس (به‌ویژه در انرژی‌های منفی‌تر) مشاهده می‌شوند که به‌حضور اوربیتال‌های الکترونی پیریدین نسبت داده می‌شوند. این تغییرات شدیدتر بیانگر برهم‌کنش قوی‌تر پیریدین با گرافن در مقایسه با دو مولکول دیگر است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با هدف ارزیابی پتانسیل نانونوارهای گرافن به‌عنوان بستر حسگری برای تشخیص ترکیبات آلی فرّار مرتبط با سرطان معده، رفتار جذب و پاسخ الکترونیکی سه زیست‌نشانگر کلیدی سرطان معده یعنی بوتانون، پیریدین و پروپانال بر روی نانونوار آرمچر گرافن به‌صورت نظری بررسی شد. محاسبات مبتنی بر نظریه

تابعی چگالی همراه با تصحیحات واندروالسی نشان داد که جذب این مولکول‌ها عمدتاً از نوع فیزیکی و تحت تأثیر نیروهای واندروالسی است. اختلاف در انرژی‌های جذب به تفاوت در ویژگی‌های ساختاری و الکترونی مولکول‌ها نسبت داده می‌شود؛ به‌طوری که بوتانون بیشترین و پیریدین کمترین انرژی جذب را بین سه نشانگر زیستی دارند. تحلیل نمودار چگالی حالات نشان می دهد جذب مولکول‌ها منجر به تغییرات قابل توجه و مشخصی در شدت و موقعیت قله‌های چگالی حالات می‌گردد. تفاوت الگوهای نمودار های چگالی حالات، برای هر یک از مولکول‌ها بیانگر آن است که هر نشانگر اثر الکترونیکی متمایزی بر گرافن اعمال می‌کند، که این موضوع می‌تواند مبنای انتخاب‌پذیری حسگری نانونوار آرمچر گرافن نسبت به ترکیبات آلی فرّار مختلف باشد. این یافته‌ها حاکی از آن است که نانونوارهای آرمچر گرافن می‌توانند به‌عنوان بستر حسگری برای شناسایی ترکیبات آلی فرّار مرتبط با سرطان معده عمل کنند و امکان طراحی حسگرهای گازی غیرتهاجمی برای تشخیص زودهنگام این بیماری را فراهم آورند.

قدردانی

این پژوهش با شماره گرنت ۱۶۰/۲۰۷۹۳حمایت دانشگاه علم و صنعت ایران انجام شده است.

مرجع‌ها

[1] Thrift, A.P. and H.B. El-Serag, Burden of gastric cancer. Clinical gastroenterology and hepatology, 2020. **18**(3): p. 534–542. https://doi.org/10.1016/j.cgh.2019.07.045
[2] Cao, W., et al., Comparative study of cancer profiles between 2020 and 2022 using global cancer statistics (GLOBOCAN). Journal of the National Cancer Center, 2024. **4**(2): p. 128–134. https://doi.org/10.1016/j.jncc.2024.05.001
[3] Ilic, M. and I. Ilic, Epidemiology of stomach cancer. World journal of .gastroenterology, 2022. **28**(12): p. 1187 https://doi.org/10.3748/wjg.v28.i12.1187
[4] Zhang, H., et al., Long-term relative survival from a of patients with gastric cancer large-scale cohort: a period-analysis. .BMC cancer, 2024. **24**(1): p. 1420 https://doi.org/10.1186/s12885-024-13141-5
[5] da Silva, R.C.F., Guide to cancer early diagnosis. Revista Brasileira de .Cancerologia, 2017. **63**(1): p. 41–42 https://doi.org/10.3748/wjg.v25.i17.2029
[6] Hiom, S., Diagnosing cancer earlier: reviewing for improving cancer the evidence survival. British journal of cancer, 2015. .**112**: p. S1–5 https://doi.org/10.1038/bjc.2015.23
[7] Tan, Y.K. and J.W. Fielding, Early diagnosis of early gastric cancer. European journal of gastroenterology & hepatology, 2006. .**18**(8): p. 821–829 https://doi.org/10.1097/00042737-200608000-00004.
[8] Mărginean, C.O., L.E. Meliț, and M.O. Săsăran, Traditional and modern diagnostic approaches in diagnosing pediatric Helicobacter pylori infection. .Children, 2022. **9**(7): p. 994 https://doi.org/10.3390/children9070994
[9] Orășeanu, A., et al., Landscape of innovative methods for early diagnosis of gastric cancer: a systematic review. Diagnostics, .2023. **13**(24): p. 3608 https://doi.org/10.3390/diagnostics13243608
[10] Haddad, G., et al., Using breath analysis as a screening tool to detect gastric cancer: a systematic review. 2021, American .Society of Clinical Oncology https://doi.org/10.1200/JCO.2021.39.3_suppl.175
,[11] Moura, P.C., M. Raposo, and V. Vassilenko Breath volatile organic compounds

