

**НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ /
NANOMATERIALS AND NANOTECHNOLOGY**

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2024. Т. 27, № 2. С. 146—153.

DOI: 10.17073/1609-3577j.met202310.605

УДК 621.315.592

**Влияние борных примесей различных концентраций
на сенсорные свойства углеродных нанотрубок
в отношении углекислого газа****© 2024 г. С. В. Борознин¹✉, И. В. Запороцкова¹, П. А. Запороцков¹,
Н. П. Борознина¹, Л. В. Кожитов², А. В. Попкова³**¹ *Волгоградский государственный университет,
Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация*² *Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»,
Ленинский просп., д. 4, стр. 1, Москва, 119049, Российская Федерация*³ *Научно–производственное объединение «Луч»,
ул. Железнодорожная, д. 24, Подольск, 142103, Российская Федерация*

✉ Автор для переписки: boroznin@volsu.ru

Аннотация. Нанотрубки, являясь одним из самых востребованных материалов нанотехнологии, находят новые области применения, например, их использование в качестве фильтров вредных газов. Однако на практике зачастую оказывается, что после захвата анализируемого вещества изменения их электронного состояния не происходит. Это затрудняет фиксацию факта адсорбции вещества электронными устройствами, например сенсорными датчиками. Одним из способов решения данной проблемы может стать модифицирование поверхности углеродных нанотрубок различными атомами, что приведет к созданию нанотубулярных гетероструктур. Одним из наиболее эффективных для проведения реакции замещения веществом является бор. Он позволяет создать на поверхности нанотрубок перераспределение электронной плотности, при этом не внося существенных изменений в топологию поверхности нанотрубки. Это, в свою очередь, приводит к изменению электронно–энергетического строения получаемых систем и более выраженному изменению этого строения при сорбции атомов и молекул на поверхности таких модифицированных нанотрубок. В данной статье проводится анализ влияния борных примесей различных концентраций на сенсорную активность таких модифицированных бором углеродных нанотрубок в отношении углекислого газа для исследования возможности использования этих бороуглеродных систем в качестве материала для высокоэффективных сенсоров.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, борные примеси, бороуглеродные нанотрубки, структурная модификация, сенсорные свойства

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «FZUU–2023–0001»).

Для цитирования: Борознин С.В., Запороцкова И.В., Запороцков П.А., Борознина Н.П., Кожитов Л.В., Попкова А.В. Влияние борных примесей различных концентраций на сенсорные свойства углеродных нанотрубок в отношении углекислого газа. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2024; 27(2): 146—153. <https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202310.605>

Effect of boron impurities of different concentrations on the sensory properties of carbon nanotubes with respect to carbon dioxide

S. V. Boroznin¹✉, I. V. Zaporotskova¹, P. A. Zaporotskov¹, N. P. Boroznina¹,
L. V. Kozhitov², A. V. Popkova³

¹ *Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation*

² *National University of Science and Technology “MISIS”,
4–1 Leninsky Ave., Moscow 119049, Russian Federation*

³ *JSC “Research Institute NPO “LUCH”,
24 Zheleznodorozhnaya Str., Podolsk 142103, Russian Federation*

✉ Corresponding author: boroznin@volsu.ru

Abstract. Nanotubes, being one of the most sought after materials in nanotechnology, are finding new areas of application, such as filters for harmful gases. However, in practical applications of nanotubes, it often turns out that, after capturing the analyzed substance, there is no change in their electronic state. This makes it difficult to detect the fact of adsorption of a substance by electronic devices, such as touch sensors. One way to solve this problem could be to modify the surface of carbon nanotubes with various atoms, which leads to the creation of nanotubular heterostructures. One of the most effective substances for carrying out the substitution reaction is boron. It allows the creation of a redistribution of the electron density on the surface of nanotubes without introducing significant changes to the topology of the nanotube surface. This, in turn, leads to a change in the electron–energy structure of the resulting systems and can lead to a more pronounced change in this structure during the sorption of atoms and molecules on the surface of such modified nanotubes. This paper analyzes the effect of boron impurities of different concentrations on the sensory activity of such boron–modified carbon nanotubes towards carbon dioxide to study the possibility of using boron–carbon systems such as a material for high–performance sensors.

