

УДК 544.022.22: [546.3-14:546.3-161]

Оригинальная статья

ПРОЧНОСТНЫЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГЕКСА- И ПЕНТАГОНАЛЬНЫХ 2D-МАТЕРИАЛОВ. ВОДОРОД

Э.Д. Курбанова, В.А. Полухин

ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»

620016, Россия, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

p.valery47@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.458

Аннотация: Проведен анализ синтезированных уникальных двумерных 2D-материалов с нанослойными гексагональными и пентагональными структурами (на основе углерода, кремния, олова, двойных соединений CN_2 , BN_2 , $PdSe_2$ и тройных – BCN , CNP , $PdSSe$, $Zn_2C_2P_2$). Синтез этих материалов получен химическим паровым осаждением или эпитаксией металлов на заранее приготовленные подложки. Проведен также анализ прочностных и функциональных характеристик (электронных, оптических) созданных моделей с применением теории DFT в виде тройных монослоев с обоюдосторонним нанесением водорода на поверхности монослоя $p-Si_2C_4$: водород/ $p-Si_2C_4$ /водород. Выявлено, что наиболее динамически стабильным из них был слой $p-Si_2C_4-4H$ с его двухсторонней водородной адсорбцией и хорошими свойствами. В этой статье также представлены сравнительно недавно полученные гекса- и пентагональные двумерные материалы не только элементов C , Si , Ge , B , но и сплавов $Cu_{1-x}Ni_x$, $Ti_{1-x}Ni_x$ и соединений $Bi_{1-x}Sb_x$, CN_2 , BN_2 , $PdSe_2$ и др. Так что с созданными новыми уникальными материалами – синтеза сверхпрочных, термостабильных нанокомпозитов, сверхпроводящих слоистых композитов (на основе Bi , Hg и Sb) открываются перспективы развития наноэлектроники, спинтроники, компьютерной техники, а также создания портативных тензодатчиков, датчиков давления, газовых датчиков и катализаторов диализа воды с выделением водорода и кислорода.

Ключевые слова: гексагональные и пентагональные структуры 2D-материалов, моделирование материалов, механические свойства, каталитические свойства.

1. Введение

Полученные сравнительно недавно гекса- и пентагональные двумерные материалы (элементов C , Si , Ge , B , сплавов $Cu_{1-x}Ni_x$, $Ti_{1-x}Ni_x$ и соединений $Bi_{1-x}Sb_x$ [1-3], открывают новые перспективы не только развития наноэлектроники, спинтроники, но и синтеза сверхпрочных, термостабильных нанокомпозитов. Благодаря созданной геометрии эти 2D-материалы обладают уникальными свойствами: сверхпроводимости, ферромагнетизмом с высокой температурой Кюри и топологическим квантовым состоянием, гигантской внеплоскостной восприимчивости к генерации второй гармоники, высокими характеристиками термостабильности и прочности сплавов, а также отрицательным коэффициентом Пуассона [4]. Анализ 2D-электронных структур на основе пятиугольников имеет решающее значение для выявления в них зарядапереноса вблизи состояний равновесия. Так для удобства все рассматриваемые фазы далее будут обозначены префиксом «ПЕНТА» [4],

а для простоты и латинской буквой «*p*– или *P*, пентаграфен: *PG*».

Далее рассмотрен комплекс материалов [5] на предмет прочностных и функциональных характеристик, созданных с применением теории DFT модельных пентагональных монослоев $p-Si_2C_4$ с адсорбированием их обоюдосторонних поверхностей: водород/ $p-Si_2C_4$ /водород. Основываясь на групповой симметрии пентагональных структур можно получить представление о зонном вырождении в их электронных структурах, а также зарядового транспорта и электрон-фононного взаимодействия с применением теории деформационного потенциала.

