

УДК 620.22

## Исследования взаимодействия модифицированных нитрогруппой боронитридных нанотрубок с газофазными углеродосодержащими молекулами для создания сенсорных устройств

© 2022 г. Н. П. Борознина<sup>1</sup>✉, И. В. Запороцкова<sup>1</sup>, П. А. Запороцков<sup>1</sup>,  
Л. В. Кожитов<sup>2</sup>, Д. Р. Ерофеев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Волгоградский государственный университет,  
Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,  
Ленинский просп., д. 4, стр. 1, Москва, 119049, Российская Федерация*

✉ Автор для переписки: natalya.boroznina@volsu.ru

**Аннотация.** В последнее время экологическая ситуация в мире повсеместно ухудшается и возникает необходимость поиска новых эффективных средств обнаружения вредных веществ в воздухе. С каждым годом растет содержание углекислого газа в воздухе, что в итоге может повлечь за собой ухудшение состояния здоровья людей. Для своевременной фиксации повышения уровня газа в настоящее время используют сенсорные устройства различного типа. В качестве активного материала такого сенсора могут быть использованы современные уникальные материалы — нанотрубки, которые, благодаря своим сорбционным свойствам, способны определять наличие вредных примесей в воздушном пространстве помещений. Также можно использовать подобные сенсоры в качестве детекторов некоторых заболеваний человека по анализу выдыхаемого воздуха, что делает возможным их применение в медицине. Представлены результаты теоретического исследования сорбционного взаимодействия модифицированных боронитридных нанотрубок с молекулами углекислого газа и ацетона, полученные с использованием квантово-химического метода DFT, которые доказывают возможность применения этого вида нанотрубок в качестве материала датчиков сенсорных устройств.

**Ключевые слова:** боронитридные нанотрубки, краевое модифицирование, функциональная нитрогруппа, сенсорная активность, сорбционные свойства, газофазные молекулы, углекислый газ, ацетон

**Для цитирования:** Борознина Н.П., Запороцкова И.В., Запороцков П.А., Кожитов Л.В., Ерофеев Д.Р. Исследования взаимодействия модифицированных нитрогруппой боронитридных нанотрубок с газофазными углеродосодержащими молекулами для создания сенсорных устройств. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2022; 25(4): 261—270. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-261-270>

# Studies of the interaction of modified nitro group boronitride nanotubes with gas-phase carbon-containing molecules to create sensor devices

N. P. Boroznina<sup>1</sup>✉, I. V. Zaporotskova<sup>1</sup>, P. A. Zaporotskov<sup>1</sup>,  
L. V. Kozhitov<sup>2</sup>, D. R. Erofeev<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation*

<sup>2</sup> *National University of Science and Technology MISiS,  
4-1 Leninsky Ave., Moscow 119049, Russian Federation*

✉ *Corresponding author: natalya.boroznina@volsu.ru*

**Abstract.** Recently, the environmental situation in the world has been deteriorating everywhere and there is a need to find new effective means of detecting harmful substances in the air. Every year, the content of carbon dioxide in the air is growing, which in the end can lead to a deterioration in the health of people. Various types of sensor devices are currently used to timely fix the increase in the gas level. As the active material of such a sensor, modern unique materials can be used – nanotubes, which, due to their sorption properties, are able to detect the presence of harmful impurities in the air space of the premises. It is also possible to use such sensors as detectors of some human diseases by analyzing exhaled air, which makes their use in medicine possible. The results of a theoretical study of the sorption interaction of modified boronitride nanotubes with molecules of carbon dioxide and acetone, obtained using the quantum-chemical DFT method, are presented, which prove the possibility of using this type of nanotubes as a sensor material for sensor devices.

**Keywords:** boron-nitride nanotubes, edge modification, functional nitro group, sensor activity, sorption properties, gas-phase molecules, carbon dioxide, acetone

**For citation:** Boroznina N.P., Zaporotskova I.V., Zaporotskov P.A., Kozhitov L.V., Erofeev D.R. Studies of the interaction of modified nitro group boronitride nanotubes with gas-phase carbon-containing molecules to create sensor devices. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2022; 25(4): 261–270. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-261-270>

## Введение

В настоящее время применение нанотрубок в качестве элементов нанодатчиков сенсорных устройств быстро растет благодаря их уникальным сорбционным свойствам. Такие системы особенно востребованы в экологии, биологических и медицинских отраслях. Био- и наносенсоры используются для диагностики и лечения некоторых заболеваний, контроля состояния окружающей среды. Ученые, занимающиеся исследованиями в области био- и нанотехнологий, пытаются добиться новых успехов в области прогнозирования и лечения заболеваний, охраны окружающей среды. Авторы работы предложили ультразвуковые датчики для контроля технологических процессов и химического анализа. Микрокантилеверные датчики были изучены в работе [2], исследовалось влияние демпфирования, поверхностных напряжений и массового нагружения. Результаты механического резонансного исследования биологического детек-

тора представлены в работе [3]. Авторы работы [3] показали, 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 однослойных углеродных нанотрубок.

В последнее время нанотехнологии активно изучают и используют нанотрубки на основе нитрида бора (боронитридные нанотрубки, БННТ) из-за ярко выраженных новых физических, химических, электрических и механических свойств, отличающих их от углеродных нанотрубок [4–11]. В работе [12] изучали БННТ в качестве инновационного наноустройства для решения проблем наномедицины. Авторы работы [13] исследовали колебательное поведение и нарушение симметрии БННТ. В другом исследовании [14] рассматривали изменение частотного сдвига в БННТ при возможном использовании их в бионаносенсорах. Также

исследовали вибрацию при бионанозондировании различных бактерий и вирусов при использовании одностенных БННТ типов «кресло» и «зигзаг» [15—19]. В работе [20] было предложено всестороннее исследование одностенных БННТ как бионаносенсоров.

