



www.volsu.ru



DOI: <https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2024.1.1>

УДК 544.2-022.532

ББК 24.816.1

## БИОСЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ОДНОМЕРНЫХ МОДИФИЦИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР<sup>1</sup>

**Евгений Сергеевич Дрючков**

Старший преподаватель, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,  
Волгоградский государственный университет  
dryuchkov@volsu.ru  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

**Сергей Владимирович Борознин**

Доктор 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

**Ирина Владимировна Запороцкова**

Доктор физико-математических наук, профессор,  
директор института приоритетных технологий,  
Волгоградский государственный университет  
zaporotskova@volsu.ru  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

**Антон Раджабович Эль Занин**

Лаборант, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,  
Волгоградский государственный университет  
elantony@mail.ru  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

© Дрючков Е.С., Борознин С.В., Запороцкова И.В., Эль Занин А.Р., Борознина Н.П., Звонарева Д.А., 2024

**Наталья Павловна Борознина**

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

**Дарья Александровна Звонарева**

Ассистент, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,  
Волгоградский государственный университет  
zvonaeva@volsu.ru  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

**Аннотация.** В данной статье представлены результаты теоретического исследования свойств двух типов углеродных нанотрубок («кресло» и «зигзаг») с использованием квантово-химического метода теории функционала плотности в рамках модели молекулярного кластера. Исследован процесс внешней адсорбции оксидов железа и никеля на поверхности нанотрубок. Также для эффективности использования углеродных нанотрубок, содержащих замещающие атомы бора, в качестве биосенсоров, проведено изучение их взаимодействия с молекулой ацетона. Определены основные энергетические характеристики этих процессов, такие как расстояние и энергия адсорбции. Для этого был проведен модельный эксперимент по добавлению оксидов железа и никеля, а также взаимодействию биосенсорного нанодатчика на основе бороуглеродной нанотрубки с молекулой ацетона.

**Ключевые слова:** сенсорная активность, бороуглеродные нанотрубки, наноструктуры, медицинские технологии.

**Введение**

Обнаружение биологических молекул является ключевым для здравоохранения, медицинских нужд, обеспечения экологической безопасности и защиты окружающей среды, поскольку позволяет решать широкий спектр задач – от предупреждения заболеваний до формирования новых лекарственных препаратов. Соответственно, создание и модифицирование используемого для данных целей оборудования с целью повышения чувствительности, а также простоты проведения анализа позволит человечеству существенно повысить свое качество жизни. Также особой важностью обладает селективность наносенсора в отношении конкретных объектов. Биосенсоры, совмещающие распознавание биообъектов с передачей этого в изменение физических или химических свойств, являются многообещающими в промышленном применении в силу возможности

работать с низкоразмерными структурами. С открытия углеродных нанотрубок (далее – УНТ) в 1991 г. они стали перспективным объектом исследования в силу своей большой удельной поверхности и уникальных электрических, механических и электрохимических свойств. Установлено, что электрические и оптические свойства углеродных нанотрубок чувствительны к взаимодействию с биологическими молекулами. Данная особенность привела ученых к выводу, что УНТ могут быть перспективным материалом для использования в качестве биосенсоров. Большая удельная поверхность углеродных наноструктур позволяет ожидать быстрого отклика системы на детектирование нанообъектов даже при малых их концентрациях. То есть УНТ выступают в качестве основного базиса для сверхчувствительных биосенсоров следующего поколения. Биосенсоры на основе углеродных нанотрубок могут применяться для селективного обнаружения

вирусов [3; 6; 7; 9; 19; 21; 28; 32; 35; 36], бактериальных [2; 4; 5; 8; 13; 27; 29; 34; 38] и грибковых агентов [12; 37], веществ, имеющих важное диагностическое значение, например, мочевины [22], холестерина [10; 15; 26], содержания глюкозы в различных биологических средах [11; 14; 17; 18; 30; 31; 33; 39], а также маркеров заболеваний, например, рака [1; 16; 20; 23] или сердечно-сосудистых заболеваний [24; 25]. При сравнительном анализе сенсоров на основе углеродных нанотрубок и наиболее распространенных в практике становятся очевидными следующие плюсы нового материала:

1. Высокая чувствительность благодаря большой удельной поверхности полый нанотрубки, УНТ могут быть использованы для иммобилизации ферментов, сохраняющих высокую биологическую активность.

2. Быстрое время отклика, УНТ обладают выдающейся способностью опосредовать быструю кинетику переноса электронов, что ускорит быстрое действие системы при детектировании искомого биообъекта.