2. Синтез и моделирование 2D-материалов

Вслед за гексагональным графеном были выстроены альтернативные пентагональные 2D-структуры графена [5] с другими элементами из неидентичных пятиугольников, как их сторон и углов, а также из идентичных копий пятиугольников одинаковой формы. Создаваемые пентаграммы классифицированы как варианты мозаичных плоскостей MX_2 α - и β - фаз с подобранными элементами и по их сходству геометрии мозаик (с тройными координационными узлами состыкованных пятиугольников): $p-CNP$ [6] и $p-BCN$ [7] с моноклинной пространственной групповой симметрией. Они получены заменой одних элементов на димеры поляризованных радикалов *BN* и *NP* в мозаиках α -фаз *PG* и $p-CN_2$, соответственно, а также их производных с классификацией « α' -фазы». С такой процедурой были созданы конфигурации тройных структур на основе β -фазы – пентагональных конфигураций *PdSSe* и *PdSeTe* [8]. Также с производной β' -фазой с другой симметрией, отличающиеся от компоновки α' -фазы. Отличие же состоит в том, что в конфигурации поляризованных радикалов, соответственно, *SSe* и *SeTe* внедрены атомы *Pd* – непосредственно в плоскости их пентагональных решеток, но в итоге уже с обновленными конфигурациями. В то время как другая пентагональная структура *PdSSe* с ионной симметрией и другой пространственной группировкой [9], отличающаяся от β' -фазы *PdSSe* [8] и со спонтанной поляризацией, классифицируется как β'' -фаза. С такими же заменами можно получить троичные плоскостные пентагональные структуры [10], заменив элемент атома *M* и его соседей по вектору решетки *b* в суперячейке α' -фазы $p-MX_2$, но с ионной химической формулой MNX_4 , классифицируемой как α'' -фаза. Элементарная ячейка такой структуры содержит атомы *M* (металла), два атома *N* и восемь атомов *X* (не металла) и обладает ромбической пространственной групповой симметрией [4, 10]. Еще один пример также состоит в замене

элементами других димеров X_2 [11] в слоях $p-MX_2$ (два атома $X_2=C_2P_2$), т.е. пента- $Zn_2C_2P_2$. В статье [8] такими методами были получены в общей сложности 23 пентагональных мозаики, но среди них не было 2D-пентагональных конфигураций, содержащих более шести атомов в элементарных ячейках по типу α'' -фазы. Также и пентагональная 2D-фаза $p-BN_2$ была создана тем же методом – заменой каждого второго димера поляризованным радикалом BN [12].

3. Деформация и прочность.

Механические свойства листов на основе пятиугольников были тщательно изучены характеристики модуля Юнга и коэффициент Пуассона. Механическая устойчивость материала описывается критериями Борна–Хуанга [13], основанными на компонентах тензора упругости C_{ij} со значениями i и j от 1 до 6 в обозначениях Фойгта [14]. При этом характеристики 2D-материалов обычно описываются в единицах ГПа·нм (эквивалентно Н/м), а не в ГПа.

Выявлено, что структуры, созданные из элементов с малыми радиусами (более легких) при механических нагрузках преобладают высокие значения модулей Юнга. Например, для изоэлектронных листов $p-MX_2$ модули Юнга α -фазы $p-CN_2$ и $p-XC$ ($X:P, As, Sb$) составляют 315, 60,33, 37,32 и 8,65 ГПа·нм [15, 16], для фазы $p-PdX_2$ ($X:S, Se, Te$) вдоль направлений x/y 56,5/78,3, 37,7/61,5 и 23,2/51,0 ГПа·нм, соответственно, [17]. Они уменьшаются по мере увеличения атомной массы атомов X . Это также относится и к атомам M ; например, модули Юнга $p-SiN_2$ [15] и $p-GeC_2$ [10] ниже, чем у $p-CN_2$ [15] и PG [18], соответственно. Основная причина этой тенденции заключается в том, что легкие элементы обычно имеют меньший размер атома, что приводит к более сильному связыванию и, следовательно, к более высоким силовым константам, которые в сумме приводят к высоким модулям Юнга.

Напротив, атомы X с большими радиусами – As и Se в узлах с трехкратными координациями, не могут эффективно образовывать π -связи из-за большой длины связи $X-X$. Атомы M тяжелых переходных металлов, такие как Pd и Pt в узлах с четырехкратными координациями могут привести к обратному донорству, когда их d -электроны заполняют орбитали X -димеров. Так что структуры на основе пятиугольников из легких элементов и с их малыми радиусами (с короткими межатомными расстояниями), как правило, имеют высокие модули Юнга.

