## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НИТРОГРУППОЙ БОРОНИТРИДНЫХ НАНОТРУБОК В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕМЕНТОВ СЕНСОРНЫХ УСТРОЙСТВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МИКРОКОЛИЧЕСТВА ВЕЩЕСТВА

<u>Ерофеев Д.Р.</u><sup>1</sup>, Борознина Н.П.<sup>1</sup>, Борознин С.В.<sup>1</sup>, Запороцкова И.В.<sup>1</sup> Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия E-mail: NMTb-191\_127925@volsu.ru

## THE USE OF BORONITRIDE NANOTUBES MODIFIED BY THE NITRO GROUP AS ELEMENTS OF SENSOR DEVICES FOR DETERMINING THE MICRO-QUANTITY OF A SUBSTANCE

<u>Erofeev D.R.</u><sup>1</sup>, Boroznina N.P.<sup>1</sup>, Boroznin S.V.<sup>1</sup>, Zaporotskova I.V.<sup>1</sup> Volgograd State University, Volgograd, Russia

In this paper, the possibility of using modified boronitride nanotubes as elements of sensor devices that exhibit sensitivity to gas-phase carbon compounds is considered.

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 всему ПО занимающиеся исследованиями в области био- и нанотехнологий [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 уникальные ярко выраженные физические, химические, электрические и механические свойства, позволяющие ускорить разрешения вопросов улучшения экологии и здоровья человека. Данные исследования позволят проводить дагностику заболеваний человека и определение основных маркеров заболеваний (к примеру таких как сахарный диабет) на ранних стадиях.

Для определения маркеров заболеваний в выдыхамом человеком воздухе возможно использование высокочувствительных сенсорных датчиков. Для этого лучше всего использовать материал, способный идентифицировать ультрамалое были специально количество вещества. Для этой цели модифицированные нитрогруппой (-NO<sub>2</sub>) боронитридные нанотрубки (BNNTs). Для подтверждения эффективности выбранных наносистем были проведены исследования для определения сорбционной И сенсорной активности BNNT-NO<sub>2</sub> в отношении молекул ацетона. С наносистемы компьютерного моделирования получилось установить значение энергии взаимодействия при которой система находится в наиболее стабильном состоянии. Далее был смоделирован процесс 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 нанокомплекса без разрушения и химического загрязнения. Таким образом, использование устройств на основе данной технологии может являться решением проблемы определения ультрамалого количества вещества в медицинских целях.

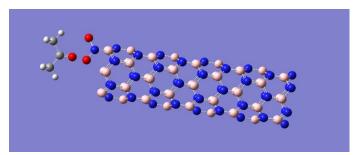


Рис. 1. Модель взаимодействия модифицированной нитрогруппой БННТ с молекулой ацетона

На основании проведенных модельных исследований было доказано наличие сорбционного и сенсорного взаимодействия между гранично модифицированной боронитридной нанотрубкой и молекулой ацетона. 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, а также диагностировать заболевание на ранней стадии.

- 1. Thundat, T., Oden, P.I., and Warmack, R.J., Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering, vol 1, pp. 185—199, (1997)
- 2. Ilic, B., Czaplewski, D., Craighead, H.G., Neuzil, P., Campagnolo, C., and Batt, C., Appiled Physics Letters, vol. 77, p. 450, (2000)
- 3. Zaporotskova, I.V., Boroznina, N.P., and Boroznin, S.V., Smart Innovation, Systems and Technologies, vol. 287, pp. 137—149, (2022)