DOI: https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2025.2.3

УДК 538.9:678.762
ББК 22.353.2

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ МЕТАЛЛА С БОРОСОДЕРЖАЩИМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОСЛОЯМИ [1]

Сергей Владимирович Борознин

Доктор физико-математических наук, доцент,
заведующий кафедрой судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
boroznin@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Иван Андреевич Челнынцев

Аспирант, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,
Волгоградский государственный университет
fna-241_588792@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Евгений Сергеевич Дрючков

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

© Борознин С.В., Челнынцев И.А., Дрючков Е.С., 2025

Аннотация. В данной работе исследуется адсорбция атомов щелочных металлов (Li, Na, K) с боросодержащими углеродными нанослоями типа BC методом теории функционала плотности (DFT). Для моделирования использовались молекулярные кластеры BC с различным распределением атомов бора (типы A и B), построенные с учетом краевых эффектов и пассивацией водородом. Расчеты проводились с использованием гибридного функционала B3LYP и базиса 6-31G. Атомы металлов приближались к адсорбционным центрам пошагово с шагом 0,2 Е в диапазоне от 4 до 1 Е. Для каждой конфигурации рассчитывались значения потенциальной энергии, что позволило определить глубину энергетических минимумов, стабильность комплексов и влияние

геометрии нанослоя на сорбционные свойства. Результаты моделирования демонстрируют образование устойчивых адсорбционных комплексов на поверхности боросодержащих нанослоев и подтверждают потенциал для применения в накопителях энергии и сенсорных устройствах.

Ключевые слова: бороуглеродные нанослои, легирование, адсорбация, полупроводниковые материалы, накопители энергии, сенсоры.

Введение

В последние десятилетия открытия в области углеродных наноматериалов привлекли значительное внимание ученых благодаря их уникальным физическим и химическим свойствам [1–4]. Материалы на основе углерода, такие как графит, фуллерен, углеродные нанотрубки и графен, являются важным выбором благодаря их нетоксичности. Они стали основой для создания новых технологичных решений, таких как сенсоры, устройства накопления энергии и фильтры. Эти материалы, благодаря своей высокой проводимости, уникальным механическим и электрическим характеристикам, а также термической устойчивости, нашли применение в различных отраслях науки и промышленности [5–8]. Исследования показывают, что сенсоры на основе графена способны обнаруживать отдельные молекулы, такие как токсичные или горючие газы, за счет высокоактивной поверхности и способности к адсорбции, что значительно улучшает точность и чувствительность детекторов [9]. В области микроэлектроники углеродные нанослои позволяют создавать сверхтонкие проводящие каналы и микропроцессоры, которые сохраняют свою эффективность даже при высоких температурах и значительных электрических нагрузках. Это делает их перспективными для создания долговечных микросхем и компонентов, используемых в высоконагруженных электронных устройствах, таких как приборы измерения и контроля в энергетике и автомобильной промышленности [10]. Графеновые нанослои также нашли применение в биомедицинских исследованиях в качестве высокоэффективных носителей для доставки лекарственных препаратов, благодаря своей химической инертности и биосовместимости с клетками организма. Способность углеродных слоев к функционализации позволяет прикреплять к их поверхности различные молекулы, такие как антитела и ферменты, что делает их перспективными для разработки биосенсоров, а также для создания имплантируемых устройств, устойчивых к биологической деградации [11].

Однако для дальнейшего расширения функциональных возможностей таких материалов необходимо модифицировать их структуру, добавляя различные примесные элементы. Одним из наиболее перспективных методов улучшения характеристик углеродных нанослоев является их легирование бором. Бор, как элемент, близкий к углероду по своему атомному радиусу и электроотрицательности, способен встраиваться в углеродную решетку, минимально нарушая ее структуру [12–14]. Это обеспечивает сохранение и улучшение ключевых свойств материала. Примесное замещение углеродных атомов бором позволяет модифицировать электронную плотность и изменять проводимость материала, что делает боросодержащие углеродные нанослои (далее – БУНС) ценными для использования в наноэлектронных устройствах. Легирование бором улучшает адсорбцию ионов и молекул на поверхности нанослоев, позволяя эффективнее улавливать загрязнители, такие как тяжелые металлы, и способствует разработке эффективных методов фильтрации и очистки [15]. Это также открывает новые возможности для использования нанослоев в условиях высокой температуры и химической активности, таких как химические реакторы и каталитические системы. Боросодержащие структуры устойчивы к агрессивным условиям и способны сохранять свои свойства даже при экстремальных температурных нагрузках, что делает их пригодными для применения в нефтехимической и перерабатывающей промышленности [16].