Для тройных производных и фазовых слоев, например, $p-CNP$, как производных $p-CN_2$ и $p-PC$, и фазовых $PdSSe$ - тоже как производных

фазовых $p-PdS_2$ и $p-PdSe_2$, модули Юнга не сильно отличаются от своих бинарных аналогов. Для однофазных листов MX_2 , за исключением гидрированных (PtP_2H_2 и $H-Pt_2N_4$) модули Юнга вдоль оси y больше, чем вдоль оси x до 100%. Например, модули Юнга фазы $p-PdSe_2$ вдоль векторов решетки a и b составляют x 37,7 и 61,5 ГПа·нм [17] соответственно, что свидетельствует о значительной анизотропии жесткости. В то же время для листов α - и β -фазы MX_2 с одинаковой химической формулой (MS_2 , $M: Ni, Zn, Ag, Cd$) [19] модули Юнга фазовых структур α -фазы, за исключением фазового листа $p-NiS_2$, выше, чем у β -фазовых структур в обоих осевых направлениях. Это характерно, учитывая длины межатомных связей в этих структурах. Так для слоев α - и β -фазы с одинаковой химической формулой MX_2 с их межатомными связями $M-X$ (sp^3 -орбиталей) в слоях α -фазы более локализованы вокруг атома M , чем с dsp^2 -орбиталями в β -фазовых листах. Именно короткая длина межатомных связей создает более прочные химические связи, поэтому в листах α -фазы с более сильными – короткими связями $M-X$ измерения дают высокие модули Юнга.

Были проведены эксперименты [16-18,20] по определению такой механической характеристики как коэффициента Пуассона σ . Коэффициент Пуассона, согласно Фейнману: σ – число положительное величиной менее 1/2. Однако для некоторых пентагональных 2D-материалов коэффициент Пуассона как показатель деформация сжатия в перпендикулярном направлении приложенной нагрузки может быть отрицательным ($p-B_2C$, $\nu=0,906$ [12] и $p-NiTe_2$, $\nu=-0,100$ [17]).

4. Катализ с применением 2D-пентагональных сплавов

В поисках материалов для возобновляемых источников энергии был получен пентагональный 2D слоистый дихалькогенид благородных переходных металлов фотокатализатор $PdSe_2$ [20], обладающий высокой стабильностью и новыми свойствами. Действительно 2D пентагональные фотокатализаторы считаются наиболее перспективным подходом с аккумуляцией солнечной энергии. Были проведены исследования электронных и оптических свойств монослоя $PdSe_2$ с применением теории функционала плотности. Результаты показывают, что монослой $PdSe_2$ проявляет анизотропные оптические, электронные и механические свойства в плоскости из-за низкой степени симметрии решетки. Кроме того, получены подходящие положения полосовой щели и края полосы, что приводит к высокой эффективности преобразования солнечной энергии в водород до 12,59% с расщеплением молекул H_2O . По сравнению

с обычными материалами [21, 22], а также рассмотренный выше гекса- (как и пентагональные 2D-материалы) именно монослойный 2D-PdSe₂ материал, несмотря на медленный процесс электронно-дырочной рекомбинации (с временной шкалой порядка 1,9 нс), в действительности представляется перспективным кандидатом для применения расщепления воды (сплиттинга $H_2O \rightarrow 2H^+$ и O^{2-}).

При исследовании теоретическим методом скрининга в рамках теории функционала плотности [5] с размещением атомов водорода на обеих поверхностях 2D пентагонального материала – монослоя $p-Si_2C_2$, в виде сэндвича $Si_2C_2/4H$ – выяснилось, что такой материал может быть реально применяемым полупроводником с наличием запрещенной зоны, варьирующейся от 2,06 до 3,41 эВ, см. рис. 1 [5]. В созданной модели идет процесс, как относительно потенциалов окисления (O_2/H_2O), так и выделения водорода с реакцией расщепления воды (H^+/H_2) при $pH=0$ (см. рис. 1). Результат такого процесса был с почти идеальным значением -0,03 эВ.

