



DOI: <https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2021.4.5>

УДК 544.2

ББК 24.5

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БОРОУГЛЕРОДНОГО СЛОЯ BC_3 С КОМПОНЕНТАМИ ДЫМА SO_2 , H_2S И CO

Евгения Викторовна Борознина

Кандидат физико-математических наук, доцент,
кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
boroznina.evgeniya@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Олеся Александровна Какорина

Кандидат физико-математических наук, и.о. заведующего кафедрой информационной безопасности,
Волгоградский государственный университет
davletova.olesya@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Константин Олегович Смирнов

Старший преподаватель, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
smirnov@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. В данной работе изучаются особенности взаимодействия двумерного слоя BC_3 с молекулами, входящими в состав дыма и являющимися опасными для здоровья человека. Нами были выбраны следующие молекулы: угарный газ (CO), сероводород (H_2S), сернистый газ (SO_2). Цель исследования: установление возможности создания на базе слоистого материала BC_3 сенсорного устройства, способного фиксировать присутствие рассматриваемых молекул при их низкой объемной концентрации в воздухе. Оксид углерода, он же угарный газ, считается наиболее опасным в случае возникновения пожара. Угарный газ, в сравнении с кислородом, может более эффективно примыкать к гемоглобину, что влечет за собой ухудшение способности крови поглощать кислород. В связи с этим наступает кислородное голодание. Сернистый газ SO_2 бесцветен, но обладает довольно резким запахом и образуется в случае, если в горючем или взрывчатом веществах содержится сера. Кроме того, сернистый газ ядовит и может образовать серную кислоту на поверхности глаз или дыхательных путей в случае их поражения. Может вызывать отек гортани и легких, воспаление бронхов. Опасная концентрация для жизни составляет всего 0,05 % даже при кратковременном дыхании. Сероводород (H_2S) так же, как и сернистый газ, бесцветен, однако имеет сладковатый вкус

и запах. Способен выделяться во время пожаров и при гниении органических веществ. Крайне ядовитый газ, поражает глаза и дыхательные пути. Смертельно опасная концентрация даже в случае кратковременного дыхания всего 0,1 % [1; 2].

Ключевые слова: двумерный слой, угарный газ, сероводород, сернистый газ, сенсорное устройство, DFT, B3LYP.

Монослой BC_3 представляет собой гексагональную сетку из атомов бора и углерода. Для моделирования процесса присоединения атомов (CO , SO_2 , H_2S) была смоделирована расширенная элементарная ячейка BC_3 , состоящая из 24 атомов бора и 72 атомов углерода. Краевые эффекты были исключены путем замыкания псевдоатомами водорода. Пример расширенной элементарной ячейки BC_3 представлены на рисунке 1. Расчеты проводились в рамках теории функционала плотности, с использованием функционала B3LYP, который хорошо себя зарекомендовал для расчета графеноподобных структур и имеет хорошую сходимость с экспериментальными данными. Нужно отметить, что данный функционал превосходит по своей точности все известные неэмпирические методы и хорошо применим для поиска основных электронно-энергетических характеристик многоатомных систем [3; 4].

Длины связей B-C были нами оптимизированы для используемого метода и функционала и составили 1,48 Å.

Нами была рассчитана энергия связи атомов рассматриваемого фрагмента одноатомного слоя BC_3 по формуле (1). Данные для расчета были получены путем квантово-химических расчетов и представлены в таблице.

$$E_{св} = E_{BC_3} - (N_B E_B + N_C E_C). \quad (1)$$

Тот факт, что значение энергии связи получилось отрицательным, подтверждает стабильность рассматриваемой структуры [5; 6].