В современном мире особенно важно здоровье людей, а с каждым годом содержание углекислого газа в воздухе растет. Это влечет за собой многие негативные последствия для организма, такие как слабость, сонливость, головные боли, проблемы с концентрацией внимания и др. Остро стоит проблема определения наличия вредных газов в помещениях различного назначения. Для этого могут быть использованы 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 человека может потенциально обеспечить неинвазивное средство для оценки состояния здоровья. Ограниченное количество летучих органических соединений в выдыхаемом человеком воздухе коррелирует с наличием специфических заболеваний. Эти соединения могут фактически рассматриваться как маркеры заболеваний, поэтому и требуется их селективное обнаружение. Поскольку предлагаемая технология предполагает создание датчиков с высокой селективностью, то при анализе дыхания человека будет возможно выборочное определение выдыхаемых компонентов для точного установления наличия или отсутствия заболевания. И для этих целей также возможно использование нанотрубок с выдающимися сорбционными свойствами.

Использование боросодержащих нанотрубок позволит решить ещё одну проблему развития технологий. Это — проблема энергосбережения и энергоэффективности новых производств и используемого оборудования. В настоящее время для выполнения названных задач во всех областях используется довольно сложное энергозатратное оборудование (различные газоанализаторы, спектральные приборы и т. п.) [21—23]. Применение высокочувствительных и энергоэффективных сенсоров на основе нанотрубулярных структур для обеспечения экологического мониторинга, определения источников промышленных выбросов и наличия соединений-маркеров заболеваний в физиологических средах человека и тому подобное является одним из способов улучшения качества жизни человека.

Таким образом, можно утверждать, что необходимы новые исследования боронитридных наноматериалов, которые могут быть использованы в качестве активных элементов для создания высокоэффективных энергосберегающих хеморе-

зистивных сенсорных датчиков для анализа воздуха. Это чрезвычайно актуально как для развития персонализированной медицины, так и для нужд экологии в целом.

Как известно, модифицирование углеродных и борууглеродных нанотрубок функциональными группами приводит к созданию эффективных сенсорных систем [24—26]. Поэтому можно предположить, что модифицирование границ боронитридных нанотрубок также приведет к улучшению сорбционных свойств последних. В работе теоретически исследована возможность граничного модифицирования одностенной боронитридной нанотрубки нитрогруппой, определены сорбционные и сенсорные особенности получившейся системы в отношении вредных для здоровья человека газов, таких как углекислый газ, а также в отношении ацетона для определения наличия заболевания человека на ранней стадии развития болезни. 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 нитрогруппы  $\text{NO}_2$  обусловлен тем, что такая функциональная группа является сильным электроноакцептором, так как обладает отрицательным индуктивным и мезомерным эффектами («стягивает» на себя электронную плотность), что оказывает положительное влияние процессы присоединения молекул к общей системе БННТ— $\text{NO}_2$ . Эти исследования и связанные с ними возможные усовершенствования сенсорных устройств путем использования новых активных материалов помогут найти полезные и практические способы продвижения общих знаний о бионанодатчиках в медицинских приложениях и экологии.

## Методология

Одним из наиболее апробированных и достоверных методов проведения модельных экспериментов и квантово-химических расчетов в настоящее время является теория функционала плотности (ТФП, или **DFT** — *Density Functional Theory*) [27]. В ее основе лежит уравнение Кона—Шэма. Кратко рассмотрим основные этапы его вывода. Первым этапом является определение вида функционала для средней энергии:

$$\begin{aligned} E[n] &= \langle \Psi[n] | (\hat{T} + \hat{U} + \hat{V}_{\text{ext}}) | \Psi[n] \rangle = \\ &= T + U + V_{\text{ext}} = \\ &= T_S + V_H + V_{\text{ext}} + (T - T_S + U - V_H), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $E[n]$  — полная энергия входящих в систему электронов;  $\Psi[n]$  — варьирование волновой функции  $\Psi$  по функционалу, имеющему зависимость

от волновой функции;  $T$  — кинетическая энергия взаимодействующих частиц;  $T_S$  — кинетическая энергия свободных частиц;  $V_{\text{ext}}$  — внешний потенциал;  $U$  — энергия кулоновского взаимодействия;  $V_H$  — энергия Хартри.

Последний член в выражении (1) отвечает за вклад обменно-корреляционной энергии:

$$V_{\text{XC}} = (T - T_S + U - V_H). \quad (2)$$

В выражение (2) входят четыре члена, попарная разность которых в сумме дает указанное значение энергии. Первая разность — между кинетическими энергиями взаимодействующих и свободных частиц, а вторая — между энергиями кулоновского взаимодействия и Хартри.

Для большей определенности, перепишем функционал Кона—Шэма с указанием функциональной зависимости членов перед переходом к конкретным вычислениям:

$$E_{\text{KS}}[n] = T_S[n] + V_H[n] + V_{\text{ext}}[n] + V_{\text{XC}}[n]. \quad (3)$$

В уравнении (3)  $T_S[n]$  — соответствует кинетической энергии свободных электронов с плотностью  $n(r)$ ;  $V_H[n]$  — энергия Хартри свободных электронов с плотностью  $n(r)$ ;  $V_{\text{ext}}[n]$  — внешний потенциал свободных электронов с плотностью  $n(r)$ ;  $V_{\text{XC}}[n]$  — вклад обменно-корреляционной энергии свободных электронов с плотностью  $n(r)$ .

Для проведения варьирования зададим соответствующие соотношения:

$$\frac{\delta E_{\text{KS}}}{\delta \Psi_{i\sigma}(r)} = \frac{\delta T_S}{\delta \Psi_{i\sigma}(r)} + \left[ \frac{\delta V_H}{\delta n(r)} + \frac{\delta V_{\text{ext}}}{\delta n(r)} + \frac{\delta V_{\text{XC}}}{\delta n(r)} \right] \frac{\delta n(r)}{\delta \Psi_{i\sigma}(r)} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\delta T_S}{\delta \Psi_{i\sigma}(r)} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi_{i\sigma}(r), \quad \frac{\delta n(r)}{\delta \Psi_{i\sigma}(r)} = \Psi_{i\sigma}(r). \quad (5)$$

Введение множителя Лагранжа ( $\epsilon_{i\sigma}$ ) задает условие нормировки. Учитывая все проведенные выше операции, можем записать уравнение Кона—Шэма:

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi_{i\sigma}(r) + v_{\text{KS}}(r) \Psi_{i\sigma}(r) = \epsilon_{i\sigma} \Psi_{i\sigma}(r),$$

где  $v_{\text{KS}}(r)$  — энергия Кона—Шэма для одной частицы.