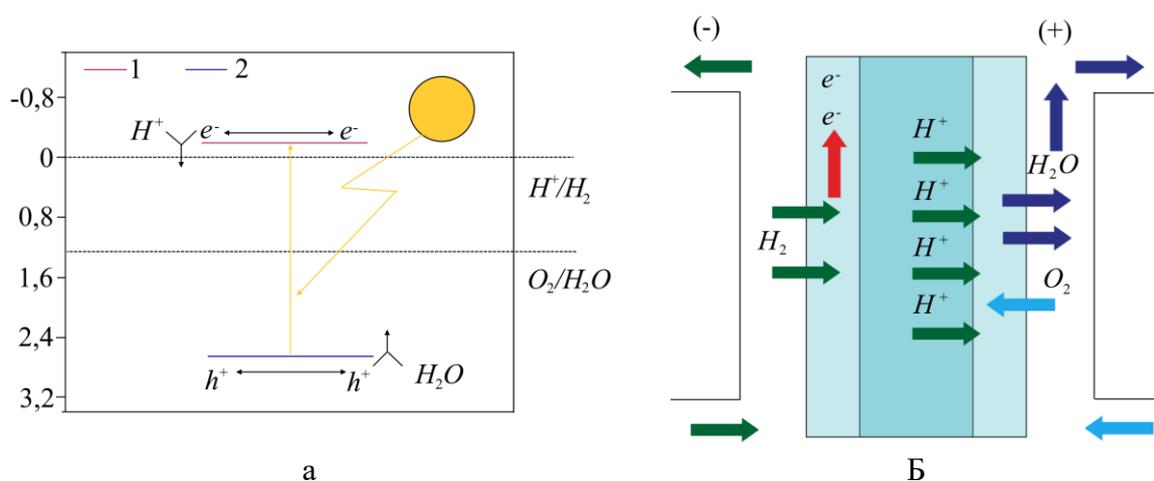


Рис. 1. Краевая полоса зонной структуры V_s (эВ): 1 – минимальная полоса проводимости (электроны $2H^+ + 2e \rightarrow H_2$); 2 – максимальная полоса валентности (дырки « h^+ », $H_2O_2 + 2h^+ \rightarrow 2H^+ + 1/2O_2$) с расщеплением воды ($2H \leftrightarrow O$). Схематическая диаграмма положения края полосы монослоя $p-Si_2C_2-4H$, рассчитанная на основе DFT-функционала [5] (а), принцип действия реализованного водородного электрогенератора с реакцией окисления водорода [23] (б).

Так что и другие 2D-пентагональные сплавы из переходных металлов также демонстрируют каталитические свойства при абсорбировании водорода в узлах решеток соединений $p-NiSe_2$ [20], $p-PdS_2$, $p-NiTe_2$ [5], $p-PdSSe$ [9], $p-ZnS_2$ [19] (с близким значением

-0,03 эВ). Что касается p - $PdSe_2$, то его первичный 2D-лист не пригоден для катализа (реакция выделения) $Pv-H_2$ из-за высокого напряжения, – более 1 эВ [20]. Хотя высокая активность выделения $Pv-H_2$ была подтверждена электрохимическими экспериментами [24]. Также хорошо водород выделяется в 2D-пентагональных сплавах в узлах решеток с атомами Pd , так и атомами Se на плоскостях пентагональных листов. Показано также в работе [25], что и 2D-пентагональный $SiAs_2$ может быть использован для расщепления воды одновременно как в реакции выделения $Pv-H_2$, так и в $Pv-O_2$ при внешнем напряжении 1,47 В [25]. С применением 2D-пентагонального TiP катализатора реализовалась реакция восстановления соединения NH_3 при внешнем напряжении 0,72 В [26].

5. Заключение

В предлагаемой статье проведен анализ прочностных и функциональных характеристик (электронных, оптических) реализованных моделей с применением теории DFT и построением пентагональных монослоев $p-SiC_4$ с адсорбированием их обоюдосторонних поверхностей: водород/ $p-SiC_4$ /водород. Выявлено, что наиболее динамически стабильным из них был слой $p-SiC_4-4H$ с его двухсторонней водородной адсорбцией и хорошими свойствами. В работе также представлены гекса- и пентагональные двумерные материалы (элементов C , Si , Ge , B , сплавов $Cu_{1-x}Ni_x$, $Ti_{1-x}Ni_x$ и соединений $Bi_{1-x}Sb_x$, CN_2 , BN_2 , $PdSe_2$), а также нанолент 2D $p-Si$ и $p-Ge$ [4], соответственно, и Si/Ag [22]. Таким образом, синтезированы новые уникальные слоистые нанокompозиты, гекса- и пентагональные 2D-материалы со сверхпрочными, термостабильными характеристиками. Эти слоистые материалы обладают и сверхпроводимостью [1-4, 25] с перспективой развития наноэлектроники, спинтроники, компьютерной техники, создания реальных портативных тензодатчиков, датчиков давления, газовых датчиков и катализаторов расщепления воды с выделением водорода, и кислорода. Именно в результате армирования их как гекса- так и пентагональными решетками графена, силицена, германена, селена и др. при их послойной упаковке с формированием не только 2D-материалов, но и с возможной процедурой 3D-типирования реальных материалов и объемных устройств.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН.