Известно, что взаимодействие металлов с углеродными материалами может существенно изменять их электронные и сорбционные характеристики. Например, адсорбция

атомов металлов на поверхности нанослоев способна изменять проводимость, что важно для разработки катодных материалов для аккумуляторов. Взаимодействие с щелочными металлами, такими как литий, натрий и калий, особенно интересно, поскольку они часто используются в энергетических устройствах благодаря их высокой реакционной способности и низкому потенциалу ионизации. В научной литературе встречаются работы, посвященные взаимодействию углеродных материалов с металлами, но исследования, фокусирующиеся именно на боросодержащих углеродных структурах, пока ограничены. Это связано с трудностями получения и стабилизации таких материалов, а также сложностью моделирования их взаимодействий на атомном уровне. Тем не менее современные методы компьютерного моделирования, такие как метод теории функционала плотности, позволяют проводить детальный анализ процессов адсорбции и изучать электронные свойства систем на уровне квантовой химии.

Настоящая работа посвящена взаимодействию атомов металлов с боросодержащими углеродными нанослоями типа BC. Основной целью исследования является анализ процессов адсорбции и определение стабильности образующихся комплексов. Это включает изучение зависимости потенциальной энергии системы от расстояния между атомом металла и поверхностью нанослоя, что позволяет выявить предпочтительные условия для адсорбции и оценить энергетические параметры взаимодействия. Полученные результаты могут быть использованы для разработки новых функциональных материалов с регулируемыми свойствами [17]. Выбор лития, натрия и калия в качестве объектов исследования объясняется их активной ролью в современной наноэлектронике. Эти металлы имеют разные атомные радиусы и электроотрицательность, что позволяет сравнить их поведение при взаимодействии с БУНС и сделать выводы о природе адсорбционных процессов. Литий, например, используется в аккумуляторных технологиях, а его адсорбция на углеродных материалах изучена достаточно хорошо. Натрий и калий менее распространены, но также могут быть перспективны для использования в энергоносителях [18; 19].

Анализ полученных данных поможет понять, как модификация углеродных нанослоев бором влияет на их способность к адсорбции и как использование различных металлов может изменять эти характеристики. Результаты этой работы могут найти применение при разработке новых материалов для энергоносителей и фильтров, а также в других областях, где важны проводящие свойства [20; 21]. Предыдущие исследования [22] продемонстрировали эффективную возможность управления проводящими свойствами нанотрубок не только за счет введения замещающих атомов бора, но и дополнительного присоединения атомов металлов. Это подчеркивают актуальность и важность изучения взаимодействий между металлами и боросодержащими углеродными нанослоями. Расширение знаний в этой области способствует созданию более эффективных и надежных наноматериалов для высокотехнологичных приложений, что делает изучение таких систем не только интересным с научной точки зрения, но и значимым для промышленности [23].

Методология

Расчеты происходили с помощью метода теории функционала плотности (далее – DFT). Этот метод является фундаментальным подходом для вычисления электронной структуры атомов, молекул и твердых тел. Основной идеей метода является использование электронной плотности $n(r)$, а не полной волновой функции, чтобы описать электронные взаимодействия.

DFT позволяет моделировать системы, содержащие сотни или тысячи атомов, а также описывать электронную структуру сложных наносистем, таких как боросодержащие углеродные слои. Этот метод обладает хорошим балансом между высокой точностью и вычислительной стоимостью. Возможность модификации функционалов позволяет адаптировать его под конкретные задачи – от молекулярного моделирования до работы с твердыми телами и наноматериалами, что делает данный метод оптимальным для широкого спектра приложений, включая анализ структурной устойчивости, расчеты энергии связи,

моделирование каталитических процессов и изучение межатомных взаимодействий с адсорбционными свойствами.