Keywords: carbon nanotubes, boron impurities, boron–carbon nanotubes, structural modification, sensor properties

Acknowledgments: This study was carried out as part of a state assignment of the Russian Ministry of Science and Higher Education (topic FZUU–2023–0001).

For citation: Boroznin S.V., Zaporotskova I.V., Zaporotskov P.A., Boroznina N.P., Kozhitov L.V., Popkova A.V. Effect of boron impurities of different concentrations on the sensory properties of carbon nanotubes with respect to carbon dioxide. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2024; 27(2): 146–153. <https://doi.org/10.17073/1609–3577j.met202310.605>

Введение

Глобальное потепление в последние десятилетия обусловливается большим содержанием в атмосфере парниковых газов. Одним из основных их представителей является углекислый газ, причем его выбросы промышленными предприятиями с каждым годом становятся все объемнее [1]. Он

является сопутствующим продуктом деятельности электростанций, ответственных за 40 % всего попадающего в атмосферу углекислого газа [2]. Помимо глобального воздействия на окружающую среду, углекислый газ пагубно влияет на организм человека [3]. Увеличение концентрации углекислого газа в атмосфере приводит к затруднению дыхания, раньше приписываемого «недостатку кислорода»,

© 2024 National University of Science and Technology “MISIS”.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

что пагубно сказывается на всех сферах человеческой жизнедеятельности. Еще одной из причин активного выделения углекислого газа являются возгорания и пожары, поскольку углекислый газ является одним из основных продуктов, наряду с угарным газом, выделяющимся при сгорании органических соединений, составляющих основу большинства окружающих человека предметов. В связи с этим, создание высокоэффективных сенсорных датчиков, способных улавливать изменение концентрации и наличие или отсутствие углекислого газа в атмосфере, позволит решить целый ряд проблем, среди наиболее важных из которых — защита окружающей среды, охрана здоровья человека, повышение пожаробезопасности помещений [4, 5].

Среди современных материалов, активно используемых в области создания сенсорных наноустройств, углеродные нанотрубки занимают лидирующие позиции благодаря своим особым поверхностным, механическим, химическим и электрическим свойствам [6—12]. Были исследованы различные возможности использования углеродных нанотрубок в качестве элементов сенсорных устройств, таких, к примеру, как газовые сенсоры. Такая область применения обусловлена тем, что они меняют свои электрические и проводящие свойства под воздействием детектируемых атомов и молекул [13]. При этом углеродные нанотрубки имеют целый ряд и других преимуществ по сравнению с традиционно используемыми в сенсорных устройствах материалами, среди которых налаженная технология их получения, возможность многократного использования, большой набор идентифицируемых газов, в отношении которых они могут быть применены [14], и их высокая чувствительность [15].

Одна из возможных проблем при использовании нанотрубок в качестве сенсоров для обнаружения вредных газов проявилась при изучении их взаимодействия с молекулами фосгена [16]. Они проявляли хорошие сорбционные свойства в отношении данного материала, но в силу неизменности своих электронных свойств, таких как ширина запрещенной зоны или изменение зарядового распределения, данные наноструктуры могли выступать лишь эффективными фильтрами, а не элементами сенсорных нанодатчиков. Для решения возникшей трудности авторами [17] был предложен механизм модификации нанотрубок различными материалами, среди которых наиболее эффективным оказался бор. При добавлении модифицирующих атомов бора взаимодействие с фосгеном приводило к появлению дополнительных уровней в зонном строении нанотрубки и наблюдался перенос электронной плотности от молекулы фосгена на поверхность нанотрубки. Поэтому, согласно теоретическим рас-

четам, углеродные боросодержащие нанотрубки являются более предпочтительным материалом для создания наносенсоров.