Библиографический список:

1. **Polukhin, V.A.** Thermal stability and deformation mechanisms in graphene- or silicene-reinforced layered and matrix metallic composites / V.A. Polukhin, N.A. Vatolin // *Russian Metallurgy (Metally)*. – 2018. – V. 2018. – I. 8. – P. 685-699. DOI: 10.1134/S0036029518080153.
2. **Polukhin, V.A.** Dependence of the thermal stability of the interface states of d metals (Cu, Pd, Ti, Ni) and Al with graphene on the character of sorption and diffusion mobility in a contact zone / V.A. Polukhin, E.D. Kurbanova // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. – 2015. – V. 89. – I. 3. – P. 531-546. DOI: 10.1134/S0036024415030243.
3. **Polukhin, V.A.** Stability, atomic dynamics, and thermal destruction of the d metal/graphene interface structure / V.A. Polukhin, E.D. Kurbanova // *Russian Metallurgy (Metally)*. – 2017. – V. 2017. – I. 2. – P. 116-126. DOI: 10.1134/S0036029517020112.
4. **Shen, Y.** Pentagon-based 2D materials: Classification, properties and applications / Y. Shen, Q. Wang // *Physics Reports*. – 2022. – V. 964. – P. 1-42. DOI: 10.1016/j.physrep.2022.03.003.
5. **Maymoun, M.** Surface functionalization of penta-siligraphene monolayer for nanoelectronic, optoelectronic and photocatalytic water-splitting: A first-principles study / M. Maymoun, S. Oukahou, A. Elomrani et al. // *Applied Surface Science*. – 2022. – V. 590. – Art. № 152972. – 10 p. DOI: 10.1016/j.apsusc.2022.152972.
6. **Sun, W.** 1, 2, 4-azadiphosphole-based piezoelectric penta-CNP sheet with high spontaneous polarization / W. Sun, Y. Shen, Y. Guo, Y. Chen, Q. Wang // *Applied Surface Science*. – 2021. – V. 554. – Art. № 149499. – 6 p. DOI: 10.1016/j.apsusc.2021.149499.
7. **Zhao, K.** Penta-BCN: A new ternary pentagonal monolayer with intrinsic piezoelectricity / K. Zhao, Y. Guo, Y. Shen et al. // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. – 2020. – V. 11. – I. 9. – P. 3501-3506. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.0c00824.
8. **Bravo, S.** Two-dimensional Weyl points and nodal lines in pentagonal materials and their optical response / S. Bravo, M. Pacheco, V. Nunez // *Nanoscale*. – 2021. – V. 13. – I. 12. – P. 6117-6128. DOI: 10.1039/D1NR00064K.
9. **Zhou, Y.** PdSSe: Two-dimensional pentagonal Janus structures with strong visible light absorption for photovoltaic and photocatalytic applications / Y. Zhou, X. Yang, J. He // *Vacuum*. – 2020. – V. 181. – Art. № 109649. – 6 p. DOI: 10.1016/j.vacuum.2020.109649.
10. **Kilic, M.E.** Penta carbides: Two-dimensional group-IV semiconductors containing C₂ dimers for nanoelectronics and photocatalytic water splitting / M.E. Kilic, K.R. Lee // *Physical Review Materials*. – 2021. – V. 5. – I. 6. – P. 065404-1-065404-14. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.065404.
11. **Li, J.** Penta-BN sheet: a density functional theory study of two-dimensional material / J. Li, X. Fan, Y. Wei, G. Chen // *Scientific Reports*. – 2016. – V. 6. – Art. № 31840. – 9 p. DOI: 10.1038/srep31840.
12. **Cheng, Z.** Binary pentagonal auxetic materials for photocatalysis and energy storage with outstanding performances / Z. Cheng, X. Zhang, H. Zhang et al. // *Nanoscale*. – 2022. – V. 14. – I. 5. – P. 2041-2051. DOI: 10.1039/D1NR08368F.
13. **Born, M.** Dynamical theory of crystal lattices / M. Born, K. Huang. – Oxford: Oxford University Press, 1954. – 432 p.
14. **Voigt, W.** Lehrbuch der kristallphysik (mit ausschluß der kristalloptik) / W. Voigt. – Stuttgart: Springer Fachmedien Wiesbaden, 1966. – XXVI, 979 p. DOI: 10.1007/978-3-663-15884-4. (In German).
15. **Zhang, S.** Beyond graphitic carbon nitride: nitrogen-rich penta-CN₂ sheet / S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, P. Jena // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2016. – V. 120. – I. 7. – P. 3993-3998. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b12510.
16. **Sun, S.** Flexible, auxetic and strain-tunable two dimensional penta-X₂C family as water splitting photocatalysts with high carrier mobility / S. Sun, F. Meng, Y. Xu et al. // *Journal of Materials Chemistry A*. – 2019. – V. 7. – I. 13. – P. 7791-7799. DOI: 10.1039/C8TA12405A.
17. **Xiong, W.** The mechanical, electronic and optical properties of two-dimensional transition metal chalcogenides MX₂ and M₂X₃ (M = Ni, Pd; X = S, Se, Te) with hexagonal and orthorhombic structures / W. Xiong, K. Huang, S. Yuan // *Journal of Materials Chemistry C*. – 2019. – V. 7. – I. 43. – P. 13518-13525. DOI: 10.1039/C9TC04933A.
18. **Zhang, S.** Penta-graphene: a new carbon allotrope / S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang // *The Proceedings of the National Academy of Sciences*. – 2015. – V. 112. – I. 8. – P. 2372-2377. DOI: 10.1073/pnas.1416591112.
19. **Lv, X.** Penta-MS₂ (M = Mn, Ni, Cu/Ag and Zn/Cd) monolayers with negative Poisson's ratios and tunable bandgaps as water-splitting photocatalysts / X. Lv, L. Yu, F. Li et al. // *Journal of Materials Chemistry A*. – 2022. – V. 9. – I. 11. – P. 6993-7004. DOI: 10.1039/D1TA00019E.
20. **Long, C.** PdSe₂: Flexible two-dimensional transition metal dichalcogenides monolayer for water splitting photocatalyst with extremely low recombination rate / C. Long, Y. Liang, H. Jin et al. // *ACS Applied Energy*

