



DOI: <https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2024.4.5>

УДК 539.2

ББК 22.37



## ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СОЗДАНИЯ ДВУМЕРНОГО СЛОЯ h-BCN

**Евгения Викторовна Борознина**

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

**Ангелина Андреевна Лебедева**

Студент, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,  
Волгоградский государственный университет  
[NMTb-211\\_139753@volsu.ru](mailto:NMTb-211_139753@volsu.ru)  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

**Аннотация.** В данной работе мы оценивали возможность создания двухслойного кристалла на основе слоя BCN. В качестве расчетного метода была выбрана теория функционала плотности DFT с функционалом B3LYP и базисным набором 3-21G. Получены кривые потенциальных энергий взаимодействия двух слоев BCN в различных ориентациях друг относительно друга. Проведенные исследования показали, что создание двухслойного h-BCN возможно, но энергетически выгоднее образование двухслойного h-BCN из слоев, смещенных друг относительно друга по оси  $u$  на  $S$  от длины гексагона.

**Ключевые слова:** двумерный слой, двумерный карбо-нитрид углерода, BCN, слоистые структуры, компьютерное моделирование наносистем.

© Борознина Е.В., Лебедева А.А., 2024

Открытие графена – однослойного материала, состоящего из углеродных атомов в конфигурации  $sp^2$ , вызвало значительный интерес в научной и технологической сферах благодаря его высокой удельной площади по-

верхности, исключительной подвижности носителей заряда и отличной теплопроводности при комнатной температуре [4]. Графен является одним из доминирующих материалов в области нанотехнологий, но его применение

может быть ограничено некоторыми его свойствами. Одним из вариантов для улучшения этих свойств является замещение атомов углерода атомами других элементов. Идеальными представителями для замещения атомов углерода являются атомы близкие к углероду по количеству электронов и атомному радиусу, например, азот и бор, и подобный материал успешно синтезирован [2]. Двумерный гексагональный слой BCN открыл новые перспективы для науки в области нанотехнологий. Данный материал по сути своей является графеном, в котором некоторые С-С связи заменены на В-Н. Регулируя концентрацию замещенных связей, мы можем регулировать проводимость данного слоя, так как известно, что чистый слой BN является диэлектриком, а графен обладает отличными проводящими характеристиками. Уже известно, что BCN-системы отличаются высокой механической прочностью, отличной термостойкостью и привлекательными электрическими свойствами, а гибкость в настройке свойств за счет регулирования соотношения С-С и В-Н связей делает BCN универсальным материалом для различных технологических применений [1; 3].

В данной работе мы оценивали возможность создания двухслойного кристалла на основе слоя BCN. Для этого нами были смоделированы молекулярные кластеры однослойных гексагональных структур BCN (h-BCN) и

изучены различные варианты ориентации двух слоев BCN друг относительно друга.

На рисунке 1 представлен молекулярный кластер двумерного слоя h-BCN, который представляет из себя гексагональную сетку из 8 атомов азота, 8 атомов бора и 38 атомов углерода. Длины связей С-С, В-Н, В-С и N-С по результатам оптимизации геометрии составляли примерно 1,4 Å.

На рисунках 2 и 3 представлены конфигурации BCN слоев, согласно которым выстраивались модели для расчета исследуемых в работе наноструктур.

Моделирование двухслойной структуры на основе h-BCN происходило по средствам сближения одного слоя к другому. Начальное (максимальное) расстояние между слоями составило 5,0 Å, минимальное расстояние соответствовало значению 0,2 Å. Шаг сближения составил 0,2 Å. На каждом шаге нами рассчитывалась потенциальная энергия системы, ее зависимость от расстояния между слоями представлена графически. В качестве расчетного метода была выбрана теория функционала плотности DFT с базисом B3LYP 3-21G, так как в рамках данного базиса хорошо описываются многоатомные структуры подобно нашей. Все данные графиков нормировались нами на бесконечность, то есть предполагалось, что на расстоянии 5 Å слои не взаимодействуют друг с другом и потенциальная энергия равна нулю. Отметим, что все потенциаль-