Вопросы взаимодействия углекислого газа с боросодержащими нанотрубками также изучается в работе [18] на примере BN-нанотрубок. В работе [19] сопоставляется улавливание углекислого газа модифицированными примесными атомами углеродных нанотрубок бора с присоединенной к ним карбоксильной группой и без нее. В ходе проведенных квантово-химических расчетов выяснилось, что между структурами происходит сенсорное взаимодействие. Причем при появлении примесных атомов бора взаимодействие реализуется эффективнее, чем при использовании только функциональной группы в качестве модифицирующего материала для углеродных нанотрубок.

Для того, чтобы предложить использование модифицированных бором углеродных нанотрубок в качестве материала сенсорных нанодатчиков для обнаружения углекислого газа, надо иметь четкое представление о процессах, сопровождающих поглощение CO_2 . Поскольку в последнее время рассматриваются несколько видов углеродных нанотрубок с различными содержаниями примесных атомов бора [20—23], то важным также является вопрос, при какой концентрации замещающих атомов бора взаимодействие с CO_2 будет наиболее эффективным.

Квантово-химические расчеты и модельные эксперименты с использованием теории функционала плотности (*Density Functional Theory* — DFT) позволяют предсказать физико-химические свойства материалов. Проведение теоретических расчетов экономит время и ресурсы, которые тратятся, как правило, на проведение экспериментов в лабораторных условиях, когда необходимо подбирать условия эксперимента. Для выяснения вопроса оптимальной концентрации атомов бора, модифицирующих поверхность углеродных нанотрубок, необходимой для эффективного детектирования углекислого газа, был проведен модельный эксперимент по изучению взаимодействия молекулы CO_2 и бороуглеродных нанотрубок, содержащих 15, 25 и 50 % примесных атомов бора, с использованием метода DFT.

Методология

Одним из наиболее апробированных и достоверных методов проведения модельных экспериментов и квантово-химических расчетов в настоящее время является теория функционала плотности. В ее основе лежит уравнение Кона—Шэма. Рассмотрим основные этапы его решения. Первым этапом является определение вида функционала для средней энергии

$$E[n] = \langle \Psi[n] | (\hat{T} + \hat{U} + \hat{V}_{\text{ext}}) | \Psi[n] \rangle = T + U + V_{\text{ext}} = T_S + V_H + V_{\text{ext}} + (T - T_S + U - V_H).$$

Последний член в данном выражении отвечает за вклад обменно-корреляционной энергии

$$V_{XC} = (T - T_S + U - V_H).$$

В это выражение входят четыре члена, парная 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

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

Для проведения варьирования зададим соответствующие соотношения:

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

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

Введение множителя Лагранжа (обозначаемого ниже $\epsilon_{i\sigma}$) задает условие нормировки.

Учитывая все проведенные выше операции, можно записать уравнение Кона—Шэма:

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

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

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

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

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

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

Уравнение Кона—Шэма является обобщенным случаем теории Хартри. Точному описанию много-

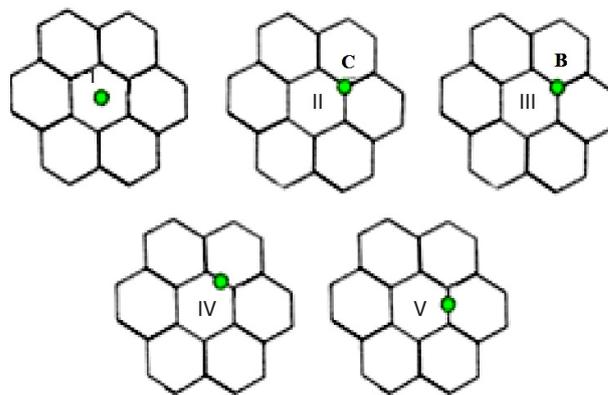


Рис. 1. Варианты ориентации молекулы углекислого газа относительно поверхности нанотрубок: I — над центром гексагона; II и III — над атомами поверхности нанотрубки; IV — над центром связи, расположенной под углом к главной продольной оси нанотрубки; V — над центром связи, перпендикулярной главной продольной оси нанотрубки

Fig. 1. Variants of orientation of carbon dioxide molecules relative to the surface of nanotubes: (I) above the center of the hexagon; (II, III) above the atoms of the surface of the nanotube; (IV) above the center of the bond located at an angle to the main longitudinal axis of the nanotube; and (V) above the center of the bond perpendicular to the main longitudinal axis of the nanotube

электронных эффектов препятствует сложность определения выражений для обменно-корреляционной энергии, т. е. именно ему отводится главная роль в рассматриваемой теории.