Это уравнение совпадает по виду с одночастичным уравнением Шредингера, описывающем поведение частицы в самосогласованном потенциале, задаваемом выражением

$$v_{\text{KS}}(r) = v_{\text{ext}}(r) + v_H(r) + v_{\text{XC}}(r),$$

$$v_H(r) = \int dr' \frac{n(r')}{|r - r'|},$$

$$v_{\text{XC}}(r) = \frac{\delta V_{\text{XC}}}{\delta n(r)},$$

$$n(r) = \sum_{i\sigma} |\Psi_{i\sigma}(r)|^2.$$

В данных выражениях  $v_H(r)$  — энергия Хартри для одной частицы;  $v_{\text{XC}}(r)$  — вклад обменно-корреляционной энергии для одной частицы;  $n(r)$  — электронная плотность основного состояния.

Уравнение Кона—Шэма является обобщенным случаем теории Хартри. Точному описанию многоэлектронных эффектов препятствует сложность определения выражений для обменно-корреляционной энергии, т. е. именно ему отводится главная роль в рассматриваемой теории.

### Исследование сорбционного и сенсорного взаимодействия системы БННТ—NO<sub>2</sub> с молекулой углекислого газа

Было выполнено моделирование процесса модифицирования одной из границ однослойной БННТ типа *zig-zag* (6,0) нитрогруппой. Функциональная группа пошагово (с шагом 0,01 нм) приближалась к атому бора открытой границы кластера нанотрубки, содержащего 96 атомов бора и азота, взятых в равных количествах, ориентируясь атомом азота N. Геометрия системы оптимизировалась на каждом шаге. Установлено, что нитрогруппа присоединилась к границе нанотрубки под углом 173,4°. Длина связи B—N между группой и БННТ составила 0,14 нм. Анализ зарядового распределения в системе установил, что электронная плотность сконцентрировалась на атоме азота нитрогруппы. Заряд на атоме N оказался равен −0,03, а на атоме бора нанотрубки +0,026.

Далее исследовалось сорбционное взаимодействие между получившейся наносистемой «БННТ — нитрогруппа» и молекулой углекислого газа CO<sub>2</sub> (рис. 1). Молекула пошагово приближалась к атому кислорода группы, ориентируя атомом O к нему.

В результате расчетов была построена зависимость энергии взаимодействия от расстояния между молекулой CO<sub>2</sub> и модифицированной нанотубулярной системой БННТ—NO<sub>2</sub> (рис. 2). Анализ кривой установил факт реализации сорбционного взаимодействия между боронитридной наносистемой и молекулой углекислого газа, причем первый минимум энергии находится на расстоянии 0,3 нм, соответствующая энергия сорбционного взаимодействия составляет −0,75 эВ. При дальнейшем приближении молекула может преодолеть не-



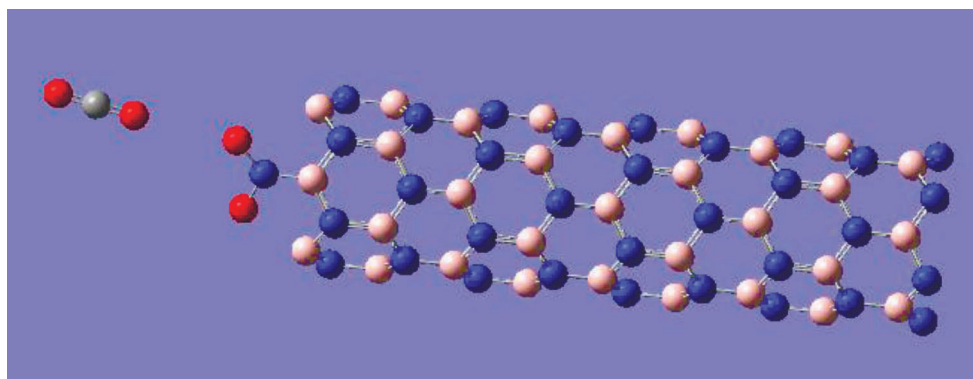


Рис. 1. Модель взаимодействия модифицированной нитрогруппой БННТ с молекулой углекислого газа  
Fig. 1. Model of the interaction of a boronitride nanotube modified with a nitro group with a carbon dioxide molecule

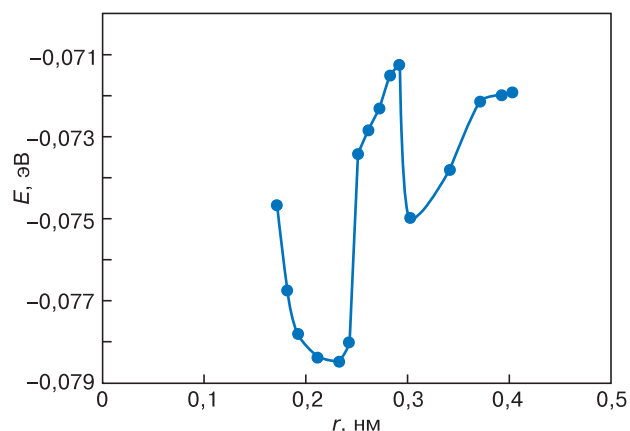


Рис. 2. График зависимости энергии сорбционного взаимодействия модифицированной боронитридной системы БННТ—NO<sub>2</sub> с молекулой углекислого газа от расстояния между молекулой CO<sub>2</sub> и атомом кислорода функциональной группы

Fig. 2. Dependence of the sorption interaction energy of the modified BNNT—NO<sub>2</sub> boronitride system with a carbon dioxide molecule on the distance between the CO<sub>2</sub> molecule and the oxygen atom of the functional group

большой потенциальный барьер высотой 0,004 эВ и оказаться во втором минимуме на расстоянии 0,23 нм. Энергия взаимодействия для этого минимума составила  $-0,08$  эВ. Судя по значениям расстояний, реализуется слабое вандерваальсовое взаимодействие.

