



www.volsu.ru

## ИННОВАЦИИ В МЕТАЛЛУРГИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

---

---

DOI: <https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2022.4.5>

УДК 544.2  
ББК 24.5



### ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОДИФИЦИРОВАННОЙ БОРОНИТРИДНОЙ НАНОСТРУКТУРЫ С МОЛЕКУЛОЙ АЦЕТОНА

**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  
NMTb-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

**Аннотация.** В данной работе приводится исследование, доказывающее, что использование нанотрубок на основе нитрида бора может лечь в основу создания нового сверхчувствительного сенсорного датчика способного реагировать на наличие микроколичества ацетона. В подтверждение сказанному, в статье приведено описание компьютерного процесса взаимодействия модифицированной нитрогруппой боронитрид-

ной нанотрубки с молекулой ацетона, представлены графики энергетического взаимодействия наносистем.

**Ключевые слова:** газофазные молекулы, молекула ацетона, боронитридные нанотрубки, датчики, наносистема, композитные наноматериалы, адсорбция, абсорбция.

Наномасштаб или наноразмер – это то, к чему сейчас устремлено внимание основного научного сообщества, так как именно при таких мельчайших размерах проявляются совершенно новые и уникальные химические и физические свойства материалов. Структуры таких размеров особенно востребованы в промышленных и медицинских отраслях. Нанотрубки из нитрида бора (БННТ) в отличие от своих «предшественников» – углеродных нанотрубок (УНТ) – имеют ряд преимуществ, таких как сохранение термомеханической стабильности при высокой температуре [3], аналогичную теплопроводность [5], стойкость к окислению (до 900 °С) [1], изоляторные свойства [6], широкая запрещенная зона (5–6 эВ) [4]. Благодаря этим характеристикам новые высокотехнологичные сенсоры, используемые для диагностики и лечения конкретных заболеваний, будут более качественными и надежными. Морфологический анализ конца нанотрубок из нитрида бора с использованием просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения может дать ценное представление о механизме роста при лазерной абляции при высоком температурном давлении, где на сегодняшний день можно получить материалы БННТ наилучшего качества. Влияние деплирования поверхностных напряжений и массового нагружения было исследовано Тундатов и другими, а затем описано в статье, посвященной микроантислеверным датчикам [2]. В настоящее время ведется активная работа использования БННТ в различных областях: в качестве рециркулируемого адсорбента для очистки воды, в качестве биологического зонда, носителя лекарств, или биологического канала в биосенсоре как инновационного наноустройства для решения проблем наномедицины.

Современный мир постоянно меняется и организм человека постоянно сталкивается с новыми, и не всегда полезными изменениями в окружающей среде. Частые изменения в природе и в свою очередь в атмосфере влекут за собой неизбежные проблемы со здоро-

вьем. Определение наличия вредных газов в помещениях, предназначенных для различных целей, является достаточно актуальной задачей. Решить ее возможно при помощи высокотехнологичных приборов, которые могут очень эффективно реагировать на микроколичество вредных веществ. В таких областях как пирометаллургия, гидрометаллургия и другие работа человека ведется в очень неблагоприятных экологических условиях, что может привести к развитию заболеваний, к примеру, ишемическая болезнь сердца, инсульт, сахарный диабет, хроническая обструктивная болезнь легких и др. Химические соединения, выделяющиеся в виде газов из твердых или жидких веществ, вредны для человека, следовательно, необходима работа, направленная на снижение их количества.

Для контроля здоровья человека возможно установление различных маркеров заболеваний, которые могут находиться в выдыхаемом воздухе. К таким маркерам относится ацетон, он может свидетельствовать о наличии инфекционного заболевания или сахарного диабета.

Из вышесказанного можно сделать вывод, что создание и техническое развитие высокоэффективных энергосберегающих сенсорных датчиков является очень актуальной задачей для исследования. В основе работы таких датчиков обратная связь происходит за счет протекания физико-химических процессов, а нанокomпоненты улучшают качество анализа воздуха. Такие датчики могут применяться в различных областях деятельности человека, начиная от медицины и заканчивая экологией.

Исследование показало преимущество граничного модифицирования одностенной нанотрубки включающей в себя бор к которой также на внешнюю границу присоединена группа NO<sub>2</sub>. В данной работе была проведена оценка адсорбционной и сенсорной чувствительности данной системы к присутствию газофазных молекул, а именно к молекуле ацетона.