В данном пункте представлены результаты исследования процесса приближения молекулы монооксида углерода CO (молекула угарного газа) к слою BC_3 . Были рассмотрены бездефектный и дефектный слой. В качестве дефекта рассматривалась одиночная вакансия в центре слоя. Для получения энергетической зависимости процесса присоединения CO к слою, молекула CO нормально приближалась к центральным атомам (B и C) или к фиктивному атому, который отождеств-

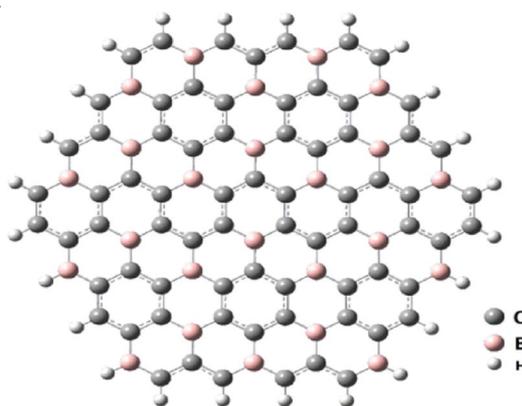


Рис. 1. Фрагмент расширенной элементарной ячейки BC_3

Энергии одиночных атомов и слоя BC_3 (E), N – число атомов в слое,

$E_{св}$ – энергия связи слоя BC_3

	Атом B	Атом C	BC_3
E , эВ	-24,39	-37,39	-3314,18
N	24	72	–
$E_{св}$, эВ	-37,36		

лялся нами как вакансия (рис. 2 и 3). Шаг, с которым происходило приближение CO составлял 0,1 Å, молекула была развернута к слою атомом углерода. Расчет потенциальной энергии на каждом шаге позволил получить энергетические кривые приближения молекулы угарного газа к выбранным адсорбционным центрам.

Формула для проведения нормировки потенциальной энергии структуры:

$$E = E_{\text{BC}_3 + \text{CO}} - (E_{\text{BC}_3} + E_{\text{CO}}). \quad (2)$$

В случае приближения CO к бору, минимум энергии не наблюдается рисунке 2а.

В случае приближения атома CO к фиктивному атому (вакансия), на графике наблюдается минимум энергии, приходящийся на расстояние 1,4 Å (рис. 3а). При этом происходит незначительное изменение ширины запрещенной зоны рассматриваемой структуры с атомом CO, $\Delta E_g \sim 0,01$ эВ. Данное изменение можно рассматривать как отклик систе-

мы на присутствие вблизи одиночной молекулы угарного газа.

Следующим этапом нашего исследования стало изучение процесса приближения молекулы оксида серы SO₂ (сернистый газ) и сероводорода H₂S к слою BC₃. Аналогичным образом производился расчет потенциальной энергии адсорбции, как в случае с молекулой CO, шаг приближения молекул к слою составил 0,2 Å. Проведенные расчеты показали, что при приближении SO₂ и H₂S к поверхностному атому В, потенциальная энергия системы возрастает, как показано на рисунках 4а и 5а.

Профили поверхности потенциальной энергии процесса приближения атома SO₂, H₂S к слою BC₃ представлены на рисунках 4 и 5.

Таким образом, был изучен процесс присоединения молекул SO₂, H₂S и CO к атомам бороуглеродного слоя, и установлено, что адсорбция возможна лишь в отношении молекул угарного газа и только в слое, содержащем вакансионный дефект.