3. Более низкий потенциал окислительно-восстановительной реакции и меньшие эффекты загрязнения поверхности.

4. Высокая стабильность и более длительный срок службы.

Все вышесказанное обуславливает актуальность теоретического исследования взаимодействия оксидов металлов и углеродных нанотрубок. Это позволит уточнить детали данного процесса: геометрические и энергетические. Целью настоящей работы является изучение процесса присоединения оксида железа и никеля к поверхности углеродной нанотрубки различной геометрии и выявление влияния подобного модифицирования на электронные свойства материала. Также интересной исследовательской

задачей является изучение сканирования произвольной поверхности, содержащей молекулу ацетона, биосенсорным нанодатчиком на основе боросодержащей углеродной нанотрубки. Проведенные модельные эксперименты позволят предсказать строение датчиков биосенсоров и заложить базис для дальнейших исследований в области взаимодействия декорированных нанотрубок с биообъектами.

### Методика проведения модельного эксперимента

Рассмотрение взаимодействия углеродных нанотрубок и оксида железа II, III) производилось в рамках кластерной модели. В качестве объектов исследования выступали углеродные нанотрубки типа «зигзаг» (6,0) и «кресло» (6,6). Длина кластера выбиралась такой, чтобы при нахождении адсорбционного центра посередине нанотрубки можно было исключить влияние граничных эффектов. Для компенсации оборванных на границах нанотрубки химических связей ее концы замыкались псевдоатомами, в качестве которых выступали атомы водорода. Предварительно была проведена оптимизация геометрии как нанотрубок обоих типов, так и кластера оксида железа  $Fe_3O_4$ . Пошаговое приближение  $Fe_3O_4$  по нормали к поверхности нанотрубки производилось в трех положениях – один из атомов железа оксида располагался: 1) над атомом углерода; 2) над центром связи углерод – углерод; 3) над центром гексагона (рис. 1). На каждом этапе приближения фиксировалась энергия системы для построения профиля поверхности потенциальной энергии взаимодействия. По нему впоследствии определялась энергия адсорбции  $E_a$  и расстояние  $r_a$ , на котором образуется связь. Геометрия си-

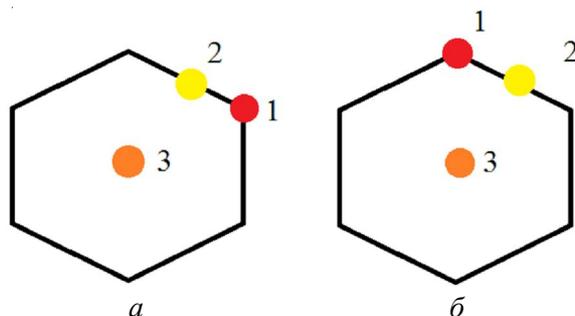


Рис. 1. Рассматриваемые варианты расположения одного из атомов железа оксида  $Fe_3O_4$  над поверхностью нанотрубки типа «зигзаг» (а) и «кресло» (б)

стемы оксид железа – углеродная нанотрубка, соответствующая условию минимума потенциальной энергии, оптимизировалась.

Все расчеты производились в рамках теории функционала плотности с использованием функционала B3LYP/6-31G. В качестве величины, определяющей электронные свойства углеродной нанотрубки, была выбрана ширина запрещенной зоны  $\Delta E_g$ , значение которой рассчитывалось как разность между энергией нижней вакантной молекулярной орбитали  $E_{LUMO}$  и энергией верхней заполненной молекулярной орбитали  $E_{HOMO}$ :

$$\Delta E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}$$

Для улучшения сенсорных свойств нанотрубки ее поверхность была функционализована оксидом никеля путем присоединения NiO перпендикулярно оси нанотрубки к трем возможным центрам поверхности УНТ с шагом 0,1 Å: 1 – атом углерода (С) поверхности; 2 – центр связи С–С; 3 – центр гексагона. Функциональная группа располагалась при-

мерно в центре кластера углеродной нанотрубки для исключения эффекта влияния краевых атомов. Пример модели функционализированной УНТ на центр гексагона представлен на рисунке 2.

Также был моделирован процесс взаимодействия бороуглеродной нанотрубки модифицированной функциональными группами с молекулой  $C_3H_6O$ . Молекула ацетона была ориентирована атомом кислорода к краевым атомам функциональных групп и пошагово двигалась к наносистеме «ВС-активная группа». Движение происходило параллельно оси нанотрубки, от расстояния 7 Å до 2 Å, при шаге в 0,1 Å.

