



DOI: <https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2022.2.5>

УДК 539.2.21
ББК 30.6



**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
БОРОНИТРИДНЫХ НАНОСТРУКТУР
С УГЛЕРОДОСОДЕРЖАЩИМИ МОЛЕКУЛАМИ**

Наталья Павловна Борознина

Доктор физико-математических наук, профессор,
кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
boroznina.natalya@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Данил Романович Ерофеев

Студент, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
NMТЬ-191_127925@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Сергей Владимирович Борознин

Кандидат физико-математических наук, доцент,
заведующий кафедрой судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
boroznin@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Лев Васильевич Кожитов

Доктор технических наук, профессор, кафедра технологии материалов электроники,
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
kozitov@misis.ru
просп. Ленинский, 4, 119049 г. Москва, Российская Федерация

Аннотация. Проект основан на очистительных свойствах боронитридных нанотрубок и использовании их в промышленных, медицинских, экологических целях. В нем показано, что использование новых технологий, а именно нанотрубок на основе бора, приводит к качественному очищению воздуха и окружающей среды от углекислого и сернистого газов. В подтверждение этому представлены соответствующие графики и расчеты. А также было проведено наглядное моделирование того, как боронитридная нанотрубка напрямую взаимодействует с молекулой углекислого газа. В современном мире особо важно здоровье людей, а с каждым годом содержание углекислого газа в воздухе растет. Что в итоге может повлечь за собой следующие пагубные последствия для нас: слабость, сонливость, головные боли, проблемы с концентрацией внимания. Предлагаемые фильтры не только представляют собой новый и уникальный способ улучшения экологии, но благодаря им вслед за улучшением окружающей среды может последовать подъем остальных сфер жизни человека.

Ключевые слова: газофазные молекулы, молекула углекислого газа, боронитридные нанотрубки, фильтры, наносистема, взаимодействия, композитные наноматериалы, адсорбция, наноэлектроника и микросистемная техника.

Сегодня применение нанотрубок, благодаря их универсальным свойствам, в качестве элементов нанодатчиков быстро растет. Такие свойства наносистем особенно востребованы в биологических и медицинских отраслях. Био- и наносенсоры используются для диагностики и лечения конкретных заболеваний. В связи с этим ученые, занимающиеся исследованиями в области био- и нанотехнологий, пытаются добиться новых открытий в области прогнозирования и лечения заболеваний.

Гауптман и др. [7] предложили ультразвуковые датчики для контроля технологических процессов и химического анализа. Микрокантилеверные датчики, в которых исследовалось влияние демпфирования, поверхностных напряжений и массового нагружения, были изучены Тундатом и его коллегами [12].

Илик и др. [8] работали над механическим резонансным исследованием биологического детектора. Они проиллюстрировали, что иммуноспецифическим биологическим детектором является механический генератор с микроразмерным кантилевером из нитрида кремния. Исследовано влияние плотности атомов газа, размера нанотрубки и различных граничных условий на чувствительность ОУНТ.

В последнее время из-за ярко выраженных физических, химических, электрических и механических свойств нанотрубок нитрида бора (БННТ), по сравнению с УНТ, ученые в

области нанотехнологий активно изучают и используют БННТ [2; 3]. Цюфани и др. [6] работали над поведением БННТ, которое действует как инновационное наноустройство для решения проблем наномедицины. Чоудхури и др. [5] эксплуатировали вибрационное поведение и нарушение симметрии БННТ. В другом исследовании Чоудхури и Адхикари [4] тщательно исследовали теоретический случай изменения частотного сдвига в БННТ как бионаносенсорах масштаба 10^{-21} грамм. В различных значительных работах Панчал и его коллег [9–11] исследовалась вибрация бионанозондирования различных бактерий и вирусов на основе одностенных боронитридных нанотрубок для случаев кресла и зигзага. Адхикари [1] в одной из глав книги предложил всестороннее исследование одностенных БННТ как бионаносенсоров.

В современном мире особенно важно здоровье людей, а с каждым годом содержание углекислого и сернистого газа в воздухе растет. Это влечет за собой следующие пагубные последствия: слабость, сонливость, головные боли, проблемы с концентрацией внимания. Остро стоит проблема определения наличия вредных газов в помещениях различного назначения, используя при этом высокотехнологичные датчики, способные реагировать даже на микроколичества вредных веществ (например, в палатах интенсивной терапии). Ухудшение экологии влияет и на развитие многих заболеваний человека. Анализ

дыхания может потенциально обеспечить неинвазивное средство для оценки состояния здоровья человека. Ограниченное количество ЛОС (летучих органических соединений) коррелирует с наличием специфических заболеваний. Такие соединения, как ацетон, могут фактически рассматриваться как маркеры заболеваний, поэтому и требуется их селективное обнаружение. Следовательно, можно утверждать, что представленные исследования по созданию высокоэффективных энергосберегающих хеморезистивных сенсорных датчиков на основе наноматериалов для анализа воздуха чрезвычайно актуальны как для развития персонализированной медицины, так и для нужд экологии в целом.