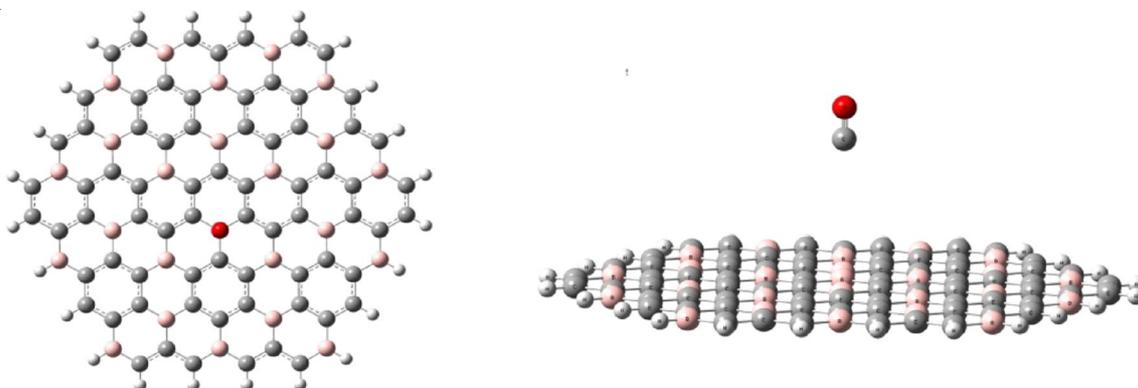


Рис. 2. Молекула CO над атомом В расширенной элементарной ячейки BC₃

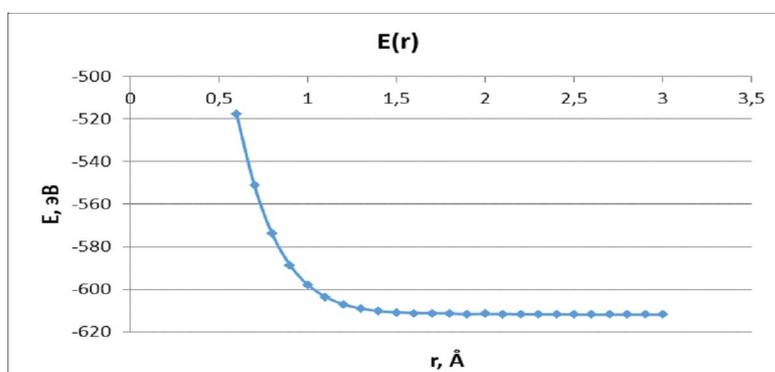


Рис. 2а. Профиль поверхности потенциальной энергии присоединения CO к слою BC₃ в положении над атомом В