Первым шагом в нашей работе стало построение боросодержащего нанослоя BC_3. Пример такой боросодержащей структуры представлен на рисунке 1.

Данный кластер содержит 109 атомов: 80 атомов углерода, 16 атома бора и 12 атомов водорода, он позволяет сохранить симметрию и локальную структуру. Для расчетов был применен функционал B3LYP, который объединяет точный обменный компонент из метода Хартри-Фока и эмпирические корреляционные функции. Использование базиса 6-31G обеспечивало баланс между точностью и вычислительной эффективностью, что особенно важно при моделировании систем, содержащих несколько типов атомов с разными электронной конфигурацией и валентностью. Его плюсами являются: универсальность, вычислительная эффективность и широкое распространение. Исследование проводилось на молекулярных кластерах BC, моделирующих различные конфигурации боросодержащих углеродных слоев.

В рамках модели молекулярного кластера для учета взаимодействия с соседними атомами обычно вводят псевдо (фиктивные) атомы для компенсации оборванных связей, либо просто рассматривают кластер как обособленную молекулу без учета взаимодействия на его границах.

При выборе фиктивных атомов стоит помнить, что они должны удовлетворять следующим требованиям:

1) энергетические зоны кристалла должны быть корректно отображены в энергиях молекулярных орбиталей (МО) кластера;

2) зарядовое распределение, обусловленное стехеометрией кристалла, должно сохраняться при переходе к кластерному рассмотрению задачи;

3) выбор фиктивных атомов не должен отразиться на размерных эффектах кластера, либо влиять на процессы при изменении его размеров.

В наших моделях мы использовали псевдоатомы водорода на краях структуры, что позволило минимизировать влияние краевых состояний и лучше воспроизвести распределение электронной плотности в центральной части кластера, где происходят адсорбционные процессы, тем самым сделав расчет более точным. Выбор таких моделей обусловлен необходимостью анализа локализованных процессов адсорбции в условиях, приближенных к экспериментальным.

Были рассмотрены два варианта атомной упорядоченности углерода в нанослоях – A и B видов (см. рис. 2). Эти типы конфигураций построены по аналогии с бор-легированными нанотрубками и графеноподобными

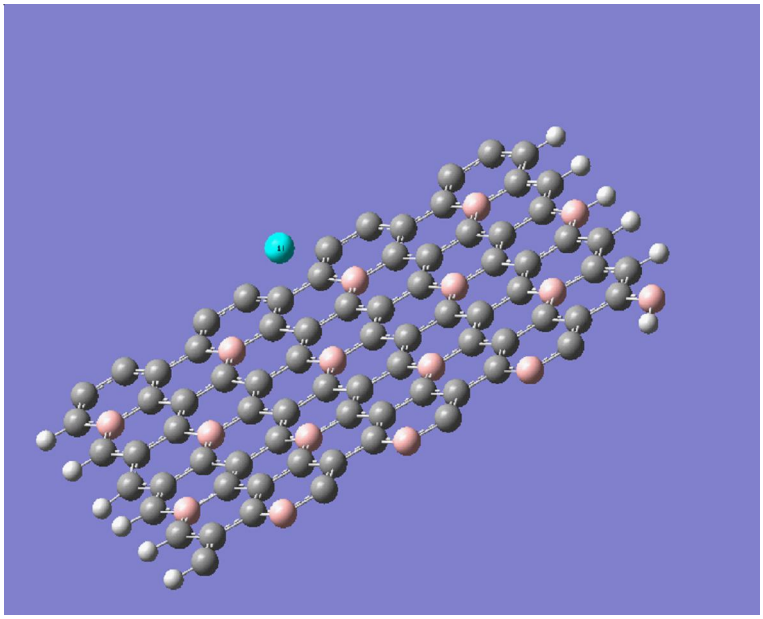


Рис. 1. Пример боросодержащего BC нанослоя

структурами. В них примесные атомы бора замещают атомы углерода в гексагональной решетке, сохраняя планарную форму и формируя sp-гибридные ковалентные связи. Предполагается, что такие структуры обладают стабильной геометрией и сохраняют графеноподобную электронную природу.