- Materials. – 2018. – V. 2. – I. 1. – P. 513-520. DOI: 10.1021/acsaem.8b01521.
21. **Polukhin, V.A.** Characteristics of amorphous, nanocrystalline and crystalline membrane alloys / V.A. Polukhin, N.I. Sidorov, E.D. Kurbanova, R.M. Belyakova // *Russian Metallurgy (Metally)*. – 2022. – V. 2022. – I. 8. – P. 869-880. DOI: 10.1134/S0036029522080122.
22. **Galashev, A.E.** Computer-assisted study of silver absorption by porous silicon dioxide nanoparticles / A.E. Galashev, V.A. Polukhin // *Colloid Journal*. – 2011. – V. 73. – I. 6. – P. 761-767. DOI: 10.1134/S1061933X11050036.
23. **Белякова, Р.М.** Анализ характеристик мембранных сплавов на основе Nb – Ni и V – Ni / Р.М. Белякова, Э.Д. Курбанова, В.А. Полухин // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2021. – Вып. 13. – С. 552-561. DOI: 10.26456/pcasenn/2021.13.552.
24. **Lin, Z.** Planar-coordination PdSe₂ nanosheets as highly active electrocatalyst for hydrogen evolution reaction / Z. Lin, B. Xiao, Z. Wang et al. // *Advanced Functional Materials*. – 2021. – V. 31. – I. 32. – Art. № 2102321. – 6 p. DOI: 10.1002/adfm.202102321.
25. **Zheng, K.** Two-dimensional penta-SiAs₂: a potential metal-free photocatalyst for overall water splitting / K. Zheng, H. Cui, H. Luo et al. // *Journal of Materials Chemistry C*. – 2020. – V. 8. – I. 34. – P. 11980-11987. DOI: 10.1039/D0TC01206H.
26. **Ying, Y.** Predicting two-dimensional pentagonal transition metal monophosphides for efficient electrocatalytic nitrogen reduction / Y. Ying, K. Fan, X. Luo, H. Huang / *Journal of Materials Chemistry A*. – 2019. – V. 7. – I. 18. – P. 11444-11451. DOI: 10.1039/C8TA11605A.