В результате проведенного модельного эксперимента на основании полученных данных были построены профили поверхности потенциальной энергии процессов.

Рассмотрим случай взаимодействия нанотрубки типа «зигзаг» с оксидом железа (II, III). Мы можем констатировать наличие минимума энергии во всех трех случаях приближения (рис. 3). Соответственно, адсорб-

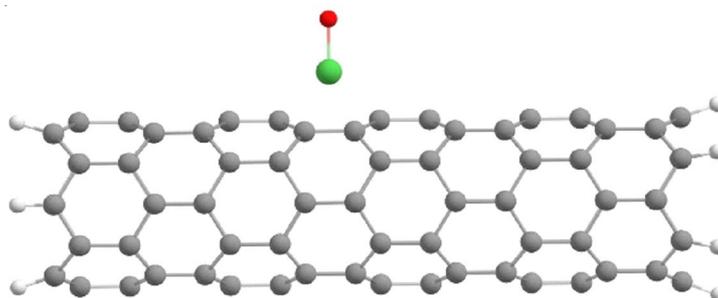


Рис. 2. Модель функционализированной оксидом никеля УНТ на центр гексагона поверхности комплекса  
*Примечание.* Зеленым цветом обозначен атом никеля, красным – кислород, серым – углерод.

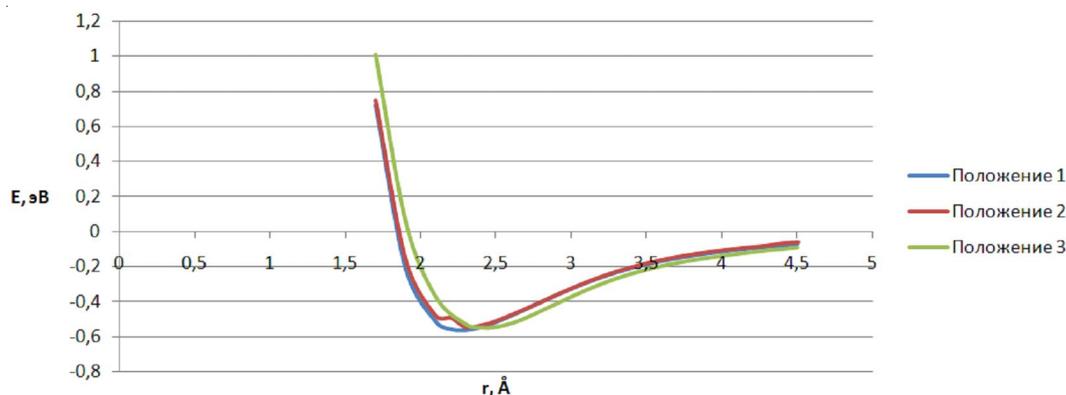


Рис. 3. Профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия нанотрубки (6,0) («зигзаг») и оксида железа (II, III)

ция оксида железа на поверхности нанотрубки может происходить и над атомом, и над центром связи углерод – углерод, и над центром гексагона. При этом в зависимости от положения адсорбции энергия процесса  $E_a$  составляет от 0,54 до 0,56 эВ, а расстояние, на котором образуется связь,  $r_a$  – от 2,3 до 2,4 Å. Значения энергии адсорбции в различных положениях отличаются незначительно, соответственно, вероятна адсорбция в любое из рассмотренных положений.

Перейдем к случаю взаимодействия нанотрубки типа «кресло» с оксидом железа (II, III). По характеру адсорбции здесь наблюдается ситуация, аналогичная взаимодействию оксида железа и нанотрубки типа «зигзаг»: во всех положениях адсорбции наблюдается наличие минимума (рис. 4). Энергия адсорбции  $E_a$  находится в пределах от 0,57 до 0,85 эВ, а расстояние адсорбции – от 2,1 до 2,2 Å. В данной ситуации адсорбция будет происходить преимущественно в положения 1 и 2, о чем свидетельствует большая глубина энергетического минимума в этих положениях по сравнению с минимумом в положении 3.

При функционализации нанотрубки оксидом никеля (ориентируясь атомом никеля к поверхности УНТ) на атом углерода, минимальное расстояние, на котором образуется связь между нанотрубкой и NiO, равно 1,8 Å, что соответствует энергии –2,58 эВ. При функционализации на центр связи C–C минимальное расстояние, на котором образуется связь между нанотрубкой и оксидом никеля, равно 1,8 Å, что соответствует энергии –3,17 эВ.