Прямоугольником выделена элементарная ячейка (далее – ЭЯ), на основе которой были расширены модели: выполнялось дублирование вдоль одного из векторов трансляции a_i ($i = 4$) с целью создания расширенного кластера, имитирующего двумерную периодичность. В дополнение к методу DFT, также использовался полуэмпирический квантово-химический метод MNDO с применением циклической модели ионно-встроенного ковалентно-циклического кластера (ИВ-КЦК), что обеспечило теоретическую устойчивость геометрии и позволило исследовать особенности зонной структуры.

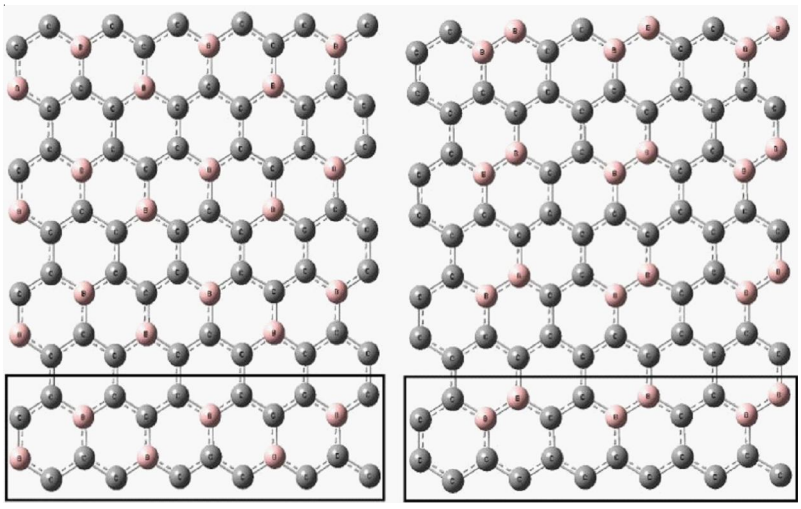
Оптимизация геометрии показала, что среднее расстояние между атомами в ЭЯ составляет 1,4 Е, что подтверждает компактную структуру. Основные электронные характеристики обоих видов структур приведены в таблице 1.

Анализ энергетической щели ДЕ$_g$ показал, что обе структуры можно отнести к узкощелевым полупроводникам. Валентная зона в таких системах формируется из s- и p-орбиталей атомов С и p-орбиталей В, а зона проводимости – преимущественно из орбиталей *b* и *c* элементов.

Также наблюдалось перераспределение электронной плотности, а именно – смещение электронного облака от атомов бора с появлением у них положительного заряда $Q = 0{,}13$ к атомам углерода с соответствующим появлением у них отрицательного заряда $Q = -0{,}07$, что потенциально влияет на химическую активность и адсорбционные свойства.

В каждой конфигурации (тип А и В) моделировалось присоединение атомов металлов к различным активным центрам – атомам углерода и бора. На каждом этапе рассчитывались энергетические параметры, строились профили потенциальной энергии, и определялись стабильные состояния по минимумам энергии.

Литий, натрий и калий были выбраны для анализа ввиду их различных атомных радиусов и электроотрицательности. Легкие металлы демонстрируют интересные взаимодействия с углеродными структурами, включая формирование стабильных адсорбционных комплексов. Они имеют низкий потенциал ионизации, что способствует их активной адсорбции на углеродных и боросодержащих поверхностях, а также могут изменять проводимость и сорбционные свойства материала. Моделирование проводилось с пошаговым приближением атомов металлов к поверхности исследуемого нанослоя с шагом 0,2 Е. Стартовой точкой присоединения установлено расстояние равное 4 Е, а минимальное 1 Е.



а) б)

Рис. 2. Кластерная модель углеродного нанослоя с примесными атомами бора:

а – расположение борных примесей в нанослое графена – вид А;
б – расположение борных примесей в нанослое графена – вид В

Результаты и обсуждение

Исследование взаимодействия металлов с боросодержащими углеродными нанослоями ВС показало, что каждый из них проявляет различные адсорбционные свойства. Результаты квантово-химических расчетов позволили построить энергетические профили и выявить минимумы энергии, которые указывают на стабильность образующихся комплексов.