References:

1. Polukhin V.A., Vatolin N.A. Thermal stability and deformation mechanisms in graphene- or silicene-reinforced layered and matrix metallic composites, *Russian Metallurgy (Metally)*, 2018, vol. 2018, issue 8, pp. 685-699. DOI: 10.1134/S0036029518080153.
2. Polukhin V.A., Kurbanova E.D. Dependence of the thermal stability of the interface states of d metals (Cu, Pd, Ti, Ni) and Al with graphene on the character of sorption and diffusion mobility in a contact zone, *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2015, vol. 89, issue 3, pp. 531-546. DOI: 10.1134/S0036024415030243.
3. Polukhin V.A., Kurbanova E.D. Stability, atomic dynamics, and thermal destruction of the d metal/graphene interface structure, *Russian Metallurgy (Metally)*, 2017, vol. 2017, issue 2, pp. 116-126. DOI: 10.1134/S0036029517020112.
4. Shen Y., Wang Q. Pentagon-based 2D materials: Classification, properties and applications, *Physics Reports*, 2022, vol. 964, pp. 1-42. DOI: 10.1016/j.physrep.2022.03.003.
5. Maymoun M., Oukahou S., Elomrani A. et al. Surface functionalization of penta-siligraphene monolayer for nanoelectronic, optoelectronic and photocatalytic water-splitting: A first-principles study, *Applied Surface Science*, 2022, vol. 590, art. no. 152972, 10 p. DOI: 10.1016/j.apsusc.2022.152972.
6. Sun W., Shen Y., Guo Y., Chen Y., Wang Q. 1, 2, 4-azadiphosphole-based piezoelectric penta-CNP sheet with high spontaneous polarization, *Applied Surface Science*, 2021, vol. 554, art. no. 149499, 6 p. DOI: 10.1016/j.apsusc.2021.149499.
7. Zhao K., Guo Y., Shen Y. et al. Penta-BCN: A new ternary pentagonal monolayer with intrinsic piezoelectricity, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2020, vol. 11, issue 9, pp. 3501-3506. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.0c00824.
8. Bravo S., Pacheco M., Nunez V. Two-dimensional Weyl points and nodal lines in pentagonal materials and their optical response, *Nanoscale*, 2021, vol. 13, issue 12, pp. 6117-6128. DOI: 10.1039/D1NR00064K.
9. Zhou Y., Yang X., He J. PdSSe: Two-dimensional pentagonal Janus structures with strong visible light absorption for photovoltaic and photocatalytic applications, *Vacuum*, 2020, vol. 181, art. no. 109649, 6 p. DOI: 10.1016/j.vacuum.2020.10964.
10. Kilic M.E., Lee K.R. Penta carbides: Two-dimensional group-IV semiconductors containing C₂ dimers for nanoelectronics and photocatalytic water splitting, *Physical Review Materials*, 2021, vol. 5, issue 6, pp. 065404-1-065404-14. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.065404.
11. Li J., Fan X., Wei Y., Chen G. Penta-BN sheet: a density functional theory study of two-dimensional material, *Scientific Reports*, 2016, vol. 6, art. no. 31840, 9 p. DOI: 10.1038/srep31840.
12. Cheng Z., Zhang X., Zhang H. et al. Binary pentagonal auxetic materials for photocatalysis and energy storage with outstanding performances, *Nanoscale*, 2022, vol. 14, issue 5, pp. 2041-2051. DOI: 10.1039/D1NR08368F.
13. Born M., Huang K. *Dynamical theory of crystal lattices*. Oxford, Oxford University Press, 1954, 432 p.
14. Voigt W. *Lehrbuch der kristallphysik (mit ausschluss der kristalloptik)*. Stuttgart, Springer Fachmedien Wiesbaden, 1966, XXVI, 979 p. DOI: 10.1007/978-3-663-15884-4. (In German).

