

МИГРАЦИЯ ОДИНОЧНОГО ПРОТОНА ПО ПОВЕРХНОСТИ ДВУМЕРНОГО СЛОЯ BCN

Шкодин А.В.¹, Борознина Е.В.¹

¹) Волгоградский Государственный Университет. Волгоград, Россия.

E-mail: Poluosmak1998@gmail.com

PROTON MIGRATION ON A TWO-DIMENSIONAL BCN LAYER SURFACE

Shkodin A.V.¹, Boroznina E.V.¹

¹) Volgograd State University. Volgograd, Russian Federation.

Hydrogen atom adsorption on the surface of a two-dimensional BCN layer has studied. The research was carried out using the density functional theory. Two mechanisms of proton migration along the surface of two-dimensional BCN layer have been investigated namely “hopping” and “relay”.

Последние годы большого успеха достигли исследования, связанные с графеном – двумерная аллотропная модификация углерода. В связи с этим, по всему миру ученые начали исследования новых двумерных структур и соединений веществ, которые обладали бы еще более лучшими свойствами относительно графена в разных областях их потенциального применения. Одной из таких структур является двумерный слой гексагонального карбо нитрида бора h-BCN [1]. Ключевой особенностью данного слоя является то, что фактически он состоит из смеси углеродных связей С-С и боро-нитридных В-N, что в свою очередь позволяет изменять проводящие свойства материала, путем изменения концентрации связей В-N, в связи с этим проводятся широкие исследования относительно свойств данной структуры, а также ее синтеза. Таким образом данный материал является одним из наиболее привлекательных для изучения в настоящий момент. Например, ожидается что данное соединение будет перспективно в областях нано-электроники.

Исследования миграции протона проводились на кластере (рис.1).

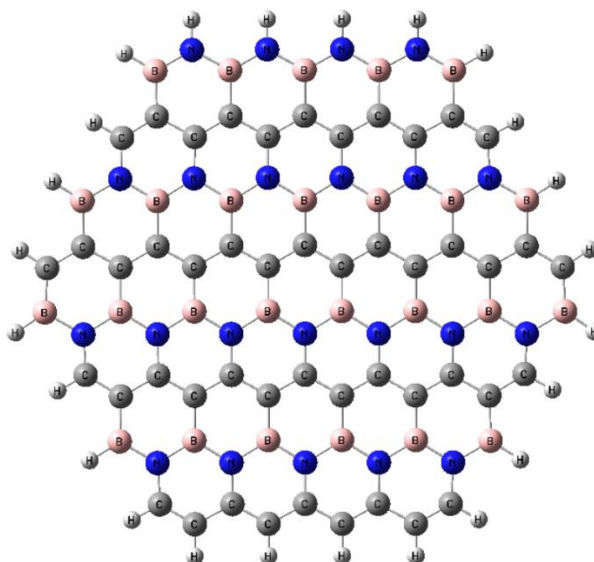


Рис. 1. Двумерный слой h-BCN.

Границы кластера замыкаются псевдо-атомами водорода, длины связей между атомами в пределах структуры варьируются от 1.39 Å между С-С, до 1.55 Å между В-С, в зависимости от соединенных веществ и положения связи в структуре. Моделирование механизма адсорбции происходило пошаговым приближением атома проводника H^+ , размещенного в середине кластера, для минимизации влияния краевых эффектов, к атомам С, В, N вдоль перпендикуляра к поверхности двумерного слоя h-BCN. Как оказалось водород адсорбировался на поверхности С на расстоянии 1.2 Å, а на поверхности В и N на расстоянии 1.4 Å, с перераспределением электронной плотности в результате которого образовывался протон. При моделировании процесса миграции адсорбированного протона использовалось два механизма перемещения: «прыжковый» (перемещение внутри гексагона напрямую) и «эстафетный» (перемещение атома вдоль линии связи). Сами расчеты производились посредством создания фиктивного атома, находящегося над конечной точкой стационарного состояния протона. Далее происходило пошаговое приближение протона к фиктивному атому с изменением координаты реакции на величину 0.2 Å. По результатам расчетов были построены кривые потенциальной энергии, претерпеваемой протоном при миграции вдоль слоя, а также проведен анализ зонного строения слоя, с построением графиков плотности состояний при различной локализации протона.

1. Yang Da-Peng, Li Ying-Ai, Yang Xu-Xin, Du Yong-Hui, Ji Xiao-Rui, Gong Xi-Liang, Su Zuo-Peng, Zhang Tie-Chen, Chinese Physics Letters, 24, 1088-1091, (2007)