Нитрогруппа ( $\text{NO}_2$ ) была выбрана в соответствии со следующими факторами: данная функциональная группа эффективно притягивает к себе электрон, то есть происходит, так называемое «оттяжение» на себя электронной плотности, что в свою очередь оказывает усиливает адсорбционные свойства всего комплекса БННТ- $\text{NO}_2$ . Таким образом, можно сделать вывод, что данная работа, дополняя знания о сенсорах на основе био и нанотехнологий, будет полезна не только в теоретическом плане, но и в качестве базиса для создания сенсорных наноустройств на практике. Представленное исследование может дать существенный толчок для развития сенсоров на основе новых технологий в медицинских и технических областях.

### Исследовательская часть

Проведено исследование с боронитридной нанотрубкой типа zig-zag (6,0), которая была гранично-модифицирована нитрогруппой. Функциональная группа была присоединена к атому бора нанотрубки под углом  $173,4^\circ$ . Длина связи между нитрогруппой и боронитридной нанотрубкой составила  $1,4 \text{ \AA}$ . Первым этапом исследования было моделирование взаимодействия между получившейся наносистемой и молекулой ацетона. Моделирование носило пошаговый характер присоединения молекулы ацетона к трубке с шагом  $0,1 \text{ \AA}$  (рис. 1).

Расстояние взаимодействия составляло расстояние от 1 до  $5,2 \text{ \AA}$ . В результате расчетов было получено подтверждение наличия сорбционного взаимодействия между боронитридной наносистемой и молекулой ацетона. Была рассчитана энергия связи, состав-

ляющая  $0,041 \text{ эВ}$  на расстоянии  $4 \text{ \AA}$  от атома кислорода нитрогруппы. По результатам исследования построен график зависимости энергии взаимодействия от положения молекулы относительно наносистемы (рис. 2). Далее было проведено компьютерное моделирование процесса сканирования воображаемой поверхности, на которой присутствует молекула  $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ . Подобные расчеты необходимы для подтверждения эффективности сенсорного датчика при обнаружении веществ в пространстве. Результаты расчета зависимости энергии взаимодействия от положения молекулы относительно наносистемы БННТ- $\text{CO}_2$  показаны на рисунке 3.

### Заключение

Проведение исследований, заключающихся в компьютерном моделировании процессов присоединения молекулы ацетона к модифицированной нитрогруппой границе полубесконечной боронитридной нанотрубки позволили провести расчеты основных физико-химических характеристик системы «Ацетон – модифицированная БННТ». Был проведен расчет энергии взаимодействия молекулы с наносистемой и по полученным результатам было смоделировано сканирование произвольной поверхности, содержащей молекулу ацетона, установлены основные электронно-энергетические характеристики данного процесса.

Проанализировав полученные данные, было установлено, что между исследуемой молекулой и наноконкомплексом взаимодействие реализуется за счет слабых сил Ван-дер-Ваальса. Такое взаимодействие позволит судить о многократном использовании датчика без его химического разрушения и изменения структуры.

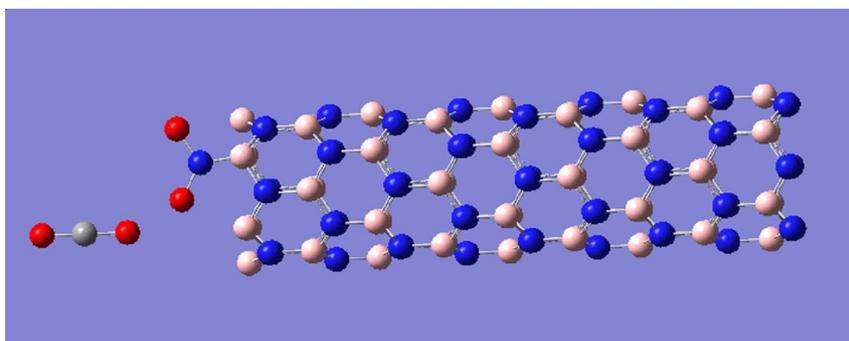


Рис. 1. Изображение моделирования сканирования воображаемой поверхности системой БННТ- $\text{NO}_2$ , содержащей молекулу углекислого газа