Для изучения чувствительности наноструктур в отношении молекул углекислого газа моделировался процесс их взаимодействия с бороуглеродными нанотрубками типов BC_5 , BC_3 , BC . Данные структурные модификации соответствуют 15, 25 и 50 % замещающих атомов бора соответственно [24—29]. Моделировалось присоединение молекул к поверхности нанотрубок. Были рассмотрены кластеры нанотрубок типа кресло (6,6), содержащие 5 бороуглеродных гексагонов вдоль продольной оси трубки, границы которых были замкнуты псевдоатомами. Таким образом, длина кластера составила 0,14 нм. Молекула CO_2 была ориентирована атомом кислорода перпендикулярно поверхности наноструктур и продольной оси нанотрубки так, что валентный угол между атомами O составлял 180° .

Были рассмотрены различные варианты положения молекулы углекислого газа над поверхностью нанотрубки (рис. 1). Молекула CO_2 приближалась к выбранным центрам поверхности, расположенным в середине кластера, чтобы на исследуемый процесс не оказывали влияние граничные эффекты. Молекула приближалась к нанотрубке с шагом 0,01 нм вдоль перпендикуляра, соединяющего молекулу и выбранный адсорбционный центр — атом C или B на поверхности, середина связи между атомами.

Модельный эксперимент

На начальном этапе было рассмотрено взаимодействие нанотрубки, содержащей 15 % примесных атомов бора, с молекулой углекислого газа. Расчеты позволили вычислить энергию процесса взаимодействия, изменения которой в зависимости от расстояния между молекулой и выбранным центром поверхности нанотрубки изображены на рис. 2. Энергия взаимодействия составила 1,6 эВ на расстоянии 0,28 нм при присоединении молекулы к атому бора поверхности нанотрубки и 1,2 эВ на расстоянии 0,3 нм для случая приближения к атому углерода (рис. 2). Для остальных вариантов ориентации молекулы (см. рис. 1) взаимодействие не происходило (на кривых взаимодействия отсутствовали энергетические минимумы).

Таким образом, выполненные квантово-химические расчеты установили, что адсорбция молекулы углекислого газа возможна лишь при расположении молекулы над атомами бора и углерода поверхности бороуглеродной BC₅ нанотрубки.

Далее была изучена возможность присоединения CO₂ к углеродным нанотрубкам с содержанием примесных атомов бора 25 %. Визуализация модели представлена на рис. 3.

Было установлена возможность присоединения молекулы углекислого газа не только при локализации сорбционных центров на атомах бора и углерода, но и на центрах связей между ними. Энергетические характеристики данных процессов, а также сводные характеристики сорбционного взаимодействия молекулы углекислого газа с поверхностью бороуглеродных нанотрубок, содержащих различные концентрации атомов бора, приведены в табл. 1.

Также было установлено, что в случае нанотрубки с равновесной концентрацией бора и углерода (BC-нанотрубки) адсорбция реализуется только в положениях над атомами бора и углерода.

Для оценки изменения электронно-энергетической структуры нанотрубок, взаимодействующих с углекислым газом, было проведено сопоставление значений ширины запрещенной зоны до и после адсорбции. Результаты расчетов ширины запрещенной зоны, вычисленной как разность между энергиями нижней вакантной и верхней занятой молекулярных орбиталей, приведены в табл. 2.

