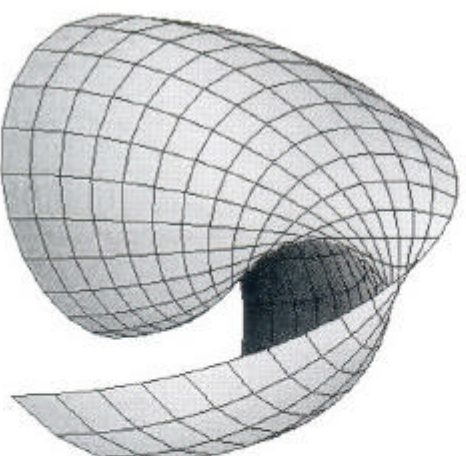


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)
АССОЦИАЦИЯ «МЕХАНИКА И ТЕХНОЛОГИИ»

МАТЕРИАЛЫ

**ХІХ МЕЖДУНАРОДНОГО СИМПОЗИУМА
«ДИНАМИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ
ПРОБЛЕМЫ МЕХАНИКИ КОНСТРУКЦИИ
И СПЛОШНЫХ СРЕД»**
ИМ. А.Г. Горюкова

Том 1



Москва 2013

6. *Alexey A. Kireevkov*. Influence of the combined dry friction on dynamics of the rectangular plate on a plane // 6th European Solid Mechanics Conference ESMC 2006 28 August – 1 September, 2006 Видарес, Нагару.

7. *Гончаренко В. И.* Устойчивость крупномасштабной механической системы с качением при структурных изменениях. – Дисс. На соиск. уч. степени канд. физ.-мат. наук. – Ин-т механики АН УССР. – Киев, 1986. – 140 с.

ОСОБЕННОСТИ КРАЕВОЙ МОДИФИКАЦИИ НАНОТРУБНЫХ СИСТЕМ КАРБОКСИЛЬНОЙ ГРУППЫ

Борозин С.В., Вилкеева Д.Э., Запорожкова И.В., Поликсаров Д.И., Поликсарова Н.П., Шкодин А.В.

(Волгоград)

Нанотрубки сочетают ряд свойств, благодаря которым они могут использоваться для создания уникального острия для атомно-силового микроскопа. Наиболее интересные возможности открываются при использовании в атомно-силовой микроскопии химически модифицированных нанотрубок со специально подобранными функциональными группами на конце острия. В этом случае удается исследовать не только рельеф поверхности исследуемого образца, но и химический состав поверхности. К настоящему времени экспериментально получены углеродные нанотрубки, открытому которой заканчивается карбоксильной –СООН группой [1]. Теоретически изучен механизм присоединения этой группы к краевому атому углерода трубки [2] и выполнено моделирование взаимодействия функциональной группы с атомами соседних метяллов, которые могут быть идентифицированы с помощью такой гранично-модифицированной нанотрубчатой системы [3]. Однако в настоящее время большинство исследований уделяется неуглеродным борным и боронитридным нанотрубкам, обладающим большей стабильностью проводящих характеристикам не зависящих от типа и диаметра нанотруб. Поэтому можно предположить, что создание гранично-модифицированных сенсорных систем на их основе возможно и эффективно.

Нами были произведены расчёты взаимодействия группы –СООН и полубесконечных боронитридных трубуленов (8, 8), (10, 10), (10, 0), (12, 0) в рамках модели молекулярного кластера с использованием полумпирической расчётной схемы MNDO. Дипольная граница кластера замыкалась псевдоатомами, в качестве которых были выбраны атомы водорода, а к граничному атому бора с другой стороны присоединялась карбоксильная группа. Процесс присоединения моделировался путем пошагового приближения (с шагом 0,1 Å) карбоксильной группы вдоль перпендикуляра, проведённого к границе трубки и

ориентированного на атом бора. В результате были построены кривые взаимодействия системы "нанотрубка - СООН", анализ которых показал наличие энергетического минимума, соответствующего результату образования химической связи между трубкой и функциональной группой для каждого исследуемого случая. Минимум энергии расположен на расстоянии 1,5Å от граничной трубки. Аналогично был произведен анализ возможности присоединения –СООН к атому азота на открытой границе боронитридного трубулена. Как и в предыдущем случае, на кривых взаимодействия отчетливо виден минимум на расстоянии 1,3Å от трубулена – точка образования химической связи для атома азота и карбоксильной группы.

Далее выполнено моделирование процесса создания краевой модификации функциональных и триангулярных борных нанотрубок карбоксильной группой. Построенные энергетические кривые этого процесса иллюстрируют возможность создания сенсорной нанотрубчатой системы на основе однослойного борного трубулена, химически чувствительного к атомам и молекулам.

Таким образом, использование химически модифицированных нанотрубок в атомно-силовой микроскопии – путь к созданию зондов с четко выраженными химическими характеристиками.

Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. (Соглашение № 14.В37.21.0080).

Литература

1. *Wong S.S., Josevich E., Wokley A.T., Skeing C.L., Lieber C.M.* Covalently functionalized nanotubes as nanometer sized probes in chemistry and biology. // Nature. – 1998. - V. 52. – P. 394.
2. *Запорожкова, И.В.* Углеродные и неуглеродные наноматериалы и композиционные структуры на их основе: строение и электронные свойства. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2009. – 490с.
3. *Polikarova N.P., Vilkeeva D.E., Zaporozhkov P.A.* Sensor Activity of Carbon nanotubes// Nanoscience & nanotechnology 2012. 13th International Workshop on Nanotechnology. 1 – 4 October 2012. Frascati National Laboratories INFN. Book of abstract. – Italy, Frascati, 2012, p.111-112