Далее было выполнено моделирование процесса сканирования виртуальной поверхности, содержащей молекулу углекислого газа CO<sub>2</sub>, для определения чувствительности модифицированной боронитридной наносистемы к присутствию данных молекул. Моделирование процесса сканирования заключалось в пошаговом перемещении молекулы углекислого газа вдоль прямой, проведенной па-

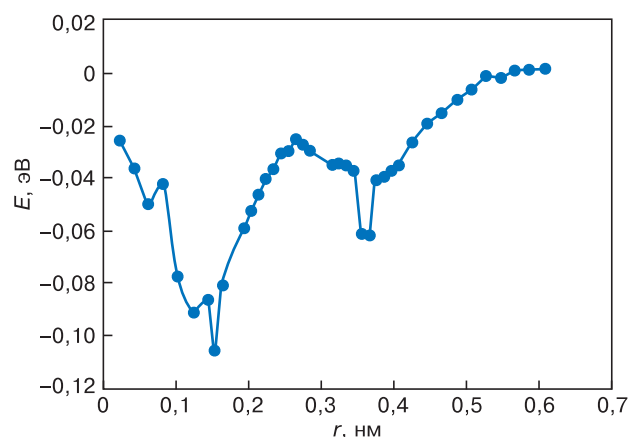


Рис. 4. Зависимость энергии сенсорного взаимодействия от положения молекулы CO<sub>2</sub> относительно наносистемы БННТ—NO<sub>2</sub>

Fig. 4. Dependence of the sensor interaction energy on the position of the CO<sub>2</sub> molecule relative to the BNNT—NO<sub>2</sub> nanosystem

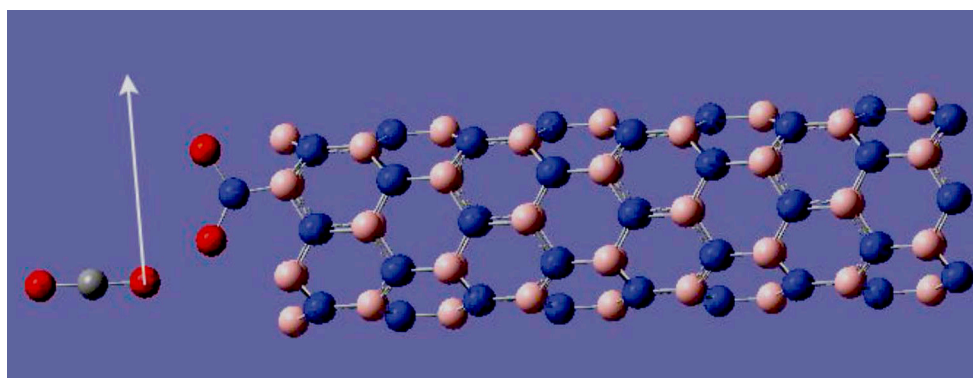


Рис. 3. Модель процесса сканирования виртуальной поверхности, содержащей молекулу углекислого газа, системой БННТ—NO<sub>2</sub>.  
Стрелка — направление движения молекулы

Fig. 3. Model of the process of scanning a virtual surface containing a carbon dioxide molecule using the BNNT—NO<sub>2</sub> system.  
The arrow shows the direction of motion of the molecule

### Основные характеристики сорбционного и сенсорного взаимодействия модифицированной боронитридной нанотрубки с углеродосодержащими газофазными молекулами

Main characteristics of sorption and sensory interaction of a modified boronitride nanotube with carbon-containing gas-phase molecules

| Молекула                        | Расстояние сорбционного взаимодействия, нм | Энергия сорбционного взаимодействия, эВ | Расстояние сенсорного взаимодействия, нм (для положения молекулы под каждым атомом кислорода) | Энергия сенсорного взаимодействия, эВ (для положения молекулы под каждым атомом кислорода) |
|---------------------------------|--|---|---|--|
| CO <sub>2</sub>                 | 0,21                                       | –0,78                                   | 0,15<br>0,35  | –0,105<br>–0,061   |
| C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O | 0,4  | –0,41                                   | 0,58<br>0,36  | –0,076<br>–0,053   |

параллельно границе нанотрубки и последовательно проходящей мимо атомов кислорода нитрогруппы, присоединенной к границе БННТ (рис. 3).

Результаты исследования показаны на рис. 4. Минимумы энергии, представленные на графике, соответствуют нахождению молекулы CO<sub>2</sub> под атомами кислорода нитрогруппы. Значения энергий и расстояний сенсорного взаимодействия молекулы углекислого газа и модифицированной нитрогруппой БННТ приведены в таблице.

#### Исследование сорбционного и сенсорного взаимодействия БННТ—NO<sub>2</sub> с молекулой ацетона

Проведенные далее исследования заключались в определении возможности сорбционного и сенсорного взаимодействия наносистемы БННТ—NO<sub>2</sub> с молекулой ацетона. Ацетон появляется в организме в результате процесса перекисного окисления жиров. Попадая в кровь, он разносится по всему телу, оседая в почках и легких. Из легких ацетон выходит вместе с выдыхаемым воздухом. Причины появления запаха ацетона изо рта кроются в патологии обмена веществ вследствие некоторых заболеваний, таких как заболевания щитовидной железы, почечные и печеночные заболевания, а также сахарный диабет. В случае повышения уровня глюкозы в крови до показателя в 16 ммоль на литр и выше у больных сахарным диабетом развивается состояние, которое называется диабетический кетоацидоз. Именно это состояние является самой частой причиной появления запаха ацетона изо рта. Именно поэтому создание сенсорного устройства, позволяющего определять наличие ацетона в выдыхаемом человеком воздухе, является актуальной, так как позволит определить наличие болезни на самой ранней стадии. И для подобного устройства необходимо подобрать высокочувствительный материал, способный идентифицировать сверхмалое количество ацетона в воздухе. Для этой цели мы предлагаем использовать модифицированные боронитридные нанотрубки.