При функционализации на центр гексагона, минимальное расстояние, на котором образуется связь между нанотрубкой и оксидом никеля, равно 1,4 Å, что соответствует энергии –3,99 эВ. При этом во всех трех случаях происходит перенос электронной плотности между нанотрубкой и оксидом никеля. Однако наиболее энергетически выгодным расположением оказалось положение оксида никеля над центром гексагона.

К полученному комплексу «УНТ–NiO», а именно с шагом, равным 0,1 Å к атому кислорода функциональной группы, приближались молекулы угарного и углекислого газов для определения расстояний и энергии взаимодействия. По результатам моделирования построены энергетические кривые, отражающие расстояние взаимодействия и соответствующую энергию взаимодействия атомов щелочных металлов и функционализированной углеродной нанотрубкой.

Анализ результатов показал, что во взаимодействии угарного газа с модифицированной. Датчик, модифицированный оксидом никеля УНТ происходит на расстоянии 1,2 Å с энергией взаимодействия равной –2,48 эВ. Взаимодействие с углекислым газом происходит на расстоянии 3,4, что соответствует энергии взаимодействия равной –3,13 эВ.

Также было проведено компьютерное моделирование воображаемой поверхности, содержащей молекулу ацетона. В это случае молекула двигалась перпендикулярно оси нанотрубки мимо краевых атомов функциональных групп (см. рис. 5).

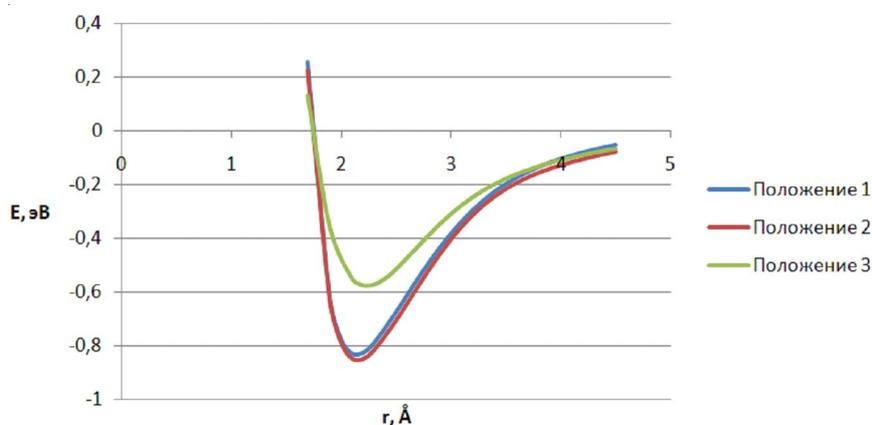


Рис. 4. Профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия нанотрубки (6,6) («кресло») и оксида железа (II, III)

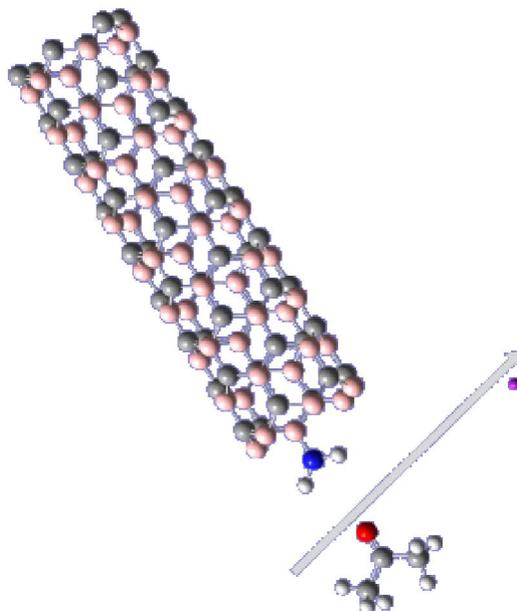


Рис. 5. Модель процесса сканирования пространства, содержащего молекулу  $C_3H_6O$

Анализ полученных данных показал, что наноконкомплекс проявляет сорбционную и сенсорную активность в отношении молекулы ацетона. На рисунке 3 представлена зависимость энергии от расположения молекула ацетона относительно краевых атомов аминогруппы. минимумы энергии соответствуют положению молекулы под атомами водорода группы  $-NH_2$ .