Заключение

Благодаря анализу результатов модельного эксперимента стало возможным оценить зависимость сорбционных характеристик боросодержащих нанотрубок в отношении молекулы углекислого газа от количества атомов бора, замещающих атомы углерода в углеродных нанотрубках. Были

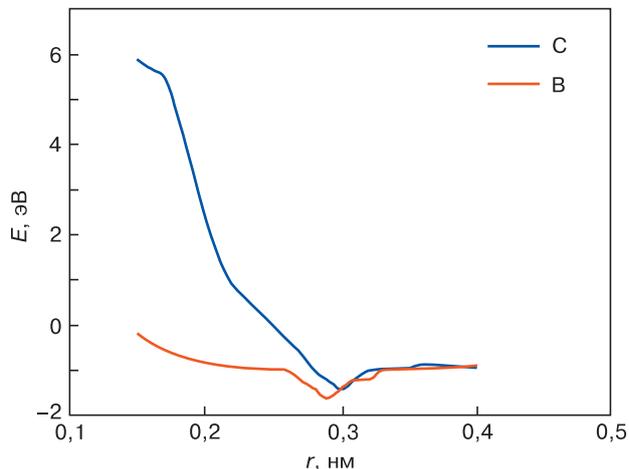


Рис. 2. Энергетическая кривая взаимодействия CO₂ с поверхностью BC₅ нанотрубки при присоединении к атому С или В

Fig. 2. Energy curve of the interaction of CO₂ with the surface of the BC₅ nanotube when they are attached to C or B atoms

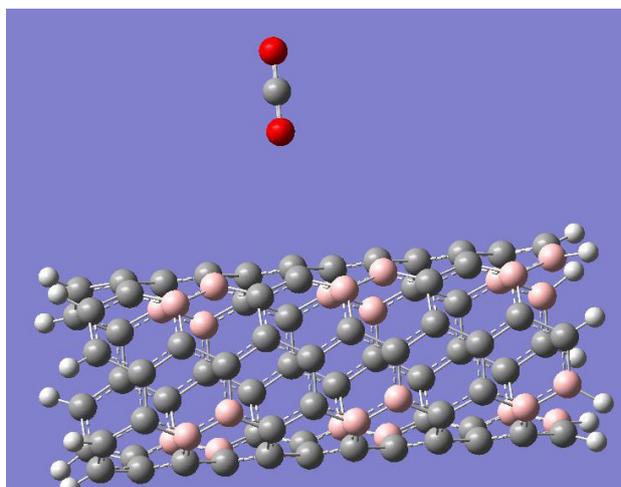


Рис. 3. Модель взаимодействующих молекул CO₂ и бороуглеродной BC₃-нанотрубки

Fig. 3. Model of interacting CO₂ molecules and boron-carbon BC₃ nanotubes

Таблица 1 / Table 1

Основные энергетические параметры добавления молекулы диоксида углерода к BC₅-нанотрубке без модификации и нанотрубке, модифицированной COOH группой

The main energy parameters of adding a carbon dioxide molecule to a BC₅ nanotube without modification and a nanotube modified with the COOH group

Расположение атома Н	R _{ад}			E _{ад} , эВ		
	BC ₅	BC ₃	BC	BC ₅	BC ₃	BC
Над атомом В	2,9	2,8	2,8	1,6	0,0014	0,03
Над атомом С	3,0	3,0	2,8	1,4	0,0057	0,03
Над центром связи В—С		2,9	—		0,0041	—

Таблица 2 / Table 2

Изменение ширины запрещенной щели углеродных боросодержащих нанотрубок при взаимодействии с молекулой углекислого газа
 Change in the band gap width of carbon boron nanotubes upon interaction with a carbon dioxide molecule

Нанотрубка	Адсорбционный центр	ΔE_g , эВ	Q	
			CO ₂	НТ
BC ₅	Атом В	0,46	-0,31	1,04
	Атом С	0,46	-0,31	-0,31
BC ₃	Атом В	0,64	-0,39	0,87
	Атом С	0,64	-0,39	-0,37
BC	Атом В	0,60	-0,38	0,85
	Атом С	0,60	-0,38	-0,78
Нанотрубка типа BC ₅ без CO ₂		0,47		
Нанотрубка типа BC ₃ без CO ₂		0,64		
Нанотрубка типа BC без CO ₂		0,56		

Примечание. ΔE_g — ширина запрещенной зоны изучаемых наноструктур; Q — заряд на атоме поверхности и атоме кислорода углекислого газа.