Взаимодействие наносистемы на основе модифицированной нитрогруппой БННТ с молекулой ацетона реализовывалось аналогично описанному моделированию взаимодействия этой же системы с углекислым газом. Молекула C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O приближалась к атому кислорода функциональной группы, модифицирующей границу БННТ, ориентируясь атомом О. В результате был построен график взаимодействия, позволивший определить расстояние взаимодействия молекулы ацетона и системы БННТ—NO<sub>2</sub> (рис. 5), которое составило 0,4 нм. Соответствующая энергия сорбционного взаимодействия составила –0,41 эВ. Несмотря на имеющийся второй минимум на расстоянии 0,34 нм и энергией –0,03 эВ, в дальнейшем мы будем использовать значения расстояния именно 0,4 нм, так как соответствующая энергия (–0,41 эВ) характеризует большую стабильность полученного комплекса.

Далее моделировался процесс сканирования произвольной виртуальной поверхности, содержащей молекулу ацетона, модифицированной системой БННТ—NO<sub>2</sub>. Молекула двигалась вдоль

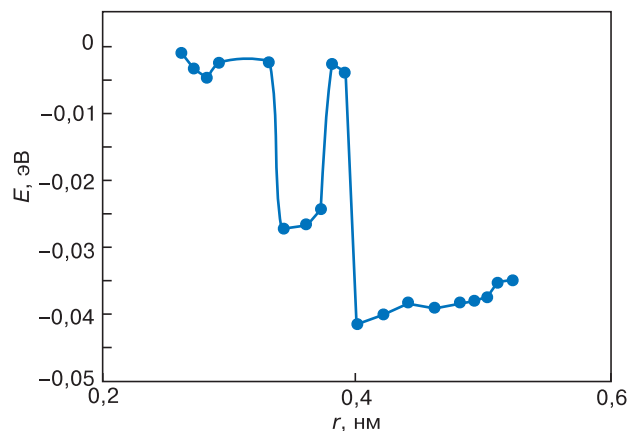


Рис. 5. График зависимости энергии сорбционного взаимодействия модифицированной боронитридной системы БННТ—NO<sub>2</sub> с молекулой ацетона от расстояния между ней и молекулой C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O

Fig. 5. Dependence of the sorption interaction energy of the modified BNNT—NO<sub>2</sub> boronitride system with an acetone molecule on the distance between it and the C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O molecule

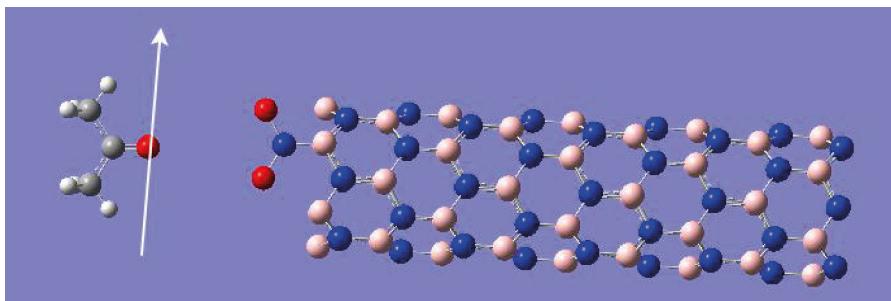


Рис. 6. Модель процесса сканирования произвольной поверхности, содержащей молекулу ацетона, системой БННТ—NO<sub>2</sub>. Стрелка — направление движения молекулы

Fig. 6. Model of the process of scanning an arbitrary surface containing an acetone molecule by the BNNT—NO<sub>2</sub> system. The arrow shows the direction of motion of the molecule

воображаемой прямой, параллельной границе нанотрубки и проведенной на расстоянии 0,4 нм от атомов кислорода функциональной группы (расстоянии сорбционного взаимодействия). Направление движения молекулы ацетона изображено стрелкой на рис. 6. В результате был построен график зависимости энергии сенсорного взаимодействия молекулы с модифицированной боронитридной системой (рис. 7). На графике четко прослеживаются два минимума, находящиеся под атомами кислорода группы NO<sub>2</sub>, что свидетельствует о возможности использования модифицированной БННТ в качестве чувствительного элемента датчика сенсорного устройства, позволяющего обнаруживать наличие сверхмалого количества ацетона в воздухе.

В сводной таблице приведены основные характеристики сорбционного и сенсорного взаимодействия БННТ, модифицированной нитрогруппой, с углеродосодержащими молекулами углекислого газа и ацетона.

### Заключение

На основе проведенных модельных исследований доказано наличие сорбционного и сенсорного взаимодействия между гранично-модифицированной нитрогруппой БННТ с молекулами углекислого газа и ацетона. Полученные значения энергий взаимодействия позволяют говорить о селективности системы и, следовательно, о способности сенсорного устройства идентифицировать различные соединения и вещества, например, определять в воздухе вредные соединения, а по выдоху человека диагностировать заболевание на ранней его стадии. Так как характер взаимодействия представляет собой слабое вандерваальсовое, т. е. носит физический характер, то эти активные элементы сенсоров могут быть использованы многократно без разрушения и химического загрязнения.

Таким образом, на основе проведенных исследований можно разработать рекомендации по технологии создания новых высокоэффективных устройств, в том числе, сенсорных датчиков, биоме-

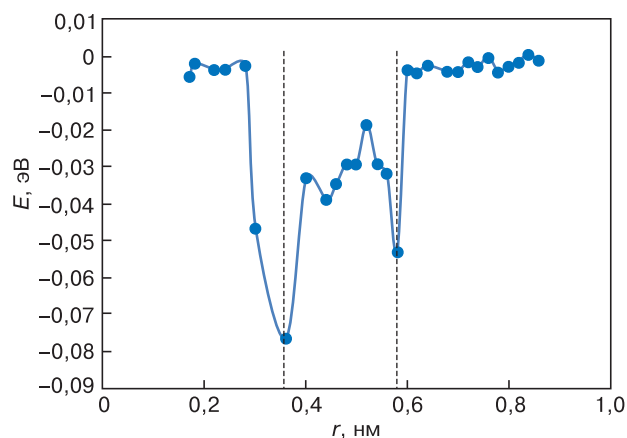


Рис. 7. Зависимость энергии сенсорного взаимодействия от положения молекулы ацетона относительно наносистемы БННТ—NO<sub>2</sub>.