В данной работе исследована возможность граничного модифицирования одностенной боронитридной нанотрубки нитридной группой, а также определены сорбционные и сенсорные особенности получившейся системы в отношении углеродосодержащих молекул.

Данные исследования могут лечь в основу создания высокоточных сенсоров для определения заболеваний человека, а также для датчиков, проводящих контроль качества воздуха в помещениях бытового и промышленного назначения. Выбор нитридной группы (NO_2) обусловлен тем, что нитрогруппа является сильным электроноакцептором, так как обладает отрицательным индуктивным и мезомерным эффектами («стягивает» на себя электронную плотность), что оказывает положительное влияние на процессы присоединения молекул к общей системе БНТ- NO_2 .

Таким образом, это исследование и связанные с ним усовершенствованные будущие

работы в этой области помогут найти полезные и практические способы продвижения общих знаний о бионанодатчиках в медицинских приложениях.

Проведена работа с боронитридной нанотрубкой типа zig-zag (6,0), которая была гранично модифицирована аминной группой. Функциональная группа была присоединена к атому бора нанотрубки под углом $173,4^\circ$. Длина связи между аминной группой и боронитридной нанотрубкой составила $1,4 \text{ \AA}$.

Первым этапом исследования было моделирование взаимодействия между получившейся наносистемой и молекулой углекислого газа CO_2 . Моделирование носило пошаговый характер присоединения молекулы углекислого газа к трубке с шагом $0,1 \text{ \AA}$. Расстояние взаимодействия составляло расстояние от $0,2$ до 6 \AA .

В результате расчетов было получено подтверждение наличия сорбционного взаимодействия между боронитридной наносистемой и молекулой углекислого газа. Была рассчитана энергия связи, составляющая $-0,078 \text{ эВ}$ на расстоянии $2,3 \text{ \AA}$ от атома кислорода нитрогруппы. По результатам исследования построен график зависимости энергии взаимодействия от положения молекулы относительно наносистемы (рис. 1).

Далее было проведено компьютерное моделирование процесса сканирования воображаемой поверхности, на которой присутствует молекула CO_2 . Это было проведено для определения наличия чувствительности наносистемы к присутствию данных молекул в пространстве. Результаты исследования показаны на рисунке 2.

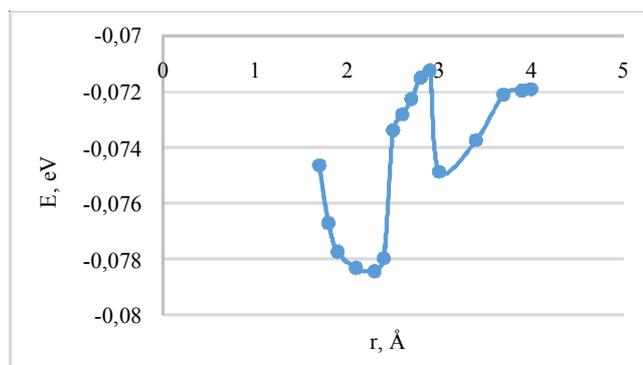


Рис. 1. Изображение зависимости энергии взаимодействия от положения молекулы относительно наносистемы

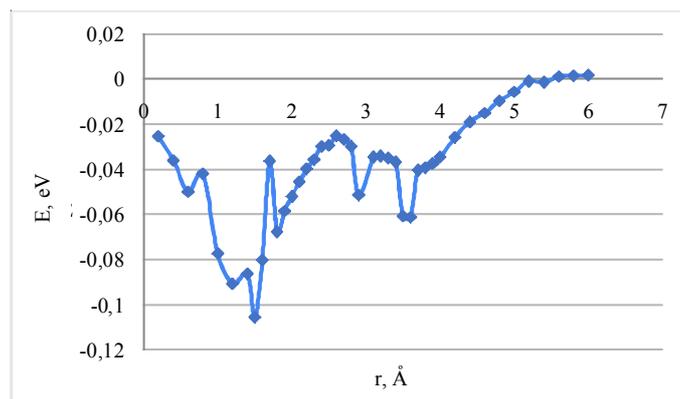


Рис. 2. Изображение зависимости энергии взаимодействия от положения молекулы относительно наносистемы при моделировании сканирования произвольной поверхности, содержащей молекулу углекислого газа

В ходе исследования было проведено компьютерное моделирование процесса граничного модифицирования бороуглеродной нанотрубки функциональной аминной группой. Были исследованы особенности сорбционно-го и сенсорного взаимодействия получившегося наноконплекса в отношении молекулы углекислого газа.