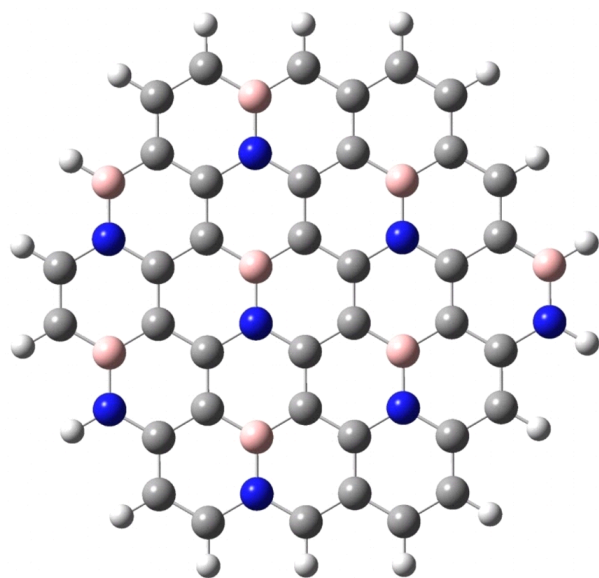


Рис. 1. Двумерный слой h-BCN

ные кривые получились качественно подобными. На графиках имеется четкий минимум энергии, что свидетельствует об образовании устойчивого комплекса из двух гексагональных слоев h-BCN. Однако, значения потенциальной энергии у рассматриваемых нами двухслойных структур получились различными.

В положении, при котором слои не были смещены (рис. 2а и 3а), минимальное значение потенциальной энергии, как мы видим из графика, приходится на расстояние 4 Å при этом глубина потенциальной ямы соответствует значению  $E \approx 0,8 \cdot 10^{-2}$  Хартри, что соответствует  $E \approx 0,22$  эВ (рис. 4).

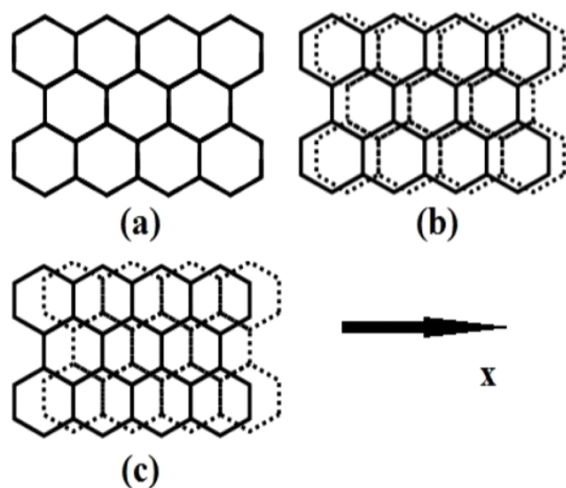


Рис. 2. Конфигурация слоев по оси x:

a – без смещения; b – смещение верхнего слоя на  $\frac{1}{4}$  от длины гексагона; c – смещение верхнего слоя на  $\frac{1}{2}$  от длины гексагона

Для варианта смещения верхнего слоя по оси x на  $\frac{1}{4}$  от длины гексагона (рис. 2b) мы рассматривали слои, которые были расположены друг относительно друга как показано на рисунке, то есть происходило смещение верхнего слоя по оси X на длину  $\frac{1}{4}$  от одного гексагона.

Энергетический минимум на расстоянии 4 Å,  $E \approx 0,9 \cdot 10^{-2}$  Хартри, что соответствует  $E \approx 0,26$  эВ (см. рис. 5).

Для варианта смещения по оси x верхнего слоя на S от длины гексагона (рис. 2c) график зависимости выглядит следующим образом (см. рис. 6).

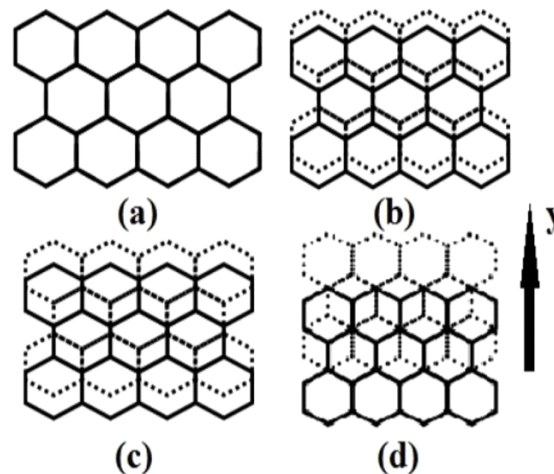


Рис. 3. Конфигурация слоев по оси y:

a – без смещения; b – смещение верхнего слоя на  $\frac{1}{4}$  от длины гексагона; c – смещение верхнего слоя на  $\frac{1}{2}$  от длины гексагона; d – смещение верхнего слоя на 1 гексагон