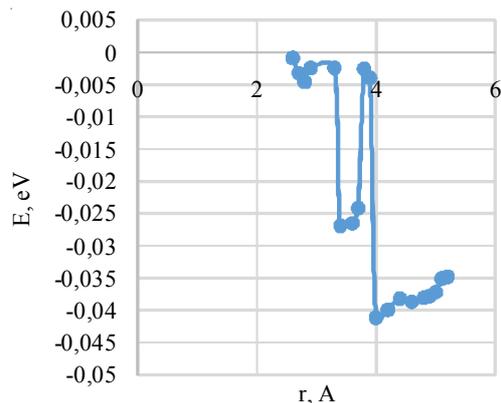


Рис. 2. Изображение зависимости энергии взаимодействия от положения молекулы относительно наносистемы

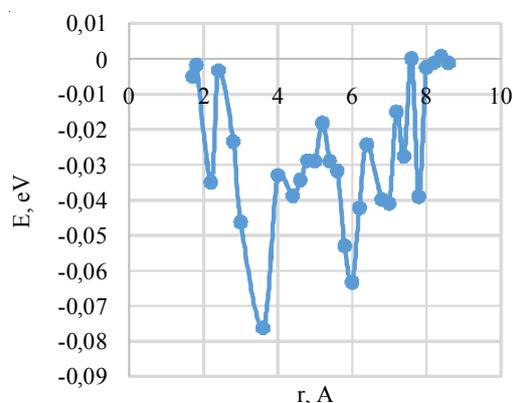


Рис. 3. Изображение зависимости энергии взаимодействия от положения молекулы относительно наносистемы при моделировании сканирования произвольной поверхности, содержащей молекулу ацетона

## REFERENCES

1. Chen Y. Boron Nitride Nanotubes: Pronounced Resistance to Oxidation. *Applied Physics Letters*, 2004, vol. 84, no. 13, pp. 2430-2432.
2. Ciofani G., Danti S., Alessandro D. D', Moscato S., Mencias A. Assessing Cytotoxicity of Boron Nitride Nanotubes: Interference with the MTT Assay. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 2010, vol. 394, no. 2, pp. 405-411.
3. Dumitrică T., Yakobson B.I. Rate Theory of Yield in Boron Nitride Nanotubes. *Physical Review B*, 2005, vol. 72, no. 3, pp. 035418.
4. Lauret J.S. Optical Transitions in Single-Wall Boron Nitride Nanotubes. *Physical Review Letters*, 2005, vol. 94, no. 3, pp. 037405.
5. Stewart D.A., Savić I., Mingo N. First-Principles Calculation of the Isotope Effect on Boron Nitride Nanotube Thermal Conductivity. *Nano Letters*, 2009, vol. 9, no. 1, pp. 81-84.
6. Zhi C. Towards Thermoconductive, Electrically Insulating Polymeric Composites with Boron Nitride Nanotubes as Fillers. *Advanced Functional Materials*, 2009, vol. 19, no. 12, pp. 1857-1862.

**INVESTIGATION OF THE INTERACTION  
OF A MODIFIED BORONITRIDE NANOSTRUCTURE  
WITH AN ACETONE MOLECULE**

**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

**Abstract.** This article presents a study proving that the use of boron nitride-based nanotubes can form the basis for the creation of a new hypersensitive sensor capable of responding to the presence of a trace amount of acetone. In confirmation of what has been said, the article describes the computer process of interaction of a modified boronitride nanotube nitro group with an acetone molecule, graphs of the energy interaction of nanosystems are presented. The nitro group (NO<sub>2</sub>) was chosen according to the following factors: this functional group effectively attracts an electron to itself, that is, the so-called “pulling” of the electron density on itself occurs, which in turn enhances the adsorption properties of the entire BNNT-NO<sub>2</sub> complex. Thus, it can be concluded that this work, complementing the knowledge of sensors based on bio and nanotechnology, will be useful not only in theoretical terms, but also as a basis for creating sensor nanodevices in practice. The presented study can provide a significant impetus for the development of sensors based on new technologies in the medical and technical fields.

**Key words:** gas-phase molecules, acetone molecule, boronitride nanotubes, sensors, nanosystem, composite nanomaterials, adsorption, absorption.