Литий при взаимодействии с нанослоем образует устойчивые комплексы с обоими типами боросодержащих углеродных слоев. Энергия адсорбции достигала минимальных значений около –4,0985 эВ для равномерно распределенных борных атомов типа А и –5,1322 эВ для типа В. Эти результаты подтверждают, что борное легирование улучшает сорбционные свойства слоев, создавая зоны повышенной активности для адсорбции. Графики профилей энергии (см. рис. 3) демонстрируют устойчивость комплексов, что открывает возможности для применения таких материалов в системах накопления энергии.

Анализ энергетических кривых установил, что кривые взаимодействия атома натрия с литием подобны, на графике наблюдается минимумы энергии около –4,0932 эВ для равномерных слоев А типа и –5,1390 эВ для слоев В типа (см. рис. 4). Это свидетельствует о возникновении процесса адсорбции.

Калий, благодаря своему большому атомному радиусу и высокой поляризуемости, продемонстрировал самую сильную адсорбцию среди исследованных металлов. Минимальная энергия адсорбции для калия составила –4,094 эВ для равномерных слоев А типа и –5,2257 эВ для слоев В типа (см. рис. 5). Взаимодействие калия с областями с повышенной концентрацией бора показало увеличение стабильности комплекса и образование зон с максимальной адсорбционной способностью.

При сравнительном анализе, слои с равномерным распределением бора А типа демонстрировали более предсказуемые адсорбционные свойства, в то время как структуры В типа создавали локальные энергетические минимумы, усиливая взаимодействие с металлами. Эти результаты подтверждают, что варьирование расположения атомов бора может быть эффективным инструментом для управления сорбционными характеристиками углеродных слоев. При каждом приближении были получены значения энергии системы. Значения минимумов энергий от расстояния представлены для сравнения в таблице 2.

Заключение

Результаты проведенного исследования подтвердили высокую способность боросодержащих углеродных нанослоев (ВС) к адсорбции атомов металлов. Моделирование показало, что адсорбция сопровождается формированием стабильных комплексов, особенно в случае взаимодействия с калием, который имеет лучшее взаимодействие с слоями, что подчеркивает его потенциальную значимость в практическом применении. Ключевая роль борных атомов в структуре слоев заключается в создании энергетически выгодных позиций для адсорбции, что улучшает связывающие свойства материала и способствует переносу заряда. Эти факторы определяют пер-

Таблица 1

Энергетические характеристики графеновых BC_3 нанослоев с примесными атомами бора, эВ

$(n, 0)$	ΔE_v	ΔE_g	$(n, 0)$	ΔE_v	ΔE_g
Вид А			Вид Б		
(4, 0)	32,14	0,17	(4, 0)	33,23	0,27
(6, 0)	39,92	1,07	(6, 0)	41,62	0,14
(8, 0)	35,87	0	(8, 0)	34,91	0,11
(10, 0)	35,13	0,41	(10, 0)	36,20	0,17
(12, 0)	35,55	0,12	(12, 0)	36,45	0,29

спективы использования боросодержащих слоев в качестве материалов для сенсоров и катодов. Понимание механизма взаимодействия атомов металлов с углеродными слоями с добавлением бора расширяет возможности создания новых функциональных материалов с регулируемыми сорбционными и электронными свойствами.