(VOCs) as biomarkers for the diagnosis of pathological conditions: A review. Biomedical journal, 2023. **46**(4): p. .100623 https://doi.org/10.1016/j.bj.2023.100623
[12] Kumar, S., et al., Selected ion flow tube mass spectrometry analysis of exhaled breath for volatile organic compound profiling of esophago-gastric cancer. Analytical .chemistry, 2013. **85**(12): p. 6121–6128 https://doi.org/10.1021/ac4010309
[13] Mochalski, P., et al., Identification of key volatile organic compounds released by gastric tissues as potential non-invasive gastric cancer. biomarkers for .Diagnostics, 2023. **13**(3): p. 335 https://doi.org/10.3390/diagnostics13030335
[14] Amal, H., et al., Detection of precancerous gastric lesions and gastric cancer through exhaled breath. Gut, 2016. **65**(3): p. 400– https://doi.org/10.1136/gutjnl-2014-. 407308536
[15] Alghoul, I., et al., Efficient detection of gastric cancer biomarkers on functionalized carbon nanoribbons using DFT analysis. Scientific reports, 2025. .**15**(1): p. 13173 https://doi.org/10.1038/s41598-025-97518-x
[16] Jung, Y.J., et al., Advanced diagnostic technology of volatile organic compounds real time analysis analysis from exhaled breath of gastric cancer patients using proton-transfer-reaction time-of-flight mass spectrometry. Frontiers in Oncology, 2021. **11**: p. .560591 https://doi.org/10.3389/fonc.2021.560591
[17] Onyancha, R.B., et al., A systematic review on the detection and monitoring of toxic gases using carbon nanotube-based Sensing and Bio-Sensing .biosensors .Research, 2021. **34**: p. 100463 https://doi.org/10.1016/j.sbsr.2021.100463
[18] Chakraborthy, A., et al., A critical review of the use of graphene-based gas sensors. .Chemosensors, 2022. **10**(9): p. 355 https://doi.org/10.3390/chemosensors10090355
[19] Mbayachi, V.B., et al., Graphene synthesis, characterization and its applications: A review. Results in Chemistry, 2021. **3**: p. .100163 https://doi.org/10.1016/j.rechem.2021.100163
[20] Houtsma, R.K., J. de la Rie, and M. Stöhr, Atomically precise graphene nanoribbons: interplay of structural and electronic properties. Chemical Society .Reviews, 2021. **50**(11): p. 6541–6568 https://doi.org/10.1039/D0CS01541E
[21] Lou, S., et al., Graphene nanoribbons: current status, challenges and opportunities. .Quantum Frontiers, 2024. **3**(1): p. 3 https://doi.org/10.1007/s44214-024-00050-8
[22] Giannozzi, P., et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantumsimulations of materials. Journal of physics: Condensed matter, 2009. **21**(39): p. https://doi.org/10.1088/0953-.395502 8984/21/39/395502
[23] Voloshina, E., et al., Theoretical study on the adsorption of pyridine derivatives on graphene. Chemical Physics Letters, .2011. **510**(4-6): p. 220–223 https://doi.org/10.1016/j.cplett.2011.05.025
[24] Moriggi, F., et al., Adsorption Affinities of Small Volatile Organic Molecules on Graphene Surfaces for Novel Nanofiller Design: A DFT Study. Molecules, 2023. .**28**(22): p. 7633 https://doi.org/10.3390/molecules28227633
[25] Perdew, J.P., K. Burke, and M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple. Physical review letters, .1996. **77**(18): p. 3865 https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865
[26] Blöchl, P.E., Projector augmented-wave method. Physical review B, 1994. .۱۷۹۵۳ .**50**(24): p https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953