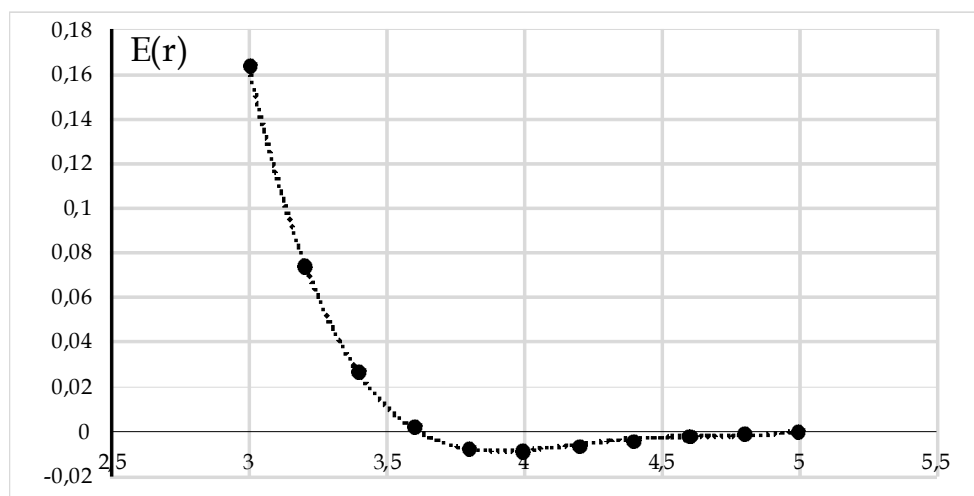


Рис. 4. Профиль поверхности потенциальной энергии процесса приближения слоев в положении

Минимум энергии при таком смещении находится на расстоянии  $3,8 \text{ \AA}$ ,  $E \approx 0,9 \cdot 10^{-2}$  Хартри или  $E \approx 0,27 \text{ эВ}$ .

Для варианта смещения верхнего слоя по оси  $y$  на  $\frac{1}{4}$  от длины гексагона (рис. 3b), энергетический минимум находится на расстоянии  $4 \text{ \AA}$ ,  $E \approx 0,8 \cdot 10^{-2}$  Хартри или  $E \approx 0,24 \text{ эВ}$  (рис. 7).

Для варианта смещения по оси  $y$  верхнего слоя на  $\frac{1}{2}$  от длины гексагона (рис. 3c) график зависимости выглядит следующим образом (см. рис. 8).

Минимум энергии, при смещении слоев по оси  $y$  (рис. 3c), на расстоянии  $3,8 \text{ \AA}$  равен  $E \approx 0,1 \cdot 10^{-2}$  Хартри или  $E \approx 0,31 \text{ эВ}$ .

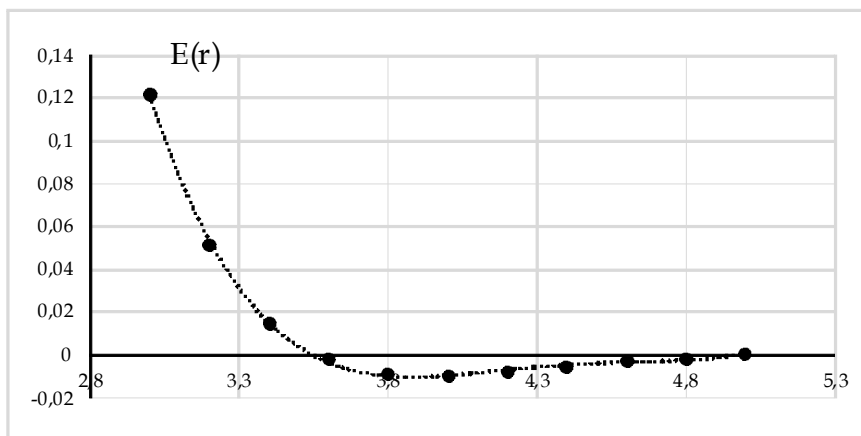


Рис. 5. Профиль поверхности потенциальной энергии процесса приближения слоев (см. рис. 2b)

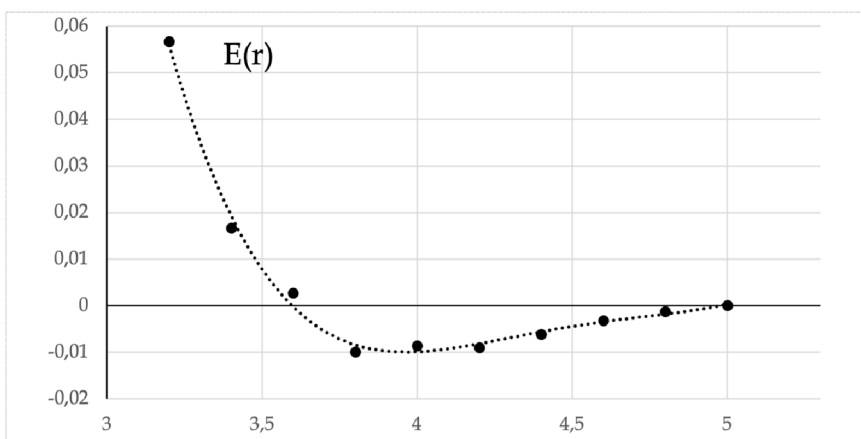


Рис. 6. Профиль поверхности потенциальной энергии процесса приближения слоев в положении (см. рис. 2c)

