

## ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУМЕРНОГО БОРА

И.А. Какорин, магистр  
Волгоградский государственный университет  
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2024-3-4-211-214

**Аннотация.** В статье исследуются адсорбционные свойства двумерного бора, уделяется особое внимание его уникальной структуре и электронной конфигурации. 2D-бор демонстрирует более сложное расположение атомов, обеспечивая разнообразные места для адсорбции атомов. Высокое соотношение площади поверхности к объему делает его привлекательным для применений, требующих эффективного связывания молекул, таких как хранение и разделение газов. В работе изучен механизм адсорбции атома кислорода на пяти различных адсорбционных центрах плоского бора, для расчетов была применена расчетная схема MNDO.

**Ключевые слова:** плоский бор, метод MNDO, адсорбция, атом кислорода, хранение газов.

Область двумерных (2D) материалов значительно расширилась в последние годы благодаря открытию графена, а затем и множеству новых материалов с уникальными свойствами. Среди этих новых материалов двумерный бор, который привлек значительное внимание благодаря своей структуре и потенциальным применениям в различных научных областях. В центре внимания исследований этого материала – выяснение его адсорбционных свойств, которые открывают значительные перспективы для различных технологических применений [1].

Адсорбционное поведение двумерного бора неразрывно связано с его атомной структурой, которая заметно отличается от обычных двумерных материалов на основе углерода, таких как графен. В то время как графен имеет гексагональную решетку атомов углерода, 2D-бор демонстрирует более сложную структуру, характеризующуюся треугольными и гексагональными мотивами. Это структурное разнообразие не только обеспечивает множество мест связывания адсорбатов, но также управляет электронными свойствами материала, тем самым формируя его адсорбционные характеристики [2].

Отличительной особенностью 2D-бора является его исключительно высокое со-

отношение площади поверхности к объему, что является следствием его двумерной природы. Это свойство делает его очень привлекательным для применений, основанных на адсорбции, где максимизация площади поверхности имеет решающее значение для эффективных процессов связывания и разделения молекул. Например, хранение газа может значительно выиграть от большой площади поверхности двумерного бора, открывая перспективы повышения производительности в приложениях хранения и транспортировки энергии [3, 4].

Изучение процесса адсорбции атомов на поверхности борного слоя изучалось в рамках расчетной схемы MNDO на примере атома кислорода. Геометрия системы оптимизировалась в процессе расчета [5].

Рассмотрены 5 вариантов ориентации адсорбирующегося атома кислорода относительно поверхности монослоя бора:

- 1) над атомом бора, образующего 4 связи с соседними атомами;
- 2) над атомом бора, образующего 5 связей с соседними атомами;
- 3) над серединой гексагона;
- 4) над серединой В-В связи, образующую сторону гексагона;
- 5) над серединой В-Всвязи образующую сторону в треугольнике (рис. 1).

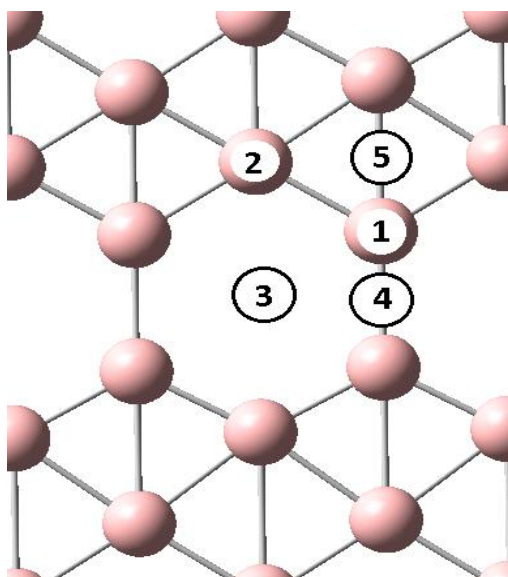


Рис. 1. Пять вариантов расположения адсорбирующегося атома кислорода над поверхностью монослоя бора

Процесс адсорбции в 1 и 2 случае моделировался поэтапному приближению к атому бора, который находился в середине борного кластера, чтобы минимализировать влияние краевых эффектов. Адсорбирующийся атом приближался с шагом  $0.1\text{Å}$  к слою бора вдоль отрезка перпенди-

кулярного слою и соединяющего адатом с атомом бора. Пошаговое приближение атома к гексагональному бору позволило построить профиль поверхности потенциальной энергии системы «плоский бор – атом кислорода» (рис. 2).