### Заключение

В рамках настоящей работы были рассмотрены некоторые геометрические и энергетические аспекты присоединения оксида железа (II, III) к поверхности углеродных нанотрубок (6,6) и (6,0) в трех положениях: над атомом углерода, над центром связи углерод-углерод, над центром гексагона. Были определены значения энергии адсорбции и расстояния, на которых происходит данный процесс. Обсуждены вопросы смещения электронной плотности на основе анализа зарядового распределения. Оценено влияние адсорбции оксида железа на электронные свойства нанотрубок, для некоторых случаев предложено объяснение механизмов изменения ширины запрещенной зоны на основе графиков функций плотности состояний.

Было установлено, что для обоих типов нанотрубок адсорбция оксида железа на по-

верхности имеет место во всех рассмотренных положениях. Для нанотрубки типа «зигзаг» адсорбция оксида железа вероятна в любое из рассмотренных положений, в то время как для нанотрубки типа «кресло» положение над центром гексагона является энергетически невыгодным, соответственно, адсорбция в данном случае преимущественно будет идти в другие положения. Отмечается перераспределение электронной плотности, при этом на поверхности нанотрубки возникают дополнительные носители заряда.

Уменьшение ширины запрещенной зоны в случае адсорбции в положения 1 и 2 нанотрубки (6,6) связано со снижением дна зоны проводимости из-за возникновения в запрещенной зоне примесных уровней; адсорбция в положении 3 практически не влияет на ширину запрещенной зоны. Для нанотрубки (6,0) наблюдается противоположная картина – ширина запрещенной зоны увеличивается в результате адсорбции оксида железа во всех трех положениях.

Модифицированная оксидом никеля нанотрубка показала способность обнаруживать молекулы исследуемых в работе газов и взаимодействовать с ними. Взаимодействие с углекислым газом на достаточно дальнем расстоянии можно квалифицировать как слабое ван-дер-Ваальсовое, что позволяет многократно использовать датчик. Полученный комплекс

способен регистрировать изменение значения барьера Шоттки между электродами сенсорного устройства и системой «УНТ–NiO». Подобные системы могут выступать в качестве чувствительных элементов сенсорных устройств и открывают перспективу их использования в биомедицинских применениях.

По результатам проведенного исследования, выполненного с помощью компьютерного моделирования процессов взаимодействия и сканирования, установлена возможность применения гранично-модифицированной функциональными группами бороуглеродной нанотрубки в устройствах нанoeлектроники, которые используются для определения микроколичества веществ.

В ходе изучения механизма взаимодействия тубулярной системы «BC нанотрубка – аминная группа NH<sub>2</sub>» с идентифицируемыми веществами, получены значения энергии, определяющие наличие физической адсорбции молекул. Следовательно, можно судить о существовании слабых ван-дер-Ваальсовых сил, что доказывает перспективность использования данного наноконструкта в виде чувствительных элементов датчиков.

Таким образом, мы установили, что путем модифицирования углеродных нанотрубок путем присоединения к их поверхности оксидов металлов, функциональных групп и замещающих атомов бора, возможно управление их электронными свойствами, в частности, шириной запрещенной зоны. Учитывая наличие зависимости между шириной запрещенной зоны и показателем преломления [34], становится возможным применение рассмотренных комплексов для оптических приложений. Подобные комплексы также перспективны для использования в качестве биосенсоров, позволяющих детектировать присутствие в среде микроколичеств различных веществ на основании указанных закономерностей, что в конечном счете делает их чрезвычайно полезными для экологических и медицинских исследований.

#### ПРИМЕЧАНИЕ

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание № FZUU-2023-0001).