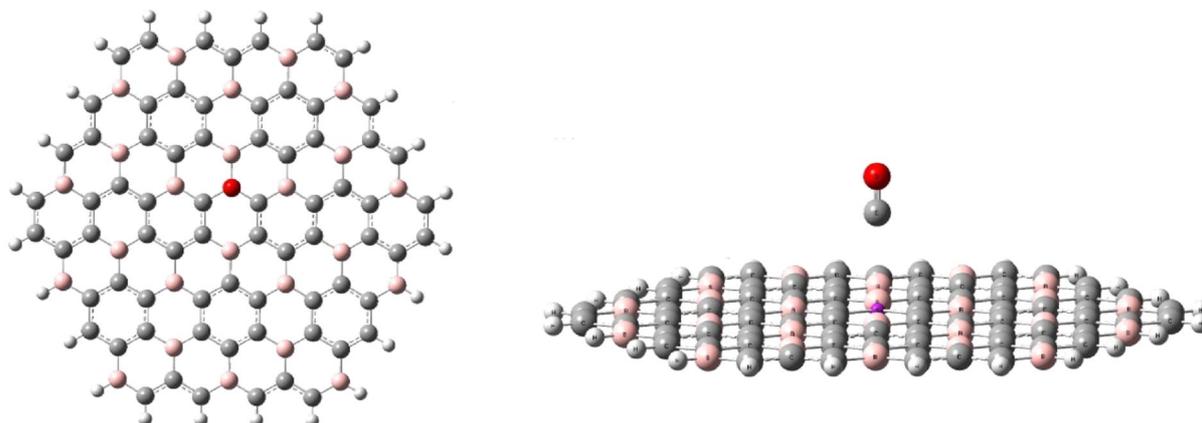


Рис. 3. Молекула CO над фиктивным атомом расширенной элементарной ячейки BC_3

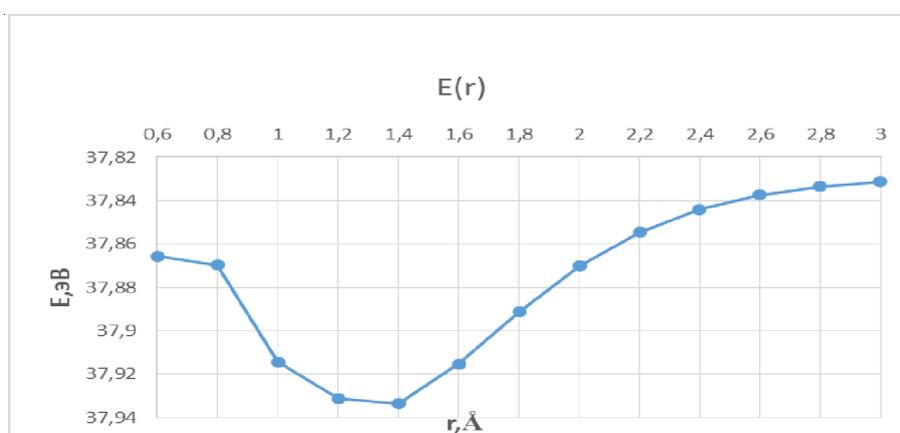


Рис. 3а. Профиль поверхности потенциальной энергии присоединения CO к слою BC_3 в положении над фиктивным атомом