рассмотрены три концентрации примесных атомов бора в нанотрубке: 15, 25 и 50 %. Выполненные квантово-химические расчеты позволили установить, что адсорбция молекулы углекислого газа возможна при расположении молекулы над атомами бора и углерода поверхности для всех рассмотренных бороуглеродных нанотрубок. При этом в случае концентрации бора 25 % становится возможным присоединение молекулы CO₂ и к середине связи между атомами поверхности.

По мере увеличения концентрации примесных атомов бора наблюдается уменьшение расстояния адсорбции, а при минимальной концентрации — энергия адсорбции является максимальной. Таким образом, можно сделать вывод, что минимальная концентрация примесных атомов бора является наиболее эффективным вариантом модифицирования углеродной нанотрубки для создания фильтра углекислого газа на ее основе.

Во всех рассмотренных случаях наблюдалось изменение электронной плотности вблизи адсорбционного центра. В случае присоединения молекулы углекислого газа к атому бора поверхности нанотрубки происходит перенос плотности на атом кислорода молекулы, а при присоединении к атому углерода — на поверхность нанотрубки.

Таким образом, использование модифицированных бором углеродных нанотрубок является перспективным для создания сенсорных нанодатчиков. Подобные приборы работают на основании фиксации изменения проводящих характеристик системы при возникновении дополнительных носителей заряда, вызванных перераспределением электронной плотности [30].

Итак, исследованные модифицированные бором углеродные нанотрубки можно рекомендовать в качестве материалов сенсорных нанодатчиков, способных обнаруживать и детектировать даже минимальное количество углекислого газа. Функционирование датчиков основано на сорбционном взаимодействии бороуглеродных нанотрубок с молекулами CO₂ и последующем детектировании, возможным благодаря изменению зарядового распределения на поверхности нанотрубок и проводящего состояния наносистем.

Библиографический список / References

- Zhiqiang G., Boru Y., Jinping J., Xuehong W. Research progress on carbon dioxide reduction coupled with the formation of C–O bonds to oxygenated compounds. *Asian Journal of Organic Chemistry*. 2023; 12(5): e202300097. <https://doi.org/10.1002/ajoc.202300097>
- Srivastava S., Singh P., Gupta G. Transition metal tellurides based gas sensors for efficient sensing at room temperature: Progress and prospective. *Micro and Nanostructures*. 2022; 172: 207452. <https://doi.org/10.1016/j.micrna.2022.207452>
- Struzzi C., Scardamaglia M., Casanova-Chafer J., Calavia R., Colomer J.-F., Kondyurin A., Bilek M., Britun N., Snyders R., Llobet E., Bittencourt C. Exploiting sensor geometry for enhanced gas sensing properties of fluorinated carbon nanotubes under humid environment. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2019; 281: 945–952. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2018.10.159>
- Ghosh D., Ghorai P., Debnath S., Roy D., Samanta A., Maiti K.S., Sarkar S., Roy D., Sarkar K., Banerjee R. Ch. 6. Impression of climatic variation on flora, fauna and human Being: A present state of art. In: Dubey A.K., Kumar A., Narang S.K., Khan M.A., Srivastav A.L. (eds). *Visualization techniques for climate change with machine learning and artificial intelligence*; 2023. P. 101–122. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-99714-0.00004-2>
- Shrisha, Wu Ch.-M., Kebena G.M., Guan-Ying C., Dong-Hau K., Noto S.G. Highly efficient reduced tungsten oxide-based hydrogen gas sensor at room temperature. *Materials Science and Engineering: B*. 2023; 289: 116285. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2023.116285>
- Yao J., Nan Z., Juhua X., Quan J., Xiaoguang S., Xiaolong W. Co₃O₄/In₂O₃ p–n heterostructures based gas sensor for efficient structure-driven trimethylamine detection. *Ceramics International*. 2023; 49(11(Pt A)): 17354–17362. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.02.103>
- Лукьянов Г.Н. Сенсоры и датчики физических величин. СПб.: НИУ ИТМО; 2020. 57 с.
- Lukyanov G.N. Sensors and sensors of physical quantities. St. Petersburg: NIU ITMO; 2020. 57 p. (In Russ.)
- Xinqi L., Huiling Y., Qian Z., Bingyuan H., Fang L., Hejun G., Hongquan F., Juan Z., Yunwen L. Understanding the adsorption sites on nitrogen- and oxygen-doped carbon