#### REFERENCES

1. Aasi A., Aasi E., Mehdi Aghaei S., Panchapakesan B. CNT Biodevices for Early Liver Cancer Diagnosis Based on Biomarkers Detection – A Promising Platform. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 2022, vol. 114, p. 108208.
2. Abedi R., Raof J.B., Mohseni M., Hashkavayi A.B. Sandwich-Type Electrochemical Aptasensor for Highly Sensitive and Selective Detection of Pseudomonas Aeruginosa Bacteria Using a Dual Signal Amplification Strategy. *Bioelectrochemistry*, 2023, vol. 150, p. 108332.
3. Ahmed S.R., Kim J., Suzuki T., Lee J., Park E.Y. Enhanced Catalytic Activity of Gold Nanoparticle-Carbon Nanotube Hybrids for Influenza Virus Detection. *Biosens. Bioelectron.*, 2016, vol. 85, pp. 503-508. DOI: 10.1016/j.bios.2016.05.050
4. Ali M.R., Bacchu M.S., Das S. et al. Label Free Flexible Electrochemical DNA Biosensor for Selective Detection of Shigella Flexneri in Real Food Samples. *Talanta*, 2023, vol. 253, p. 123909.
5. Behoftadeh F., Faezi Ghasemi M., Mojtahedi A., Issazadeh K., Golshekan M., Alaei S. Development of a Newly Designed Biosensor Using Multi-Walled Carbon Nanotubes (MWCNTs) with Gold Nanoparticles (AuNPs) in the Presence of Acetaminophen for Detection of Escherichia coli. *Archives of Microbiology*, 2023, vol. 205, no. 2, p. 70.
6. Cabral D.G.A., Lima E.C.S., Dutra R.F. A Label-Free Electrochemical Immunosensor for Hepatitis B Based on Hyaluronic Acid-Carbon Nanotube Hybrid Film. *Talanta*, 2016, vol. 148, pp. 209-215. DOI: 10.1016/j.talanta.2015.10.083
7. Cui F., Zhou Z., Zhou H.S. Molecularly Imprinted Polymers and Surface Imprinted Polymers Based Electrochemical Biosensor for Infectious Diseases. *Sensors*, 2020, vol. 20(4), p. 996. DOI: 10.3390/s20040996
8. Ertaş T., Dinç B., Üstünsoy R., Eraslan H., Ergenç A.F., Bektaş M. Novel Electrochemical Biosensor for Escherichia coli Using Gold-Coated Tungsten Wires and Antibody Functionalized Short Multiwalled Carbon Nanotubes. *Instrumentation Science & Technology*, 2023, pp. 1-16.
9. Fu Y. Chemiresistive Biosensors Based on Carbon Nanotubes for Label-Free Detection of DNA Sequences Derived from Avian Influenza Virus H5N1. *Sensors and Actuators B Chemical*, 2017, vol. 249, pp. 691-699. DOI: 10.1016/j.snb.2017.04.080
10. Ghanei Agh Kaariz D., Darabi E., Elahi S.M. Fabrication of Au/ZnO/MWCNTs Electrode and Its Characterization for Electrochemical Cholesterol Biosensor. *Journal of Theoretical and Applied Physics*, 2020, vol. 14, pp. 339-348.
11. Han D.K., Li C.A., Song S.H. et al. Electroanalytical Biosensor Based on GOx/FCA/PEG-

Modified SWCNT Electrode for Determination of Glucose. *Journal of Analytical Science and Technology*, 2023, vol. 14, no. 1, p. 9.

12. Hassan R.Y.A. et al. Carbon Nanotube-Based Electrochemical Biosensors for Determination of *Candida albicans* quorum Sensing Molecule. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2017, vol. 244, pp. 565-570.

13. Hassan R.Y.A., Wollenberger U. Direct Determination of Bacterial Cell Viability Using Carbon Nanotubes Modified Screen Printed Electrodes. *Electroanalysis*, 2019, vol. 31, no. 6, pp. 1112-1117.

14. Huang G.K. et al. Acid-Treated Carbon Nanotubes/Polypyrrole/Fluorine-Doped Tin Oxide Electrodes with High Sensitivity for Saliva Glucose Sensing. *Diamond and Related Materials*, 2022, vol. 129, p. 109385.

15. Kavacık M., Kilic M.S. Square Wave Voltammetric Detection of Cholesterol with Biosensor Based on Poly (Styrene-caprolactone)/MWCNTs Composite. *Biotechnology and Applied Biochemistry*, 2023, vol. 70, iss. 3, pp. 1137-1148.

16. Li L., Liu X., Wei T., Wang K., Zhao Z., Cao J., Liu Y., Zhang Z. Carbon Nanotube Field-Effect Transistor Biosensor with an Enlarged Gate Area for Ultra-Sensitive Detection of a Lung Cancer Biomarker. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2023, vol. 15, no. 22, pp. 27299-27306.

17. Lin M.H., Gupta S., Chang C. et al. Carbon Nanotubes/Polyethylenimine/Glucose Oxidase as a Non-Invasive Electrochemical Biosensor Performs High Sensitivity for Detecting Glucose in Saliva. *Microchemical Journal*, 2022, vol. 180, p. 107547.