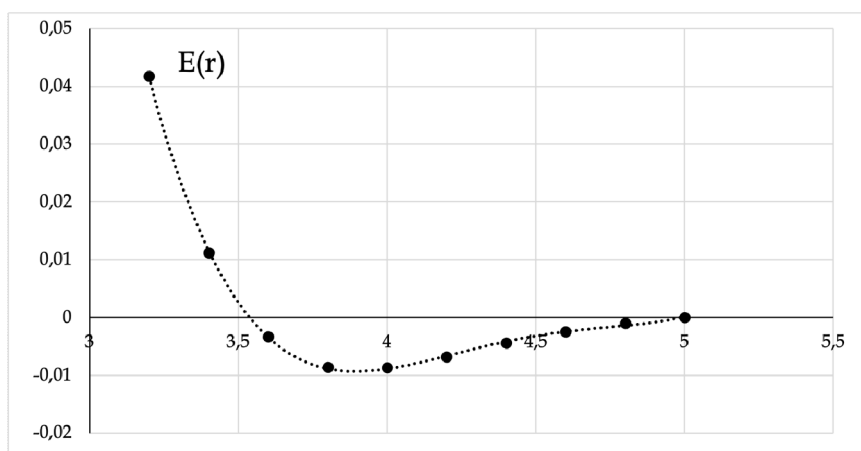


Рис. 7. Профиль поверхности потенциальной энергии процесса приближения слоев (см. рис. 3b)

Минимум, при смещении слоев по оси у на один гексагон (рис. 3d), наблюдается на расстоянии 3,6 Å,  $E \approx 0,1 \cdot 10^{-2}$  Хартри, что соответствует 0,30 эВ (рис. 9).

Проведенные исследования показали, что создание двухслойного h-BCN возможно, но энергетически выгоднее образование двухслойного h-BCN из слоев, смещенных друг относительно друга по оси у на  $\frac{1}{2}$  от длины гексагона. Потенциальная энергия взаимодействия оказалась незначительно выше по сравнению с другими двухслойными структурами. Оптимальное расстояние между слоями ока-

залось равно примерно 4 Å. На этом расстоянии реализуется Ван-дер-Ваальсовское взаимодействие двух слоев (см. таблицу).

REFERENCES

1. Chhetri M., Maitra S., Chakraborty H., Waghmare U.V., Rao C.N.R. Superior Performance of Borocarbonitrides,  $B_x C_y N_z$ , as Stable, Low-Cost Metal-Free Electrocatalysts for the Hydrogen Evolution Reaction. *Energy Environmental Science*, 2016, vol. 1 (9), pp. 95-101. DOI: 10.1039/C5EE02521D

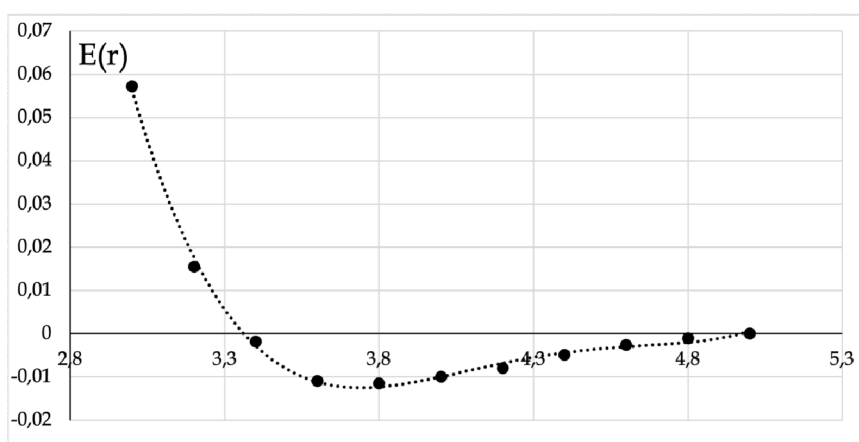


Рис. 8. Профиль поверхности потенциальной энергии процесса приближения слоев (см. рис. 3с)