nanotubes for iodine uptake. *Applied Surface Science*. 2023; 629: 157387. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.157387>

9. Cheng Z., Jiabin S., Shanshan X., Jing W., Haiquan L., Siqi X., Yingjie P., Yong Z., Yongheng Z. *Food Chemistry*. 2022; 392: 133318. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.133318>

10. Zeyao F., Xueli Y., Zhenhua L., Caixuan S., Guofeng P., Hao Z. Ultra-efficient trimethylamine gas sensor based on Au nanoparticles sensitized WO₃ nanosheets for rapid assessment of seafood freshness. Construction of efficient TEA gas sensor based on zinc vanadate for ppb-level detection. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2023; 156: 107285. <https://doi.org/10.1016/j.ms-sp.2022.107285>

11. Xue Sh.-Sh., Tang Zh.-H., Zhu W.-B., Li Y.-Q., Huang P., Fu Sh.-Y. Stretchable and ultrasensitive strain sensor from carbon nanotube-based composite with significantly enhanced electrical and sensing properties by tailoring segregated conductive networks. *Composites Communications*. 2022; 29: 100987. <https://doi.org/10.1016/j.coco.2021.100987>

12. Singh K., Sharma S., Singh B., Gupta M., Tripathi C.C. Fabrication of graphene, graphite and multi wall carbon nano tube based thin films and their potential application as strain sensor. *Thin Solid Films*. 2022; 761: 139540. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2022.139540>

13. Martins F.G., Thakur C.K., Karthikeyan C., Moorthy N.S.H.N., Sousa S.F. Use of lysinated multiwalled carbon nanotubes with carbohydrate ligands as a doxorubicin nanocarrier: A molecular dynamics analysis. *Carbon Trends*. 2023; 12: 100280. <https://doi.org/10.1016/j.car-tre.2023.100280>

14. Seman R.N.A.R., Azam M.A., Mohamad A. Systematic gap analysis of carbon nanotube-based lithium-ion batteries and electrochemical capacitors. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2017; 75: 644—659. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.10.078>

15. Andalouci A., Roussigné Y., Gangloff L., Legagneux P., Farhat S., Chérif S.M. 1D cobalt nanocrystals confined in vertically aligned carbon nanotubes: One-step synthesis and magnetic properties. *Journal of Alloys and Compounds*. 2023; 960: 170984. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.170984>

16. Sheng Z., Xiaoxin Y., Yixi Y., Xinrui Z., Lan L., Xiao W., Gaoyi H., Yan L. One-dimensional heterostructures of polyoxometalate-encapsulated carbon nanotubes for enhanced capacitive energy storage. *Cell Reports Physical Science*. 2023; 4(6): 101446. <https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2023.101446>

17. Jawad A., Zhiguang Z. Properties of concrete with addition carbon nanotubes: A review. *Construction and Building Materials*. 2023; 393: 132066. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.132066>

18. Xinyue Z., Guili Y. Overlapping of linear optical spectra in metallic carbon nanotubes, Controlled by applied axial magnetic field and uniaxial strain. *Physica B: Condensed Matter*. 2023; 666: 415102. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415102>

19. Hailong L., Cheng Z., Ningbo L., Miao Z. Microcracked strain sensor based on carbon nanotubes/copper composite film with high performance and waterproof property for underwater motion detection. *Composites Part B: Engineering*. 2023; 254: 110574. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2023.110574>

