

**О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МОДИФИЦИРОВАННЫХ
НИТРОГРУППОЙ БОРОНИТРИДНЫХ НАНОТРУБОК
В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕМЕНТОВ СЕНСОРНЫХ УСТРОЙСТВ
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МИКРОКОЛИЧЕСТВА ВЕЩЕСТВА**

Ерофеев Д.Р. (Университет ВолГУ), **Борознина Н.П.** (Университет ВолГУ),
Запороцков П.А. (Университет ВолГУ)

Научный руководитель – доцент, доктор физико-математических наук, Борознина Н.П.
(Университет ВолГУ)

Аннотация. В данной работе рассматривается возможность использования модифицированных боронитридных нанотрубок в качестве элементов сенсорных устройств, проявляющих чувствительность в отношении газофазных углеродистых соединений.

Введение. В настоящее время загрязнение окружающей среды и, как следствие, ухудшение экологии, является одной из важнейших проблем человечества, поскольку негативно влияет на жизнь человека в целом и является одним из факторов развития серьезных заболеваний. Ученые по всему миру занимающиеся исследованиями в области био- и нанотехнологий, пытаются добиться хоть каких-то результатов для улучшения ситуации [1,2].

На протяжении многих лет, группа ученых занимается определением сорбционной и сенсорной активности модифицированных углеродных и бороуглеродных нанотрубок, результаты которых дали предпосылки для проведения подобных исследований в отношении боронитридных наноструктур [3]. Также были изучены их ярко выраженные уникальные физические, химические, электрические и механические свойства, позволяющие ускорить разрешения вопросов улучшения экологии и здоровья человека, при этом способствуют уменьшению проблем энергосбережения и энергоэффективности новых производственных мощностей.

На основе проведенных ранее исследований, авторами были предложены ультрачувствительные датчики на основе нитрида бора (boron-nitride nanotubes (BNNTs)). В данной работе рассматривается возможность модификации границы одностенной бороуглеродной нанотрубки функциональной нитрогруппой с целью определения возможности использования получившейся наносистемы в качестве элемента сенсорного устройства, чувствительного к микроколичествам углеродосодержащих соединений. Данные исследования позволят установить наличие загрязнения воздушного пространства жилых и промышленных помещений.

Основная часть. Для определения вредоносных паров в воздухе необходимо использовать высокочувствительные сенсорные датчики. Для этого лучше всего использовать материал, способный идентифицировать ультрамалое количество вредоносного газа. Для этой цели были специально выбраны модифицированные нитрогруппой ($-\text{NO}_2$) BNNTs. Для подтверждения эффективности выбранных наносистем были проведены исследования для определения сорбционной и сенсорной активности наносистемы BNNT- NO_2 в отношении молекул таких газов, как углекислый газ и сернистый газ. С помощью процессов компьютерного моделирования получилось установить значение энергии взаимодействия при которой система находится в наиболее стабильном состоянии. Для определения минимума расстояния взаимодействия было проведено моделирование процесса приближения одной из исследуемых молекул к атому кислорода нитрогруппы.

Анализ результатов показал возникновение устойчивого комплекса. Далее было смоделировано и рассчитаны основные электронно-энергетические параметры сканирования воображаемой поверхности на которой присутствовала анализируемая молекула. В

результате было установлено слабое Ван-Дер-Ваальсово взаимодействие, наличие которого говорит о возможности многократного использования сенсорного устройства на основе исследуемого наноконструкта без разрушения и химического загрязнения.

Таким образом, использование устройств на основе данной технологии может являться решением проблемы определения ультрамалого количества вещества, что является достаточно актуальным для определения качества воздуха, как в обычных жилых помещениях, так и технических.

Выводы. На основании проведенных модельных исследований было доказано наличие сорбционного и сенсорного взаимодействия между гранично модифицированной боронитридной нанотрубкой и молекулами диоксида углерода и диоксида серы. Полученные значения энергий взаимодействия позволяют говорить о селективности системы и, следовательно, способности сенсорного устройства идентифицировать различные соединения и субстанции, например, определять вредные соединения в воздухе. Таким образом, на основе проведенных исследований можно разработать рекомендации по технологии создания новых высокопроизводительных устройств, например, высокочувствительные датчики для оценки качества воздуха, нано- и микроэлектронные устройства, фильтры и т.д. Принцип работы таких устройств будет основан на изменении вольт-амперных характеристик нанотрубки в результате взаимодействия с молекулами определенного типа на ее модифицированной границе. Использование устройств на основе модифицированных наносистем позволит решить одну из современных проблем развития технологий: проблему экономии энергии и энергоэффективности новых производственных мощностей и используемого оборудования.

Список использованных источников:

- 1.Thundat, T., Oden, P.I., and Warmack, R.J., Microcantilever sensors. *Microscale Thermophys. Eng.*, 1997, vol. 1, no. 3, pp. 185—199. <https://doi.org/10.1080/108939597200214>
- 2.Pic, B., Czaplewski, D., Craighead, H.G., Neuzil, P., Campagnolo, C., and Batt, C., Mechanical resonant immunospecific biological detector. *Appl. Phys. Lett.*, 2000, vol. 77, no. 3, p. 450. <https://doi.org/10.1063/1.127006>
- 3.Zaporotskova, I.V., Boroznina, N.P., and Boroznin, S.V., Nanotechnology: Contribution to inclusive growth in Russia, New Technology for Inclusive and Sustainable Growth, *Inshakova, E.I. and Inshakova, A.O., Eds., Smart Innovation, Systems and Technologies*, vol. 287, Singapore: Springer, 2022, pp. 137—149. https://doi.org/10.1007/978-981-16-9804-0_12