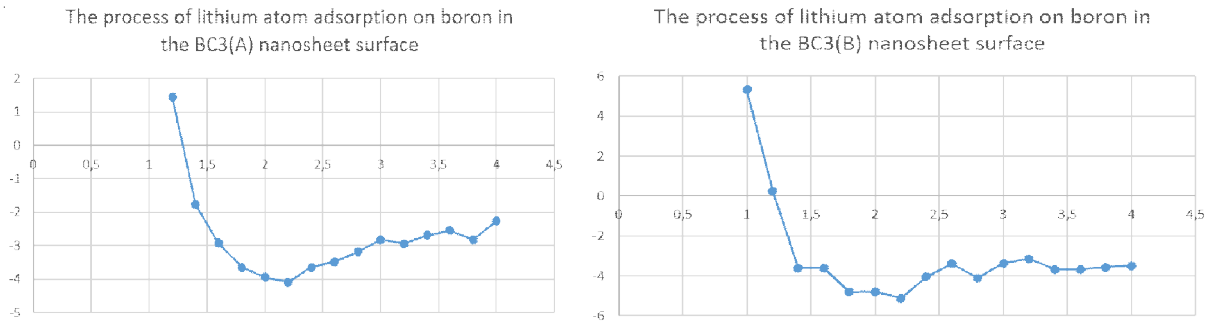


Рис. 3. Графики энергии от расстояния при взаимодействии бора с литием к нанослоям BC_3 типа A и B (по вертикали указана потенциальная энергия приближения атома лития, по горизонтали расстояния в E)

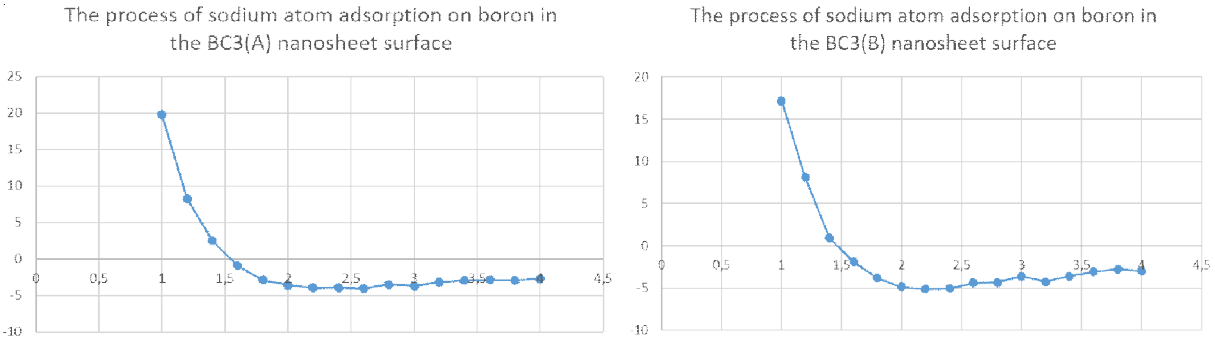


Рис. 4. Графики энергии от расстояния при взаимодействии бора с натрием к нанослоям BC_3 типа A и B

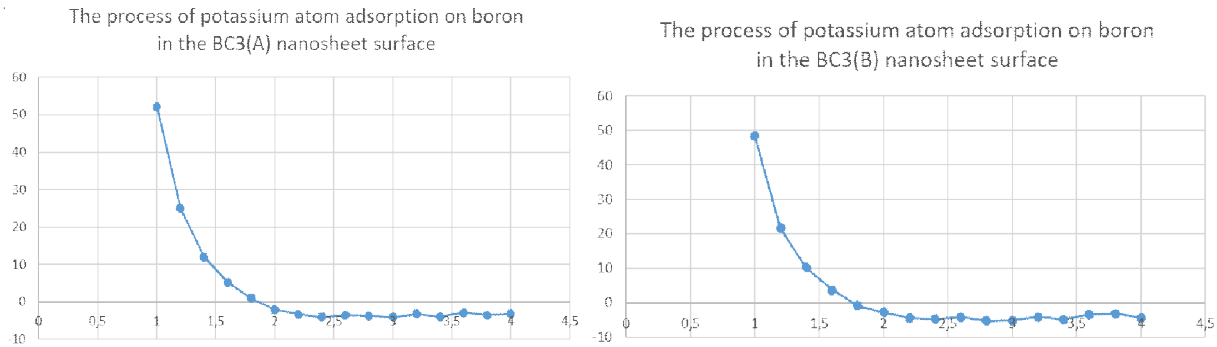


Рис. 5. Графики энергии от расстояния при взаимодействии бора с калием к нанослоям BC_3 типа A и B

Таблица 2

Основные электронно-энергетические характеристики процесса адсорбции атомов металлов на поверхности боросодержащего нанослоев A и B типа

Металлы	Li		Na		K	
Структурная упорядоченность	BC_3(A)	BC_3(B)	BC_3(A)	BC_3(B)	BC_3(A)	BC_3(B)
E_{ad}, eV	–4,0985	–5,1322	–4,0932	–5,1390	–4,094	–5,2257
R_{ad}, Å	**2.2**	**2.2**	**2.6**	**2.2**	**3**	**2.8**

ПРИМЕЧАНИЕ

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (государственное задание № FZUU-2023-0001).