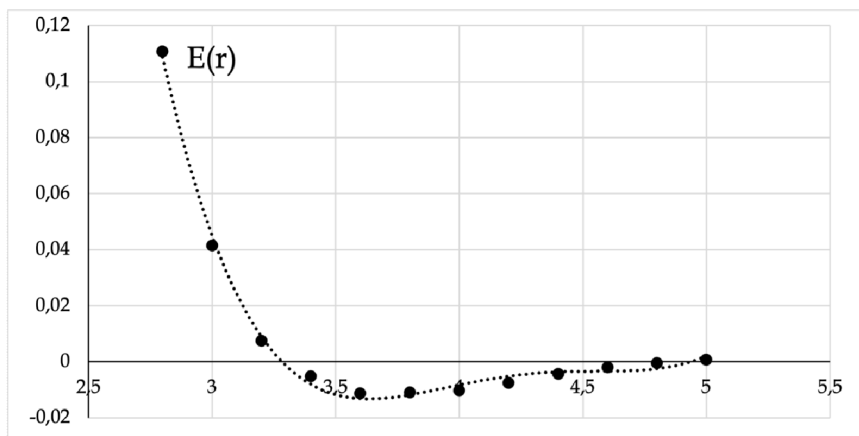


Рис. 9. Профиль поверхности потенциальной энергии процесса приближения слоев (см. рис. 3d)

**Значения энергии взаимодействия слоев h-BCN и оптимальные расстояния между слоями**

Виды двухслойного h-BCN		E, эВ	r, Å
Слой без смещения		0,22	4,0
Слой со смещением по оси X	Смещение верхнего слоя на $\frac{1}{4}$ от длины гексагона	0,26	4,0
	смещение верхнего слоя на $\frac{1}{2}$ от длины гексагона	0,27	3,8
Слой со смещением по оси Y	смещение верхнего слоя на $\frac{1}{4}$ от длины гексагона	0,24	4,0
	смещение верхнего слоя на $\frac{1}{2}$ от длины гексагона	0,31	3,8
	смещение верхнего слоя на 1 гексагон	0,30	3,6

2. Jalaly M., José Gotor F., Semnan M. A Novel, Simple and Rapid Route to the Synthesis of Boron Carbonitride Nanosheets: Combustive Gaseous Unfolding. *Scientific Reports*, 2017, vol. 1 (7), p. 3453. DOI: 10.1038/s41598-017-03794-7

3. Mir S.H., Yadav V.K., Singh J.K. Boron–Carbon–Nitride Sheet as a Novel Surface for Biological Applications: Insights from Density Functional

Theory. *ACS Omega*, 2019, vol. 2 (4), pp. 3732-3738. DOI: 10.1021/acsomega.8b03454

4. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D.A., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 2004, vol. 306 (5696), pp. 666-669. DOI: 10.1126/science.1102896

## RESEARCH OF THE POSSIBILITY OF CREATING A TWO-DIMENSIONAL h-BCN LAYER

**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

**Angelina A. Lebedeva**

Student, Department of Forensic Science and Physical Materials Science,  
Volgograd State University  
NMTb-211\_139753@volsu.ru  
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

**Abstract.** In this work, we evaluated the possibility of creating a bilayer crystal based on the BCN layer. Two-dimensional hexagonal BCN layer has opened new perspectives for science in the field of nanotechnology. This material is essentially graphene, in which some C-C bonds are replaced by B-N bonds. By adjusting the concentration of substituted bonds, the conductivity of this layer is regulated, that pure BN layer is a dielectric and graphene has excellent conductive characteristics. For this purpose, we have modelled molecular clusters of single-layer BCN (h-BCN) hexagonal structures and studied different orientations of the two BCN layers with respect to each other. The modelling of the h-BCN-based two-layer structure was carried out by means of bringing one layer closer to the other. Density functional theory DFT with B3LYP functional and 3-21G basis set was chosen as a computational method. Potential interaction energy curves of two BCN layers in different orientations relative to each other were obtained. Note that all potential curves are qualitatively similar. However, the values of potential energy of two-layer structures considered by us turned out to be different. The studies have shown that the creation of bilayer h-BCN is possible, but the formation of bilayer h-BCN from layers displaced relative to each other along the y-axis by S of the hexagon length is more energetically favourable. The interaction potential energy turned out to be insignificantly higher compared to other bilayer structures.

**Key words:** two-dimensional layer, two-dimensional carbo-nitride, BCN, layered structures, computer modelling of nanosystems.