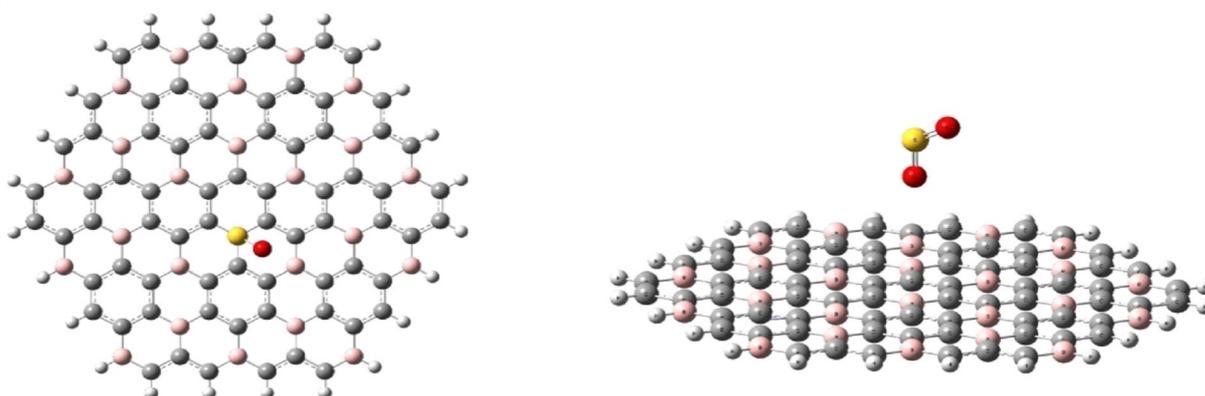


Рис. 4. SO_2 на расширенной элементарной ячейке BC_3 , присоединено над атомом В

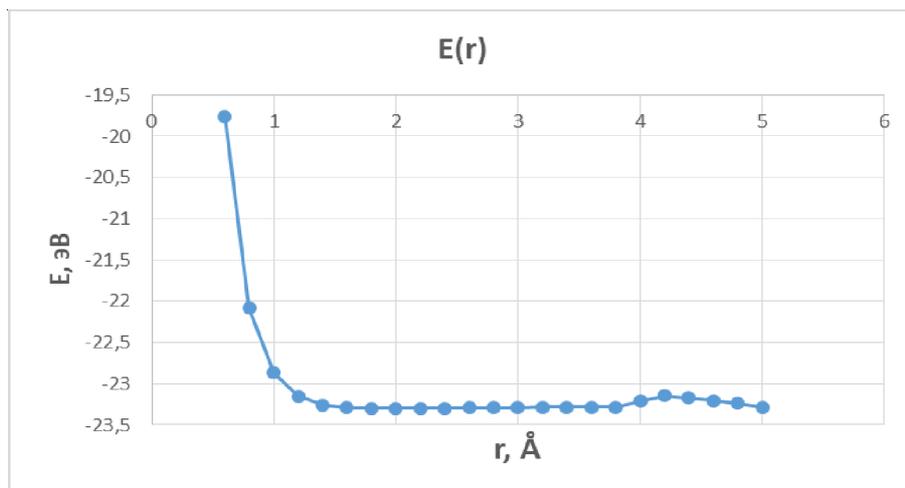


Рис. 4а. Профиль поверхности потенциальной энергии присоединения SO₂ к слою BC₃

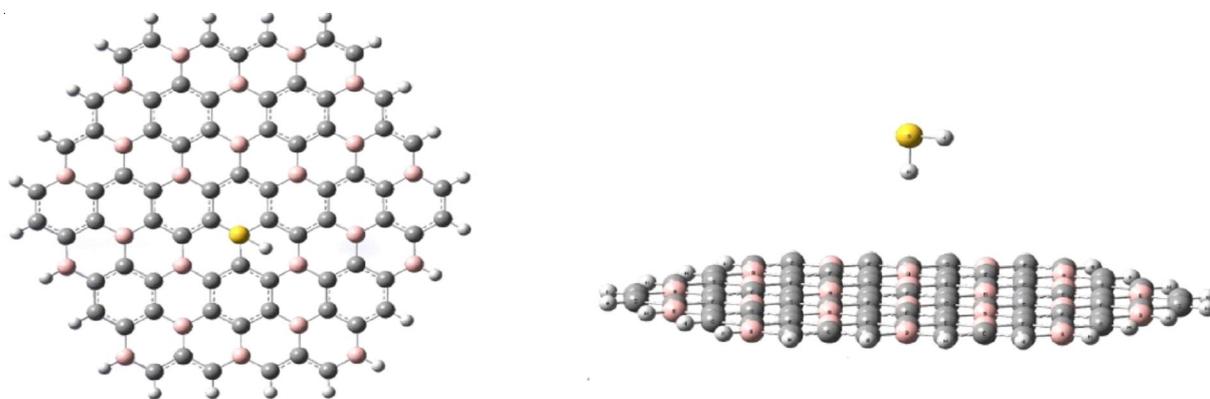


Рис. 5. Молекула H₂S над слоем BC₃, положение над атомом В

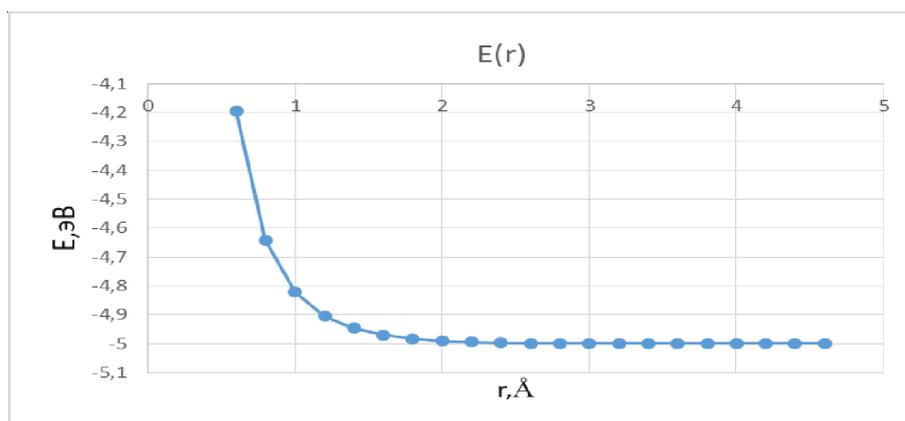


Рис. 5а. Профиль поверхности потенциальной энергии присоединения H₂S к слою BC₃

Использование беспримесных и бездефектных двумерных слоев BC_3 в качестве претендентов на роль сенсорных устройств в отношении компонентов дыма SO_2 , H_2S и CO считаем не целесообразным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Корольченко, А.Я. Процессы горения и взрыва / А. Я. Корольченко. – М. : Пожнаука, 2007. – 265 с.
2. Рабинович, В. А. Краткий химический справочник / В. А. Рабинович, З. Я. Хазов, – Л. : Химия, 1978. – 356 с.
3. Эварестов, Р. А. Квантовохимические методы в теории твердого тела / Р. А. Эварестов, В. А. Смирнов. – Л. : ЛГУ, 1982. – 280 с.
4. Chen, Z. The B3LYP hybrid density functional study on solids / Z. Chen, J. Yang // *Frontiers of Physics in China*. – 2008. – Vol. 1, № 3. – P. 339–343. – DOI: 10.1007/s11467-006-0026-8
5. Krishnan, K. M. Structure of newly synthesized BC_3 films / K. M. Krishnan // *Appl. Phys. Lett.* – 1991. – Vol. 58, № 1857. – DOI: 10.1063/1.105053.
6. Synthesis of dense BC_x phases under high-pressure and high-temperature / L. C. Ming, P. V. Zinin, X. R. Liu, Y. Nakamoto, R. Jia // *Journal of Physics: Conference Series*, 2010, vol. 215, p. 012135. DOI: 10.1088/1742-6596/215/1/012135.