Пунктир — положение молекулы ацетона под атомами кислорода функциональной группы

Fig. 7. Dependence of the sensor interaction energy on the position of the acetone molecule relative to the BNNT—NO<sub>2</sub> nanosystem. The dotted line is the position of the acetone molecule under the oxygen atoms of the functional group

дицинских, нано- и микроэлектронных устройств, фильтров и т. д., на основе тубулярных боронитридных наноматериалов. Принцип работы таких сенсоров будет основан на изменении вольтамперных характеристик нанотрубки в результате взаимодействия с молекулами определенного сорта на ее модифицированной границе.

Использование приборов на основе модифицированных нанотубулярных систем позволит решить одну из современных проблем развития технологий. Это проблема энергосбережения и энергоэффективности новых производств и используемого оборудования. Применение высокочувствительных и энергоэффективных сенсоров на основе нанотубулярных структур для обеспечения экологического мониторинга, для контроля загрязненности воды и воздуха, определение источников промышленных выбросов, для определения наличия соединений — маркеров заболеваний в физиологических средах человека и тому подобное является одним из способов улучшения качества жизни человека.

## Библиографический список

1. Hauptmann P., Puttmer A., Henning B. Ultrasonic sensors for process monitoring and chemical analysis: state-of-the-art and trends. *Sensors and Actuators A-physical*. 1998; 67(1-3): 32—48. [https://doi.org/10.1016/S0924-4247\(97\)01725-1](https://doi.org/10.1016/S0924-4247(97)01725-1)
2. Thundat T., Oden P.I., Warmack R.J. Microcantilever sensors. *Microscale Thermophysical Engineering*. 1997; 1(3): 185—199.
3. Ilic B., Czaplewski D., Craighead H.G., Neuzil P., Campagnolo C., Batt C. Mechanical resonant immunospecific biological detector. *Applied Physics Letters*. 2000; 77: 450—452. <https://doi.org/10.1063/1.127006>
4. Chopra N.G., Zettl A. Measurement of the elastic modulus of a multi-wall boron nitride nanotube. *Solid State Communications*. 1998; 105(5): 297—300. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(97\)10125-9](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(97)10125-9)
5. Ghorbanpour A.A., Roudbari M.A., Amir S. Nonlocal vibration of SWBNNT embedded in bundle of CNTs under a moving nanoparticle. *Physica B: Condensed Matter*. 2012; 407(17): 3646—3653. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2012.05.043>
6. Ghorbanpour A.A., Roudbari M.A. Nonlocal piezoelectric surface effect on the vibration of visco-Pasternak coupled boron nitride nanotube system under a moving nanoparticle. *Thin Solid Films*. 2013; 542: 232—241. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2013.06.025>
7. Ghorbanpour A.A., Hafizi B.A., Ravandi K.A., Roudbari M.A., Amir S., Azizkhani M.B. Induced nonlocal electric wave propagation of boron nitride nanotubes. *Journal of Mechanical Science and Technology*. 2013; 27: 3063—3071. <https://doi.org/10.1007/s12206-013-0705-7>
8. Ghorbanpour A.A., Roudbari M.A. Surface stress, initial stress and Knudsen-dependent flow velocity effects on the electro-thermo nonlocal wave propagation of SWBNNTs. *Physica B: Condensed Matter*. 2014; 452: 159—165. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2014.07.017>
9. Ghorbanpour A.A., Jalilvand A., Ghaffari M., Talebi M.M., Kolahchi R., Roudbari M.A., Amir S. Nonlinear pull-in instability of boron nitride nano-switches considering electrostatic and Casimir forces. *Scientia Iranica*. 2014; 21(3): 1183—1196.
10. Ghorbanpour A.A., Karamali R.A., Roudbari M.A., Azizkhani M.B., Bidgoli A. Axial and transverse vibration of SWBNNT system coupled Pasternak foundation under a moving nanoparticle using Timoshenko beam theory. *Journal of Solid Mechanics*. 2015; 7(3): 239—254.
11. Ansari R., Rouhi S., Mirnezhad M., Aryayi M. Stability characteristics of single-walled boron nitride nanotubes. *Archives of Civil and Mechanical Engineering*. 2015; 15: 162—170. <https://doi.org/10.1016/J.ACME.2014.01.008>
12. Ciofani G., Danti S., D'Alessandro D., Moscato S., Menciasci A. Assessing cytotoxicity of boron nitride nanotubes: interference with the MTT assay. *Biochemical and Biophysical Research Communications*. 2010; 394(2): 405—411. <https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2010.03.035>
13. Chowdhury R., Wang C.Y., Adhikari S., Scarpa F. Vibration and symmetry-breaking of boron nitride nanotubes. *Nanotechnology*. 2010; 21(36): 365702—365703 <https://doi.org/10.1088/0957-4484/21/36/365702>
14. Chowdhury R., Adhikari S. Boron-nitride nanotubes as zeptogram-scale bionanosensors: theoretical investigations. *IEEE Transactions on Nanotechnology*. 2011; 10(4): 659—667. <https://doi.org/10.1109/TNANO.2010.2060492>
15. Panchal M.B., Upadhyay S.H., Harsha S.P. Mass detection using single walled boron nitride nanotube as a nanomechanical resonator. *Nano Brief Reports and Reviews*. 2012; 7(4): 1250029—1250030. <https://doi.org/10.1142/S1793292012500294>
16. Panchal M.B., Upadhyay S.H., Harsha S.P. Vibrational analysis of boron nitride nanotube based nanoresonators. *Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine*. 2012; 3(3): 031004—031009. <https://doi.org/10.1115/1.4007696>
17. 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 and Nanostructures*. 2013; 50: 73—82. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2013.02.018>
18. Panchal M.B., Upadhyay S.H. Boron nitride nanotube-based biosensing of various bacterium/viruses: Continuum modelling-based simulation approach. *IET Nanobiotechnology*. 2014; 8(3): 143—148. <https://doi.org/10.1049/iet-nbt.2013.0020>
19. Panchal M.B., Upadhyay S.H. Boron nitride nanotube-based mass sensing of zeptogram scale. *Spectroscopy Letters*. 2014; 47(5): 17—21. <https://doi.org/10.1080/00387010.2013.850437>
20. Adhikari S. Boron nitride nanotubes in nanomedicine. In: *A volume in micro and nano technologies*. NY: Elsevier Inc; 2016. P. 149—164.
21. Борознин С.В. Исследование роли примесных атомов бора в металлизации углеродных нанотрубок. *Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии*. 2022; 12(1): 159—173. <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2022-12-1-159-173>
22. Zaporotskova I.V., Boroznina N.P., Boroznin S.V. Nanotechnology: contribution to inclusive growth in Russia. In: *Inshakova E.I., Inshakova A.O., eds. Smart Innovation, Systems and Technologies*. Singapore: Springer; 2022. P. 137—149. [https://doi.org/10.1007/978-981-16-9804-0\\_12](https://doi.org/10.1007/978-981-16-9804-0_12)
23. Boroznin S.V. Carbon nanostructures containing boron impurity atoms: synthesis, physicochemical properties and potential applications. *Modern Electronic Materials*. 2022; 8(1): 23—42. <https://doi.org/10.3897/j.moem.8.1.84317>; <https://elibrary.ru/wawpmy>
24. Zaporotskova I.V., Dryuchkov E.S., Boroznina N.P., Kozhitov L.V., Popkova A.V. Surface-modified boron-carbon BC<sub>5</sub> nanotube with amine group as a sensor device element: Theoretical research. *Russian Microelectronics*. 2021; 50(8): 644—648. <https://doi.org/10.1134/S1063739721080096>
25. Boroznina N.P., Boroznin S.V., Zaporotskova I.V., Zaporotskov P.A. Comparative analysis of the effectiveness of the sensory properties of carbon nanotubes when modifying their surface with boron atoms. In: *Popkova E.G., Sergi B.S., eds. «Smart technologies» for society, state and economy. ISC 2020. Lecture Notes in Networks and Systems*. Springer, Cham; 2021. Vol. 155. P. 28—296. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-59126-7\\_32](https://doi.org/10.1007/978-3-030-59126-7_32)
26. Boroznina N., Zaporotskova I., Boroznin S., Dryuchkov E.S. Sensors based on amino group surface-modified CNTs. *Chemosensors*. 2019; 7(1): 11—19. <https://doi.org/10.3390/CHEMOSENSORS7010011>
27. Koch W.A., Holthausen M. Chemist's guide to density functional theory. Weinheim: Wiley-VCH; 2002. P. 19—28.