20. Santhosh N.M., Vasudevan A., Jurov A., Korent A., Slobodian P., Zavašnik J., Cvelbar U. Improving sensing properties of entangled carbon nanotube-based gas sensors by atmospheric plasma surface treatment. *Microelectronic Engineering*. 2020; 232: 111403. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2020.111403>

21. Katta S.S., Yadav S., Singh P., Bhushan S., Srivastava A. Investigation of pristine and B/N/Pt/Au/Pd doped single-walled carbon nanotube as phosgene gas sensor: A first-principles analysis. *Applied Surface Science*. 2022; 588: 152989. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.152989>

22. Sawant S.V., Patwardhan A.W., Joshi J.B., Dasgupta K. Boron doped carbon nanotubes: Synthesis, characterization and emerging applications – A review. *Chemical Engineering Journal*. 2022; 427: 131616. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.131616>

23. Мансуров Р.Ш., Гурин М.А., Рубель Е.В. Влияние концентрации углекислого газа на организм человека. *Universum: Технические науки*. 2017; 8(41): 20—23.

Mansurov R.S., Gurin M.A., Rubel E.V. The effect of carbon dioxide concentration on the human body. *Universum: Technical Science*. 2017; 8(41): 20—23. (In Russ.)

24. Zaporotskova I.V., Boroznina N.P., Dryuchkov E.S., Shek T.S., Butenko Y.V., Zaporotskov P.A. Surface functionalization of CNTs by a nitro group as a sensor device element: Theoretical research. *Journal of Advanced Materials and Technologies*. 2021; 6(2): 113—121. <https://doi.org/10.17277/jamt.2021.02.pp.113-121>

25. Boroznina N., Zaporotskova I., Boroznin S., Dryuchkov E. Sensors based on amino group surface-modified CNTs. *Chemosensors*. 2019; 7(1): 11. <https://doi.org/10.3390/CHEMOSENSORS7010011>

26. 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>

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 Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2022; 25(4): 261—270. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-261-270>

27. Boroznin S.V., Zaporotskova I.V. Sensory properties of carbon nanotubes containing impurity boron atoms. *Letters on Materials*. 2022; 12(3): 214—218. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2022-3-214-218>

28. 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>

29. Boroznina N.P., Zaporotskova I.V., Boroznin S.V., Kozhitov L.V., Zaporotskov P.A. In: *The 5th World congress on recent advances in nanotechnology (RAN'20)*. October 2020; 2020. No 125. <https://doi.org/10.11159/icnncf.20.125>

30. Khan F., Julien C.M., Islam S.S. Fabrication of multiwalled carbon nanotubes/MoS₂ nanocomposite: Application as temperature sensor. *FlatChem*. 2023; 40: 100521. <https://doi.org/10.1016/j.flatc.2023.100521>

Информация об авторах / Information about the authors

Борознин Сергей Владимирович — канд. физ.–мат. наук, доцент, заведующий кафедрой судебной экспертизы и физического материаловедения, Волгоградский государственный университет, Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0110-2271>; e-mail: boroznin@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

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

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

Кожитов Лев Васильевич — доктор техн. наук, профессор, 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@misis.ru

Попкова Алёна Васильевна — канд. тех. наук, старший научный сотрудник, Научно–производственное объединение «Луч», ул. Железнодорожная, д. 24, Подольск, 142103, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4657-9305>; e-mail: popkova-alena@rambler.ru

Sergey V. Boroznin — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Associate Professor, Head of the Department of Forensic Science and Physical Materials Science, Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0110-2271>; e-mail: boroznin@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

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

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

Lev V. Kozhitov — Dr. Sci. (Eng.), Professor, 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@misis.ru

Alena V. Popkova — Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, JSC “Research Institute NPO “LUCH”, 24 Zheleznodorozhnaya Str., Podolsk 142103, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4657-9305>; e-mail: popkova-alena@rambler.ru

*Поступила в редакцию 29.10.2023; поступила после доработки 26.04.2024; принята к публикации 15.05.2024
Received 29 October 2023; Revised 26 April 2024; Accepted 15 May 2024*

* * *