This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (state assignment No. FZUU-2023-0001).

REFERENCES

1. Bakoglidis K.D., Palisatis J., Santos R.B., Rivelino R., Persson P.O.A., Gueorguiev G.K., Hultman L. Self-Healing in Carbon Nitride Evidenced as Material Inflation and Superlubric Behavior. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2018, vol. 10, pp. 16238-16243. DOI: 10.1021/acsami.8b03055

2. Bleu Y. et al. Boron-Doped Graphene Synthesis by Pulsed Laser Co-Deposition of Carbon and Boron. *Applied Surface Science*, 2020, vol. 513, p. 145843. DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.145843

3. Boroznin S.V. Investigation of the Role of Impurity Boron Atoms in the Metallization of Carbon Nanotubes. *Proceedings of Southwest State University. Series: Engineering and Technology*, 2022, vol. 12, no. 1, pp. 159-173. DOI: 10.21869/2223-1560-2022-26-1-159-173

4. Boroznin S.V., Zaporotskova I.V., Perevalova E.V., Polikarpov D.I. Electronic Structure and Characteristics of Some Types of Boron-Containing Nanotubes. *Vestnik of Volgograd State University. Series 10: Innovation Activity*, 2012, no. 6, pp. 81-86.

5. Denis P.A. Band Gap Opening of Monolayer and Bilayer Graphene Doped with Aluminium, Silicon, Phosphorus, and Sulfur. *Chemical Physics Letters*, 2010, vol. 492, pp. 251-257. DOI: 10.1016/j.cplett.2010.04.038

6. Geim A.K., Novoselov K.S. The Rise of Graphene. *Nature Materials*, 2007, vol. 6, pp. 183-191. DOI: 10.1038/nmat1849

7. Gogotsi Y., Penner R.M. Energy Storage in Nanomaterials – Capacitive, Pseudocapacitive, or Battery-Like? *ACS Nano*, 2018, vol. 12, pp. 2081-2083. DOI: 10.1021/acsnano.8b01914

8. Gopinath K.P., Vo D.N. Environmental Applications of Carbon-Based Materials: A Review. *Environmental Chemistry Letters*, 2021, vol. 19, pp. 557-582. DOI: 10.1007/s10311-020-01084-9

9. Grewal J.K., Kaur M., Mondal K., Sharma V.K. Carbon Quantum Dot-Titanium Doped Strontium Ferrite Nanocomposite: Visible Light Active Photocatalyst to Degrade Nitroaromatics. *Catalysis*, 2022, vol. 12, p. 1126. DOI: 10.3390/catal12101126

10. Gupta A., Arunachalam V.S. Carbon Dot-Based Sustainable Sensors for Heavy Metal Ions. *RSC Advances*, 2014, vol. 4, pp. 59226-59230. DOI: 10.1039/C4RA09084E

11. Hogberg H. et al. Reactive Sputtering of CS Thin Solid Films Using CS as Precursor. *Vacuum*, 2020, vol. 182, p. 109775. DOI: 10.1016/j.vacuum.2020.109775

12. Izadifar M. et al. Fracture Toughness of Various Percentage of Doping of Boron Atoms on the Mechanical Properties of Polycrystalline Graphene: A Molecular Dynamics Study. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2019, vol. 114, p. 113614. DOI: 10.1016/j.physe.2019.113614

13. Jin Q., Ren B., Chen J., Cui H., Wang C. A Facile Method to Conduct 3D Self-Supporting Co-FeCo/N-Doped Graphene-Like Carbon Bifunctional Electrocatalysts for Flexible Solid-State Zinc Air Battery. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2019, vol. 256, p. 117887. DOI: 10.1016/j.apcatb.2019.117887

14. Kaur M., Kaur M., Singh D., Oliveira A.C., Garg V.K., Sharma V.K. Synthesis of CaFeO-NGO Nanocomposite for Effective Removal of Heavy Metal Ion and Photocatalytic Degradation of Organic Pollutants. *Nanomaterials*, 2021, vol. 11, p. 1471. DOI: 10.3390/nano11061471