18. Liu J., Sun Sh., Shang H., Lai J., Zhang L. Electrochemical Biosensor Based on Bionzyme and Carbon Nanotubes Incorporated into an Oscomplex Thin Film for Continuous Glucose Detection in Human Saliva. *Electroanalysis*, 2016, vol. 28, no. 9, pp. 2016-2021.

19. Lu Q. Flexible Paper-Based Ni-MOF Composite/ AuNPs/CNTs Film Electrode for HIV DNA Detection. *Biosens. Bioelectron.*, 2021, vol. 184, p. 113229. DOI: 10.1016/j.bios.2021.113229

20. Ma S., Zhang Y., Ren Q., Wang X., Zhu J., Yin F., Li Z., Zhang M. Tetrahedral DNA Nanostructure Based Biosensor for High-Performance Detection of Circulating Tumor DNA Using All-Carbon Nanotube Transistor. *Biosensors and Bioelectronics*, 2022, vol. 197, p. 113785.

21. Ma Y., Shen X.-L., Zeng Q., Wang H.-S., Wang L.-S. A Multi-Walled Carbon Nanotubes Based Molecularly Imprinted Polymers Electrochemical Sensor for the Sensitive Determination of HIV-p24. *Talanta*, 2017, vol. 164, pp. 121-127. DOI: 10.1016/j.talanta.2016.11.043

22. Magar H.S., Hassan R.Y.A., Abbas M.N. Non-Enzymatic Disposable Electrochemical Sensors

Based on CuO/Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@ MWCNTs Nanocomposite Modified Screen-Printed Electrode for the Direct Determination of Urea. *Scientific Reports*, 2023, vol. 13, no. 1, p. 2034.

23. Makableh Y., Athamneh T., Ajlouni M., Hijazi S., Alnaimi A. Enhanced Response and Selective Gold Nanoparticles/Carbon Nanotubes Biosensor for the Early Detection of HER2 Biomarker. *Sensors and Actuators Reports*, 2023, vol. 5, p. 100158.

24. Nandeshwar R., Illa M.P., Khandelwal M., Tallur S. Enzymatic Degradation of Bacterial Cellulose Derived Carbon Nanofibers (BC-CNF) by Myeloperoxidase (MPO): Performance Evaluation for Biosensing. *Biosensors and Bioelectronics: X*, 2022, vol. 12, p. 100252.

25. Nandeshwar R., Tallur S. Electrochemical Detection of Myeloperoxidase (MPO) in Blood Plasma with Surface-Modified Electroless Nickel Immersion Gold (ENIG) Printed Circuit Board (PCB) Electrodes. *medRxiv*, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1101/2023.09.03.23295003>

26. Nawaz M.A.H., Majdinasab M., Latif U., Nasir M., Gokce G., Anwar M.W., Hayat A. Development of a Disposable Electrochemical Sensor for Detection of Cholesterol Using Differential Pulse Voltammetry. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2018, vol. 159, pp. 398-405.

27. Qu X. et al. A Self-Powered Biosensing System Based on Triboelectric Nanogenerator for Rapid Bacterial DNA Detection. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2023, vol. 390, p. 133917.

28. Shao W., Shurin M.R., Wheeler S.E., He X., Star A. Rapid Detection of SARS-CoV-2 Antigens Using HighPurity Semiconducting Single-Walled Carbon NanotubeBased Field-Effect Transistors. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2021, vol. 13 (8), pp. 10321-10327. DOI: 10.1021/acsami.0c22589

29. Shumeiko V., Zaken Yu., Hidas G., Paltiel Y., Bisker G., Shoseyov O. Peptide-Encapsulated Single-Wall Carbon Nanotube-Based Near-Infrared Optical Nose for Bacteria Detection and Classification. *IEEE Sensors Journal*, 2022, vol. 22, no. 7, pp. 6277-6287.

30. Silva M.N.T., Rocha R.G., Richter E.M., Munoz R.A.A., Nossol E. Nickel Oxy-Hydroxy/Multi-Wall Carbon Nanotubes Film Coupled with a 3D-Printed Device as a Nonenzymatic Glucose Sensor. *Biosensors*, 2023, vol. 13, no. 6, p. 646.

31. Singh A.K., Jaiswal N., Tiwari I., Ahmad M., Silva S.R.P. Electrochemical Biosensors Based on in Situ Grown Carbon Nanotubes on Gold Microelectrode Array Fabricated on Glass Substrate for Glucose Determination. *Microchimica Acta*, 2023, vol. 190, no. 2, p. 55.