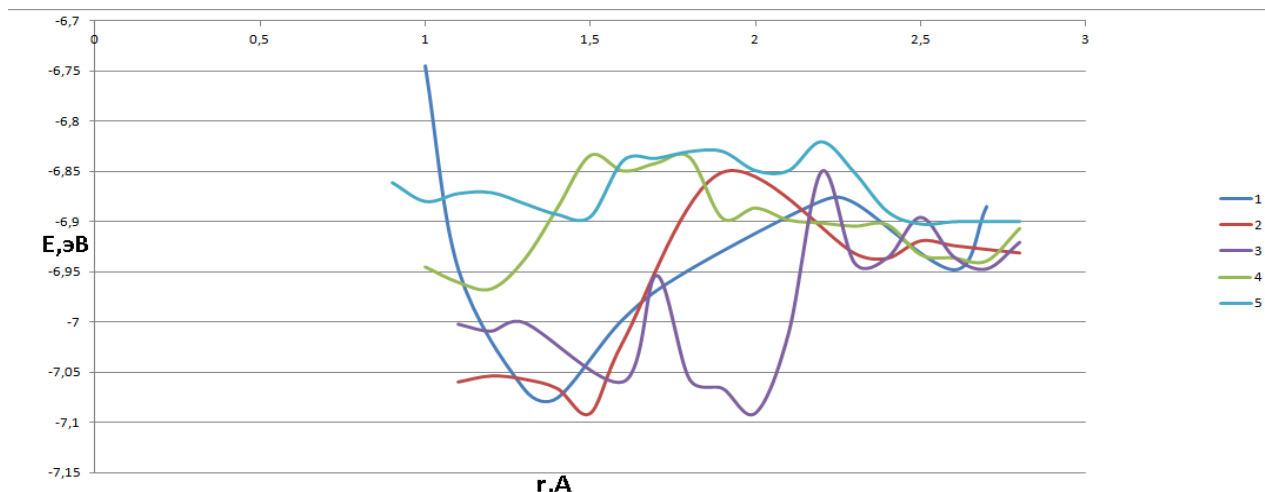


Рис. 2. Профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия атомов кислорода с поверхностью борного слоя для пяти вариантов расположения их относительно борного слоя

В 3-5 случаях атом кислорода пошагово подходил к ложной точке, которая располагалась над центром борного гексагона, либо над центром связи В-В.

Анализ энергетических кривых адсорбционного процесса показал, что атомы кислорода адсорбируются на монослое бора, что подтверждается существованием

минимума на графике, данный факт иллюстрирует образование химической связи в данной точке, т.е. реализуется химическая адсорбция (рис. 2). Основные энергетические характеристики процесса адсорбции атома кислорода на поверхности борного слоя представлены в таблице.

Таблица 1. Основные характеристики адсорбции атома кислорода на поверхности плоского бора: Еад – энергия адсорбции, Рад – расстояния адсорбции, Еа – энергия активации (энергетический барьер)

№ варианта	Еад, эВ	Рад, А	Еа, эВ
1	7,075	1,35	1,10
2	7,092	1,5	1,12
3	7,096	1,9	1,08
4	6,97	1,2	0,07
5	6,9	1,46	0,08

Адсорбционное поведение двумерного бора включает в себя целый спектр механизмов, включая физическую и хемосорбцию, в зависимости от таких факторов, как природа адсорбата и химия поверхности материала. Присутствие ненасыщенных атомов бора на поверхности создает активные центры, способствующие химиче-

скому связыванию, что приводит к повышению стабильности и селективности в процессах адсорбции. Этот двойной механизм расширяет сферу потенциальных применений двумерного бора, начиная от газового зондирования и заканчивая катализом и не только.

#### Библиографический список

1. Панченко, А.Н. Двумерные материалы, их свойства и применение / А.Н. Панченко // Международный журнал гуманитарных и естественных наук. – 2023. – № 2-2(77). – С. 132-134. – DOI 10.24412/2500-1000-2023-2-2-132-134.

2. Маслова, О.А. Компьютерное моделирование взаимодействия между молекулой оксида углерода и наночастицей сотового борофена методом функционала плотности – вандер-Ваальса / О.А. Маслова, С.А. Безносюк, Е.В. Ромашова // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2020. – Т. 17, № 2. – С. 182-187. – DOI 10.25712/ASTU.1811-1416.2020.02.007.

3. Эволюционный поиск и расшифровка двумерной структуры нового материала – оксинитрида бора / З.И. Попов, К.А. Тихомирова, В.А. Демин [и др.] // Биохимическая физика: труды XXI ежегодной молодежной конференции с международным участием ИБХФ РАН-вузы, Москва, 15-16 ноября 2021 года. – Москва: Российский университет дружбы народов (РУДН), 2022. – С. 73-75.

4. Мурзаханов, Ф.Ф. Вакансионные центры в карбиде кремния 4H-SiC и нитриде бора hBN: электронная структура и спиновая поляризация триплетных состояний: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Мурзаханов Фадис Фанилович, 2023. – 124 с.

5. Boroznina, E.V. Boron monolayer X3-type. formation of the vacancy defect and pinhole / E.V. Boroznina, O.A. Davletova, I.V. Zaporotskova // Журнал нано- и электронной физики. – 2016. – Vol. 8, № 4. – P. 04054. – DOI 10.21272/jnep.8(4(2)).04054.

**STUDY OF ADSORPTION CHARACTERISTICS OF TWO-DIMENSIONAL BORON**

**I.A. Kakorin**, *Student*  
**Volgograd State University**  
**(Russia, Volgograd)**

**Abstract.** *The article examines the adsorption properties of two-dimensional boron, paying special attention to its unique structure and electronic configuration. 2D boron exhibits a more complex arrangement of atoms, providing a variety of sites for atom adsorption. Its high surface area to volume ratio makes it attractive for applications requiring efficient binding of molecules, such as gas storage and separation. In this work, the mechanism of adsorption of the oxygen atom on five different adsorption centers of planar boron was studied; the MNDO calculation scheme was used for calculations.*

**Keywords:** *flat boron, MNDO method, adsorption, oxygen atom, gas storage.*