

Қазақстан Республикасы Білім және Ғылым Министрлігі әл-Фараби атындағы
Қазақ ұлттық университеті Мәскеу болат және қорытпалар институты
Д.Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан Мемлекеттік техникалық
университеті Жану проблемаларының институты

The Proceedings of X INTERNATIONAL CONFERENCE

“Advanced technologies, equipment and analytical systems
for material sciences and nanomaterials”



“Материалтану мен наноматериалдарға арналған перспективалық
технологиялар, жабдықтар және аналитикалық жүйелер”

“Перспективные технологии, оборудование и аналитические
системы для материаловедения и наноматериалов”

Almaty, Republic of Kazakhstan
June 5-7, 2013

Алматы қ., Қазақстан Республикасы
5-7 маусым 2013 жыл

СЕНСОРНАЯ АКТИВНОСТЬ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, МОДИФИЦИРОВАННЫХ КАРБОКСИЛЬНОЙ ГРУППОЙ: ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Д.Э. Вилькева¹, И.В. Запорожцова¹, Н.П. Поликарпова¹, Е.В. Якушко²

¹ Волгоградский государственный университет, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения.

Адрес: 400062, Россия, Волгоград, Университетский пр-т, 100

² НИТУ «МИСиС»

ВВЕДЕНИЕ

Углеродные нанотрубки сочетают ряд свойств, благодаря которым они могут использоваться для создания уникального острья для атомно-силового микроскопа [1-3]. Исключительно большое отношение длины к диаметру нанотрубки позволяет изучать с помощью такого микроскопа, например, структуру глубоких трещин в микроэлектронных устройствах [3]. Совершенно новые возможности открываются при использовании в атомно-силовой микроскопии химически модифицированных нанотрубок со специально подобранными функциональными группами на конце острья. В этом случае удается исследовать не только рельеф поверхности исследуемого образца, но и химический состав поверхности. Одна из наиболее известных функциональных групп – это карбоксильная группа –COOH. В [4] описан способ насыщения открытой границы углеродной нанотрубки этой группой. Как известно, карбоксильная группа – гидрофильна, она хорошо связывается с водой и полярными, например, кислородсодержащими органическими соединениями. Поэтому карбоксиллированное острое атомно-силового микроскопа, оснащенное нанотрубкой со специальным образом выбранной химической группой, становится химически чувствительным. В [5,6] исследованы сенсорные свойства зонда, выполненного на основе модифицированной карбоксильной группой углеродной нанотрубки, в отношении атома и иона натрия. Изучен процесс сканирования произвольной поверхности, содержащей подлежащий инициализации атом, и определена активность функциональной группы в отношении выбранного элемента. Доказано, что однослойная углеродная нанотрубка, гранично-модифицированная карбоксильной группой –COOH, проявляет сенсорную активность в отношении атома и иона щелочного металла натрия при взаимодействии выбранных частиц с краевыми атомами ионами кислорода или водорода карбоксильной группы. Представляется необходимым расширить линейку атомов металлов для ответа на вопрос об универсальности сенсорных свойств модифицированных УНТ в отношении щелочных металлов. С этой целью нами выполнены теоретические расчеты взаимодействия атомов металлов калия, лития и магния с однослойной углеродной нанотрубкой (6, 6), модифицированной карбоксильной группой. Компьютерное моделирование и теоретические расчеты выполнены с использованием модели молекулярного кластера и полуэмпирической квантово-химической расчетной схемы MNDO.

Современная судебная экспертиза обладает широким спектром возможностей обнаружения и идентификации различных преступных материалов, а так же следов их хранения. Но, при этом, приборы, позволяющие регистрировать искомые объекты, рассчитаны на достаточное количество анализируемого вещества, что не всегда может выполняться в стандартных условиях. Современная криминалистика нуждается в создании высокочувствительного, рассчитанного на малейшие примеси, прибора - так называемого «зонда», мобильность и точность которого позволит идентифицировать вещества как в лабораторных условиях, так и, непосредственно, на месте преступления. Это, в первую очередь, необходимо для отождествления наркотических средств и психотропных веществ, как одного из главных объектов преступной деятельности. В работе изучена возможность создания такого зонда на основе гранично-модифицированной УНТ и исследована его активность в отношении молекулы синтетического наркотического вещества фенамин.