Анализ результатов взаимодействия показал наличие слабого ван-дер-ваальсового взаимодействия в каждом из моделируемых процессов. Данный тип взаимодействия может являться предпосылкой к возможности многократного использования данного наноконплекса в качестве элемента устройства для определения присутствия углекислого газа.

REFERENCES

1. Adhikari S. Boron Nitride Nanotubes in Nanomedicine. *A Volume in Micro and Nano Technologies*. New York, Elsevier Inc, 2016. pp. 149-164.
2. Ansari R, Rouhi S., Mirnezhad M., Aryayi M. Stability Characteristics of Single-Walled Boron Nitride Nanotubes. *Archives of Civil and Mechanical Engineering*, 2015, vol. 15, iss. 1, pp. 162-170.
3. Chopra N.G., Zettl A. Measurement of the Elastic Modulus of a Multi-Wall Boron Nitride Nanotube. *Solid State Communications*, 1998, vol. 105, iss. 5, pp. 297-300.
4. Chowdhury R., Adhikari S. Boron-Nitride Nanotubes As Zeptogram-Scale Bionanosensors:

Theoretical Investigations. *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 2011, vol. 10, iss. 4, pp. 659-667.

5. Chowdhury R, Wang C.Y., Adhikari S., Scarpa F. Vibration and Symmetry-Breaking of Boron Nitride Nanotubes. *Nanotechnology*, 2010, vol. 21 (365702), pp. 1-9.

6. Ciofani G., Danti S., Alessandro A.A., Moscato S., Menciassi A. Assessing Cytotoxicity of Boron Nitride Nanotubes: Interference with the MTT Assay. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 2010, vol. 394, iss. 2, pp. 405-411.

7. Hauptmann P., Lucklum R., Puttmer A., Henning B. Ultrasonic Sensors for Process Monitoring and Chemical Analysis: State-of-the-Art and Trends. *Sensors and Actuators A-Physical*, 1998, vol. 67, pp. 32-48.

8. Ilic B., Czaplewski D., Craighead H.G., Neuzil P., Campagnolo C., Batt. C. Mechanical Resonant Immunospecific Biological Detector. *Applied Physics Letters*, 2000, vol. 77, iss. 3, pp. 450-452.

9. Panchal M.B., Upadhyay S.H. Boron Nitride Nanotube-Based Biosensing of Various Bacterium/Viruses: Continuum Modelling-Based Simulation Approach. *IET Nanobiotechnology*, 2014, vol. 8, iss. 3, pp. 143-148.

10. Panchal M.B., Upadhyay S.H. Boron Nitride Nanotube-Based Mass Sensing of Zeptogram Scale. *Spectroscopy Letters*, 2015, vol. 48, iss. 1, pp. 17-21.

11. Panchal M.B., Upadhyay S.H. Cantilevered Single Walled Boron Nitride Nanotube Based Nanomechanical Resonators of Zigzag and Armchair Forms. *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures*, 2013, vol. 50, pp. 73-82.

12. Thundat T., Oden P.I., Warmack R.J. Microcantilever Sensors. *Microscale Thermophys. Engineering*, 1997, vol. 1, iss. 3, pp. 185-199.

STUDY OF INTERACTION OF BORONITRIDE NANOSTRUCTURES WITH CARBON-CONTAINING MOLECULES

Natalia P. Boroznina

Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,
Department of Forensic Examination and Physical Materials Science,
Volgograd State University
boroznina.natalya@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Danil R. Erofeev

Student, Department of Forensic Examination and Physical Materials Science,
Volgograd State University
NMTb-191_127925@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Sergey V. Boroznin

Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Associate Professor,
Head of the Department of Forensic Examination and Physical Materials Science,
Volgograd State University
boroznin@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Lev V. Kozhitov

Doctor of Sciences (Engineering), Professor,
Department of Technology of Electronic Materials,
National University of Science and Technology "MISIS"
kozhitov@misis.ru
Prosp. Leninsky, 4, 119049 Moscow, Russian Federation

Abstract. The project is based on the cleaning properties of boron-nitride nanotubes and their use for industrial, medical, and environmental purposes. It shows that the use of new technologies, namely boron-based nanotubes, leads to high-quality purification of the air and the environment from carbon dioxide and sulfur dioxide gases. In confirmation of this, the corresponding graphs and calculations are presented. A visual simulation of how a boron-nitride nanotube interacts directly with a carbon dioxide molecule was also carried out. In the modern world, people's health is especially important, and every year the carbon dioxide content in the air is growing. Which in the end can lead to the following harmful consequences for us: weakness, drowsiness, headaches, problems with concentration. The proposed filters not only represent a new and unique way to improve the environment, but the improvement of the environment will be followed by the rise of other spheres of human life.

Key words: gas-phase molecules, carbon dioxide molecule, boron-nitride nanotubes, filters, nanosystem, interactions, composite nanomaterials, adsorption, nanoelectronics and microsystem engineering.