## References

- Hauptmann P., Puttmer A., Henning B. Ultrasonic sensors for process monitoring and chemical analysis: state-of-the-art and trends. *Sensors and Actuators A-physical*. 1998; 67(1–3): 32–48. [https://doi.org/10.1016/S0924-4247\(97\)01725-1](https://doi.org/10.1016/S0924-4247(97)01725-1)
- Thundat T., Oden P.I., Warmack R.J. Microcantilever sensors. *Microscale Thermophysical Engineering*. 1997; 1(3): 185–199.
- Ilic B., Czaplewski D., Craighead H.G., Neuzil P., Campagnolo C., Batt C. Mechanical resonant immunospecific biological detector. *Applied Physics Letters*. 2000; 77: 450–452. <https://doi.org/10.1063/1.127006>
- Chopra N.G., Zettl A. Measurement of the elastic modulus of a multi-wall boron nitride nanotube. *Solid State Communications*. 1998; 105(5): 297–300. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(97\)10125-9](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(97)10125-9)
- Ghorbanpour A.A., Roudbari M.A., Amir S. Nonlocal vibration of SWBNNT embedded in bundle of CNTs under a moving nanoparticle. *Physica B: Condensed Matter*. 2012; 407(17): 3646–3653. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2012.05.043>
- Ghorbanpour A.A., Roudbari M.A. Nonlocal piezoelectric surface effect on the vibration of visco-Pasternak coupled boron nitride nanotube system under a moving nanoparticle. *Thin Solid Films*. 2013; 542: 232–241. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2013.06.025>
- Ghorbanpour A.A., Hafizi B.A., Ravandi K.A., Roudbari M.A., Amir S., Azizkhani M.B. Induced nonlocal electric wave propagation of boron nitride nanotubes. *Journal of Mechanical Science and Technology*. 2013; 27: 3063–3071. <https://doi.org/10.1007/s12206-013-0705-7>
- Ghorbanpour A.A., Roudbari M.A. Surface stress, initial stress and Knudsen-dependent flow velocity effects on the electro-thermo nonlocal wave propagation of SWBNNTs. *Physica B: Condensed Matter*. 2014; 452: 159–165. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2014.07.017>
- Ghorbanpour A.A., Jalilvand A., Ghaffari M., Talebi M.M., Kolahchi R., Roudbari M.A., Amir S. Nonlinear pull-in instability of boron nitride nano-switches considering electrostatic and Casimir forces. *Scientia Iranica*. 2014; 21(3): 1183–1196.
- Ghorbanpour A.A., Karamali R.A., Roudbari M.A., Azizkhani M.B., Bidgoli A. Axial and transverse vibration of SWBNNT system coupled Pasternak foundation under a moving nanoparticle using Timoshenko beam theory. *Journal of Solid Mechanics*. 2015; 7(3): 239–254.
- Ansari R., Rouhi S., Mirnezhad M., Aryayi M. Stability characteristics of single-walled boron nitride nanotubes. *Archives of Civil and Mechanical Engineering*. 2015; 15: 162–170. <https://doi.org/10.1016/J.ACME.2014.01.008>
- Ciofani G., Danti S., D'Alessandro D., Moscato S., Menciaci A. Assessing cytotoxicity of boron nitride nanotubes: interference with the MTT assay. *Biochemical and Biophysical Research Communications*. 2010; 394(2): 405–411. <https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2010.03.035>
- Chowdhury R., Wang C.Y., Adhikari S., Scarpa F. Vibration and symmetry-breaking of boron nitride nanotubes. *Nanotechnology*. 2010; 21(36): 365702–365703 <https://doi.org/10.1088/0957-4484/21/36/365702>
- Chowdhury R., Adhikari S. Boron-nitride nanotubes as zeptogram-scale bionanosensors: theoretical investigations. *IEEE Transactions on Nanotechnology*. 2011; 10(4): 659–667. <https://doi.org/10.1109/TNANO.2010.2060492>
- Panchal M.B., Upadhyay S.H., Harsha S.P. Mass detection using single walled boron nitride nanotube as a nanomechanical resonator. *Nano Brief Reports and Reviews*. 2012; 7(4): 1250029–1250030. <https://doi.org/10.1142/S1793292012500294>
- Panchal M.B., Upadhyay S.H., Harsha S.P. Vibrational analysis of boron nitride nanotube based nanoresonators. *Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine*. 2012; 3(3): 031004–031009. <https://doi.org/10.1115/1.4007696>
- 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 and Nanostructures*. 2013; 50: 73–82. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2013.02.018>
- Panchal M.B., Upadhyay S.H. Boron nitride nanotube-based biosensing of various bacterium/viruses: Continuum modelling-based simulation approach. *IET Nanobiotechnology*. 2014; 8(3): 143–148. <https://doi.org/10.1049/iet-nbt.2013.0020>
- Panchal M.B., Upadhyay S.H. Boron nitride nanotube-based mass sensing of zeptogram scale. *Spectroscopy Letters*. 2014; 47(5): 17–21. <https://doi.org/10.1080/00387010.2013.850437>
- Adhikari S. Boron nitride nanotubes in nanomedicine. In: *A volume in micro and nano technologies*. NY: Elsevier Inc; 2016. P. 149–164.
- Boroznin S.V. Investigation of the role of impurity boron atoms in the metallization of carbon nanotubes. *Proceedings of South-West State University. Series Technics and Technologies*. 2022; 12(1): 159–173. (In Russ.). <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2022-12-1-159-173>
- Zaporotskova I.V., Boroznina N.P., Boroznin S.V. Nanotechnology: contribution to inclusive growth in Russia. In: *Inshakova E.I., Inshakova A.O., eds. Smart Innovation, Systems and Technologies*. Singapore: Springer; 2022. P. 137–149. [https://doi.org/10.1007/978-981-16-9804-0\\_12](https://doi.org/10.1007/978-981-16-9804-0_12)
- Boroznin S.V. Carbon nanostructures containing boron impurity atoms: synthesis, physicochemical properties and potential applications. *Modern Electronic Materials*. 2022; 8(1): 23–42. <https://doi.org/10.3897/j.moem.8.1.84317>; <https://elibrary.ru/wawpmy>
- Zaporotskova I.V., Dryuchkov E.S., Boroznina N.P., Kozhitov L.V., Popkova A.V. Surface-modified boron-carbon BC<sub>5</sub> nanotube with amine group as a sensor device element: Theoretical research. *Russian Microelectronics*. 2021; 50(8): 644–648. <https://doi.org/10.1134/S1063739721080096>
- Boroznina N.P., Boroznin S.V., Zaporotskova I.V., Zaporotskov P.A. Comparative analysis of the effectiveness of the sensory properties of carbon nanotubes when modifying their surface with boron atoms. In: *Popkova E.G., Sergi B.S., eds. «Smart technologies» for society, state and economy. ISC 2020. Lecture Notes in Networks and Systems*. Springer, Cham.; 2021. Vol. 155. P. 28–296. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-59126-7\\_32](https://doi.org/10.1007/978-3-030-59126-7_32)
- Boroznina N., Zaporotskova I., Boroznin S., Dryuchkov E.S. Sensors based on amino group surface-modified CNTs. *Chemosensors*. 2019; 7(1): 11–19. <https://doi.org/10.3390/CHEMOSENSORS7010011>
- Koch W.A., Holthausen M. Chemist's guide to density functional theory. Weinheim: Wiley-VCH; 2002. P. 19–28.