15. Kostarelos K., Novoselov K.S. Graphene Devices for Life Sciences and Medicine. *Nature Biotechnology*, 2014, vol. 32, no. 3, pp. 213-221. DOI: 10.1038/nbt.2856

16. Liu J., Liang T., Wang F., Lai W., Liu Y. Theoretical Investigation of the Catalytic and Inhibiting Role of Boron in Graphene Oxidation. *Materials Today Communications*, 2020, vol. 23, p. 100885. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2019.100885

17. Masato, Yuji I. Theoretical Study of Adsorption of Lithium Atom on Graphene. *AIP Advances*, 2011, vol. 1, p. 042106. DOI: 10.1063/1.3651182

18. Schedin F. et al. Detection of Individual Gas Molecules Adsorbed on Graphene. *Nature Materials*, 2007, vol. 6, no. 9, pp. 652-655. DOI: 10.1038/nmat1967

19. Schwierz F. Graphene Transistors. *Nature Nanotechnology*, 2010, vol. 5, no. 7, pp. 487-496. DOI: 10.1038/nnano.2010.89

20. Tang K. et al. Hollow Carbon Nanospheres with a High Rate Capability for Sodium-Based Energy Storage. *Advanced Energy Materials*, 2012, vol. 2, pp. 873-877. DOI: 10.1002/aenm.201100691

21. Ubhi M.K., Kaur M., Singh D., Greneche J.M. Nanocomposite of r-FeO Immobilized on Graphene Oxide for Remediation of Ni(II) Ions: Kinetics, Isotherm, and Thermodynamics Studies. *Processing and Application of Ceramics*, 2017, vol. 11, pp. 247-257. DOI: 10.2298/PAC1704247K

22. Zaporotskova I.V., Boroznin S.V., Perevalova E.V. BC Nanotubes: Electronic and Structural Properties. *Proceedings of Fundamental and Applied NanoElectroMagnetics (FANEM'12)*, 2012, p. 43.

23. Zhang B., Zhang G., Cheng Z., Ma F., Lu Z. Atomic-Scale Friction Adjustment Enabled by Doping-Induced Modification in Graphene Nanolayer. *Applied Surface Science*, 2019, vol. 483, pp. 742-749. DOI: 10.1016/j.apsusc.2019.03.267

RESEARCH INTO THE INTERACTION OF METAL ATOMS WITH BORON-CONTAINING CARBON NANOLAYERS

Sergey V. Boroznin

Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Associate Professor,
Head of the Department of Forensic Examination and Physical Materials Science,
Volgograd State University
boroznin@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Ivan A. Chelnyncev

Postgraduate Student,
Department of Forensic Examination and Physical Materials Science,
Volgograd State University
fna-241_588792@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Evgeniy S. Dryuchkov

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

Abstract. This research paper presents a comprehensive computational investigation into the adsorption processes of alkali metal atoms (lithium, sodium, and potassium) on boron-doped carbon nanolayers (BC) using density functional theory (DFT) methodology. The study employs molecular cluster models representing two different structural configurations of boron distribution (designated as Type A and Type B) within the BC lattice, with careful consideration of edge effects through hydrogen passivation. All quantum chemical calculations were performed utilizing the B3LYP hybrid functional combined with the 6-31G basis set, ensuring an optimal balance between computational accuracy and efficiency. The metal atoms were systematically approached toward potential adsorption centers with a precise step size of 0.2 E across a distance range from 4 E to 1 E. For each resulting configuration, the potential energy values were meticulously calculated and analyzed, allowing for the determination of energy minima depths, evaluation of complex stability, and assessment of how nanolayer geometry influences the sorption characteristics. The simulation results clearly demonstrate the formation of stable adsorption complexes on the surface of boron-containing nanolayers, with potassium showing particularly strong interactions. These findings substantiate the significant potential of such modified carbon nanostructures for practical applications in next-generation energy storage devices and highly sensitive sensor technologies.

Key words: boron-carbon nanolayers, doping, adsorption, semiconductor materials, energy storage devices, sensors.