

Streszczenie

Synteza grafenu otworzyła nową erę w poszukiwaniu materiałów do zastosowań nanotechnologicznych. W tym kontekście materiały 2D o dużym stosunku powierzchni do objętości, stabilności i doskonałych właściwościach elektronowych, termicznych, transportowych i mechanicznych są potencjalnie odpowiednie do wykrywania gazów, adsorpcji chemicznej i zastosowań katalitycznych.

Należący do rodziny Xenes (gdzie X reprezentuje element z układu okresowego pierwiastków) dwuwymiarowych materiałów jednoelementowych, borofen, składający się wyłącznie z atomów boru, został po raz pierwszy zaproponowany i zbadany teoretycznie w latach 90-tych, a następnie zsyntetyzowany w 2015 roku. Od tego czasu doceniono jego wyjątkowe właściwości fizyczne i elektronowe, choć ten obiecujący materiał wciąż znajduje się na wczesnym etapie poznania. W związku z tym teoretyczna analiza jego właściwości i zastosowań może stać się punktem wyjścia do dalszych badań eksperymentalnych.

Bor, pierwiastek metaloidalny o konfiguracji elektronowej $1s^2 2s^2 2p^1$ ma niedobór elektronów. Ten stan elektronowy powoduje powstawanie egzotycznych wiązań, które prowadzą do istnienia licznych odmian alotropowych boru, w przeciwieństwie do jego bezpośrednich sąsiadów w układzie okresowym, węgla i krzemu. Co ciekawe, odpowiedni dwuwymiarowy kryształ o grubości jednego atomu można uzyskać poprzez wzrost na metalowym podłożu, takim jak Ag. Co więcej, niektóre badania wykazały, że włączenie atomów metali przejściowych może stabilizować borofen poprzez transfer elektronów z metalu do boru.

W tym kontekście MBenes są dwuwymiarowymi materiałami, które wywodzą się z ich macierzystych faz objętościowych MAB (gdzie M jest metalem przejściowym, A jest często pierwiastkiem z grupy IIIA-IVA, a B jest borem) i z tego powodu są uważane za krewnych MXenów, które przyciągnęły ogromną uwagę w ostatnich latach. MBeny występują w kilku stechiometriach, a obecność atomów metali przejściowych nadaje im szczególną wytrzymałość i właściwości magnetyczne, które otwierają nowe możliwości dla związków na bazie boru.

Rozprawa doktorska koncentruje się na dwóch różnych klasach materiałów na bazie boru jako potencjalnych kandydatów do wykrywania lub absorpcji gazów:

- (i) *Wybrane polimorfy borofenu (struktura α -sheet, struktura pofałdowana heksagonalna i struktura typu plastra miodu) o zróżnicowanej strukturze i właściwościach fizykochemicznych.* Przeprowadzono obliczenia z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości (DFT), aby zbadać wpływ na właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne po adsorpcji potencjalnie szkodliwych cząsteczek gazu (CO , CO_2 , NO , NO_2 i NH_3) na borofenach o strukturze α -sheet, heksagonalnej pofałdowanej i typu plastra miodu. Wynikiem obliczeń było między innymi to, że transfer ładunku między cząsteczkami a strukturą 2D destabilizuje wiązania, tworząc dystorsje strukturalne, co powoduje, że bor tworzy z sąsiadami hybrydyzację sp^3 zamiast sp^2 obecnej w płaskim (lub quasi-płaskim)

borofenie, co prowadzi zarazem do silnego wiązania z adsorbatem i czyni ten materiał optymalnym jako adsorbent gazu.

- (ii) *MBenes ze stechiometrią M_2B_2 ($M = Cr, Fe$ i Zr).* Jako pierwszy krok w obliczeniach komputerowych, zbadane zostały właściwości czystych MBenes, które ujawniły ich wyjątkową wytrzymałość strukturalną a także dobre przewodnictwo elektryczne. Dodatkowo, ze względu na obecność atomów metali przejściowych w ich składzie, zaobserwowane zostało, że wprowadzenie poprawki Hubbarda ma istotny wpływ na ich elektronowe i magnetyczne stany podstawowe. Co więcej, wartości momentów magnetycznych wskazują na ich możliwe zastosowanie w spintronice jako układów o wysokich temperaturach krytycznych. Z perspektywy adsorpcji zarówno szkodliwych cząsteczek (CO , CO_2 , NO_2 , SO_2 i NH_3), jak i innych typowych cząsteczek obecnych w atmosferze (H_2O , N_2 i O_2), znalezione zostało potencjalne zastosowanie MBenes nie tylko jako czujników gazu, ale także jako wychwytywaczy cząsteczek gazu z możliwością ich usuwania.

Zawarte w rozprawie cztery publikacje stanowią spójny zbiór wyników badań nad dwuwymiarowymi materiałami na bazie boru oraz ich interakcjami z małymi cząsteczkami, ukazując wpływ adsorpcji na właściwości fizykochemiczne tych układów.