32. Somvanshi S.B., Kharat B., Saraf T.S., Somvanshi S.B., Shejul S.B., Jadhav K.M. Multifunctional Nanomagnetic Particles Assisted Viral RNA-Extraction Protocol for Potential Detection of

COVID-19. *Mater. Res. Innovations*, 2021, vol. 25 (3), pp. 169-174. DOI: 10.1080/14328917.2020.1769350

33. Sriwichai S., Phanichphant S. Fabrication and Characterization of Electrospun Poly (3-Aminobenzylamine)/Functionalized Multi-Walled Carbon Nanotubes Composite Film for Electrochemical Glucose Biosensor. *Express Polymer Letters*, 2022, vol. 16, no. 4, pp. 439-450.

34. Sun Q., Ma C., Li W., Li X., Sakamoto K., Liu X., Okamoto A., Minari T. Fully Printed Low-Voltage Field-Effect Transistor Biosensor Array for One-Drop Detection of *Shewanella oneidensis* MR-1 Bacteria. *ACS Applied Electronic Materials*, 2023, vol. 5, no. 5, pp. 2558-2565.

35. Thanihaichelvan M. Selective and Electronic Detection of COVID-19 (Coronavirus) Using Carbon Nanotube Field Effect Transistor-Based Biosensor: A Proof-Of-Concept Study. *Mater. Today: Proc.*, 2021, p. S2214785321035641. DOI: 10.1016/j.matpr.2021.05.011

36. Tian J. A High Sensitive Electrochemical Avian Influenza Virus H7 Biosensor Based on CNTs/MoS<sub>x</sub> Aerogel. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 2017, vol. 12 (1), pp. 2658-2668. DOI: 10.20964/2017.04.30

37. Villamizar R.A., Maroto A., Rius F.X. Improved Detection of *Candida Albicans* with Carbon Nanotube Field-Effect Transistors. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2009, vol. 136, no. 2, pp. 451-457.

38. Wang C. Self-Powered Biosensing System Driven by Triboelectric Nanogenerator for Specific Detection of Gram-Positive Bacteria. *Nano Energy*, 2022, vol. 93, p. 106828.

39. Zhang W., Du Y., Wang M.L. On-Chip Highly Sensitive Saliva Glucose Sensing Using Multilayer Films Composed of Single-Walled Carbon Nanotubes, Gold Nanoparticles, and Glucose Oxidase. *Sensing and Bio-Sensing Research*, 2015, vol. 4, pp. 96-102.

## BIOSENSORS BASED ON ONE-DIMENSIONAL MODIFIED CARBON NANOSTRUCTURES

**Evgeniy S. Dryuchkov**

Senior Lecturer, Department of Forensic Examination and Physical Materials Science,  
Volgograd State University  
dryuchkov@volsu.ru  
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

**Sergey V. Boroznin**

Doctor 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

**Irina V. Zaporotskova**

Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,  
Director of the Institute of Priority Technologies,  
Volgograd State University  
zaporotskova@volsu.ru  
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

**Anton R. El Zanin**

Laboratory Assistant, Department of Forensic Examination and Physical Materials Science,  
Volgograd State University  
elantony@mail.ru  
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

**Natalia P. Boroznina**

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

**Daria A. Zvonareva**

Assistant, Department of Forensic Examination and Physical Materials Science,  
Volgograd State University  
zvonareva@volsu.ru  
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

**Abstract.** This paper presents the results of a theoretical study of the properties of two types of carbon nanotubes using the quantum-chemical DFT method within the framework of the molecular cluster model. The process of external adsorption of iron and nickel oxides on the surface of nanotubes was investigated. For the efficiency of using carbon nanotubes containing substituting boron atoms as biosensors, their interaction with acetone molecules was studied. The main energetic characteristics of these processes, such as distance and adsorption energy, were determined. A modelling experiment was carried out on the addition of iron and nickel oxides and the interaction of boron-carbon nanotube-based biosensors with acetone molecules. It was found that by modifying carbon nanotubes by attaching metal oxides and functional groups and substituting boron atoms to their surface, it is possible to control their electronic properties, in particular the width of the forbidden zone. Taking into account the dependence between the forbidden band width and refractive index, it becomes possible to use the considered complexes for optical applications. Such complexes are also promising for use as biosensors, allowing them to detect the presence of microquantities of various substances in the environment on the basis of these regularities, which ultimately makes them extremely useful for environmental and medical research.

**Key words:** sensory activity, boron-carbon nanotubes, nanostructures, medical technologies.