---

Информация об авторах / Information about the authors

---

**Борознина Наталья Павловна** — доктор физ.-мат. наук, профессор, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения; Волгоградский государственный университет, Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0813-6888>; e-mail: [boroznina.natalya@volsu.ru](mailto:boroznina.natalya@volsu.ru)

**Запороцкова Ирина Владимировна** — доктор физ.-мат. наук, профессор, директор института приоритетных технологий; Волгоградский государственный университет, Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9486-2482>; e-mail: [irinazaporotskova@gmail.com](mailto:irinazaporotskova@gmail.com)

**Запороцков Павел Александрович** — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения; Волгоградский государственный университет, Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3122-8801>; e-mail: [zaporotskov.pavel@volsu.ru](mailto:zaporotskov.pavel@volsu.ru)

**Кожитов Лев Васильевич** — доктор техн. наук, профессор, профессор кафедры технологии материалов электроники; Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Ленинский просп., д. 4, стр. 1, Москва, 119049, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4973-1328>; e-mail: [kozitov@misiss.ru](mailto:kozitov@misiss.ru)

**Ерофеев Данил Романович** — студент; Волгоградский государственный университет, Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация; e-mail: [NMTb-191\\_127925@volsu.ru](mailto:NMTb-191_127925@volsu.ru)

**Natalya P. Boroznina** — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Department of Forensic Science and Physical Materials Science; Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0813-6888>; e-mail: [boroznina.natalya@volsu.ru](mailto:boroznina.natalya@volsu.ru)

**Irina V. Zaporotskova** — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Director of the Institute of Priority Technologies; Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9486-2482>; e-mail: [irinazaporotskova@gmail.com](mailto:irinazaporotskova@gmail.com)

**Pavel A. Zaporotskov** — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Department of Forensic Science and Physical Materials Science; Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3122-8801>; e-mail: [zaporotskov.pavel@volsu.ru](mailto:zaporotskov.pavel@volsu.ru)

**Lev V. Kozhitov** — Dr. Sci. (Eng.), Professor, Professor of the Department of Technology of Materials of Electronics; National University of Science and Technology MISiS, 4-1 Leninsky Ave., Moscow 119049, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4973-1328>; e-mail: [kozitov@misiss.ru](mailto:kozitov@misiss.ru)

**Danil R. Erofeev** — Student; Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation; e-mail: [NMTb-191\\_127925@volsu.ru](mailto:NMTb-191_127925@volsu.ru)

---