Conference Series. – 2010. – Vol. 215. – P. 012135. – DOI: 10.1088/1742-6596/215/1/012135.

REFERENCES

1. Korol'chenko A.Ya. *Processy gorenija i vzryva* [Combustion and Explosion Processes]. Moscow, Pozhnauka Publ., 2007. 265 p.
2. Rabinovich V.A., Hazov Z.Ya. *Kratkij himicheskij spravochnik* [Short Chemical Reference Book]. Leningrad, Khimiya Publ., 1978. 356 p.
3. Evarestov R.A., Smirnov V.A. *Kvantovokhimicheskie metody v teorii tverdogo tela* [Quantum Chemical Methods in Solid State Theory]. Leningrad, LGU, 1982. 280 p.
4. Chen Z., Yang J. The B3LYP Hybrid Density Functional Study on Solids. *Frontiers of Physics in China*, 2008, vol. 1, no. 3, pp. 339-343. DOI: 10.1007/s11467-006-0026-8.
5. Krishnan K.M. Structure of Newly Synthesized BC_3 Films. *Appl. Phys. Lett.*, 1991, vol. 58, no. 1857. DOI: 10.1063/1.105053.
6. Ming L.C., Zinin P.V., Liu X.R., Nakamoto Y., Jia R. Synthesis of Dense BC_x Phases Under High-Pressure and High-Temperature. *Journal of Physics: Conference Series*, 2010, vol. 215, p. 012135. DOI: 10.1088/1742-6596/215/1/012135.

INVESTIGATION OF INTERACTION MECHANISM OF BOROCARBON LAYER BC_3 WITH SMOKE COMPONENTS SO_2 , H_2S И CO

Evgeniya V. Boroznina

Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Associate Professor,
Department of Forensic Science and Physical Materials Science,
Volgograd State University
boroznina.evgeniya@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Olesya A. Kakorina

Candidate of Sciences (Physics and Mathematics),
Acting Head of the Department of Information Security,
Volgograd State University
davletova.olesya@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Konstantin O. Smirnov

Senior Lecturer,
Department of Forensic Science and Physical Materials Science,
Volgograd State University
smirnov@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Abstract. In this paper, we have studied the interaction between two-dimensional sheet BC_3 with carbon monoxide (CO), hydrogen sulfide (H_2S) and sulfur dioxide (SO_2) molecules. These molecules are part of a fire smoke and are extremely hazardous to human health. The aim of our study is to find out the possibility of creating a sensor device based on the BC_3 sheet material, which is capable to registers the presence of the molecules in the air. Carbon monoxide, which is also carbon monoxide, is considered the most dangerous in the event of a fire. Carbon monoxide, compared to oxygen, can be more effectively adjacent to hemoglobin, which entails a deterioration in the ability of blood to absorb oxygen. In this regard, oxygen starvation occurs. Sulfurous gas (SO_2) is colorless, but has a rather sharp smell and is formed if sulfur is contained in combustible or explosive substances. In addition, sulfurous gas is poisonous, and can form sulfuric acid on the surface of the eyes or airways if affected. It can cause swelling of the larynx and lungs, inflammation of the bronchi. A dangerous concentration for life is only 0.05% even with short-term breathing. Hydrogen sulfide (H_2S), like sulfur dioxide, is colorless. However, it has a sweet taste and smell. It is able to be released during fires and during rotting of organic substances. Extremely poisonous gas, affects the eyes and airways. A deadly concentration even in the case of short-term breathing is only 0.1%.

Key words: two-dimensional layer, carbon monoxide, hydrogen sulfide, sulfur dioxide, sensor device, DFT, B3LYP.