15. Zhang S., Zhou J., Wang Q., Jena P. Beyond graphitic carbon nitride: nitrogen-rich penta-CN₂ sheet, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2016, vol. 120, issue 7, pp. 3993-3998. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b12510.
16. Sun S., Meng F., Xu Y. et al. Flexible, auxetic and strain-tunable two dimensional penta-X₂C family as water splitting photocatalysts with high carrier mobility, *Journal of Materials Chemistry A*, 2019, vol. 7, issue 13, pp. 7791-7799. DOI: 10.1039/C8TA12405A.
17. Xiong W., Huang K., Yuan S. The mechanical, electronic and optical properties of two-dimensional transition metal chalcogenides MX₂ and M₂X₃ (M = Ni, Pd; X = S, Se, Te) with hexagonal and orthorhombic structures, *Journal of Materials Chemistry C*, 2019, vol. 7, issue 43, pp. 13518-13525. DOI: 10.1039/C9TC04933A.
18. Zhang S., Zhou J., Wang Q. Penta-graphene: a new carbon allotrope, *The Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2015, vol. 112, issue 8, pp. 2372-2377. DOI: 10.1073/pnas.1416591112.
19. Lv X., Yu L., Li F. et al. Penta-MS₂ (M = Mn, Ni, Cu/Ag and Zn/Cd) monolayers with negative Poisson's ratios and tunable bandgaps as water-splitting photocatalysts, *Journal of Materials Chemistry A*, 2022, vol. 9, issue 11, pp. 6993-7004. DOI: 10.1039/D1TA00019E.
20. Long C., Liang Y., Jin H. et al. PdSe₂: Flexible two-dimensional transition metal dichalcogenides monolayer for water splitting photocatalyst with extremely low recombination rate, *ACS Applied Energy Materials*, 2018, vol. 2, issue 1, pp. 513-520. DOI: 10.1021/acsaem.8b01521.
21. Polukhin V.A., Sidorov N.I., Kurbanova E.D., Belyakova R.M. Characteristics of amorphous, nanocrystalline and crystalline membrane alloys, *Russian Metallurgy (Metally)*, 2022, vol. 2022, issue 8, pp. 869-880. DOI: 10.1134/S0036029522080122.
22. Galashev A.E., Polukhin V.A. Computer-assisted study of silver absorption by porous silicon dioxide nanoparticles, *Colloid Journal*, 2011, vol. 73, issue 6, pp. 761-767. DOI: 10.1134/S1061933X11050036.
23. Belyakova R.M., Kurbanova E.D., Polukhin V.A. Analiz kharakteristik membrannykh splavov na osnove Nb – Ni i V – Ni [Analysis of Nb – Ni and V – Ni based membrane characteristics], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2021, issue 13, pp. 552-561. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.552. (In Russian).
24. Lin Z., Xiao B., Wang Z. et al. Planar-coordination PdSe₂ nanosheets as highly active electrocatalyst for hydrogen evolution reaction, *Advanced Functional Materials*, 2021, vol. 31, issue 32, art. no. 2102321, 6 p. DOI: 10.1002/adfm.202102321.
25. Zheng K., Cui H., Luo H. et al. Two-dimensional penta-SiAs₂: a potential metal-free photocatalyst for overall water splitting, *Journal of Materials Chemistry C*, 2020, vol. 8, issue 34, pp. 11980-11987. DOI: 10.1039/D0TC01206H.
26. Ying Y., Fan K., Luo X., Huang H. Predicting two-dimensional pentagonal transition metal monophosphides for efficient electrocatalytic nitrogen reduction, *Journal of Materials Chemistry A*, 2019, vol. 7, issue 18, pp. 11444-11451. DOI: 10.1039/C8TA11605A.

Original paper

STRENGTH AND FUNCTIONAL CHARACTERISTICS OF HEXA AND PENTAGONAL 2D MATERIALS. HYDROGEN

E.D. Kurbanova, V.A. Polukhin

Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the RAS, Yekaterinburg, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.458

Abstract: An analysis of synthesized unique two-dimensional 2D materials with nanolayer hexagonal and pentagonal structures (based on carbon, silicon, tin, binary compounds CN₂, BN₂, PdSe₂ and ternary compounds – BCN, CNP, PdSSe, Zn₂C₂P₂) was carried out. The synthesis of these materials was performed by the chemical vapor deposition or metal epitaxy on pre-prepared substrates. The strength and functional characteristics (electronic, optical) of the created models were also analyzed using the DFT theory in the form of triple monolayers with double-sided deposition of hydrogen on the surface of the p-Si₂C₄ monolayer: hydrogen/p-Si₂C₄/hydrogen. It was found that the p-Si₂C₄-4H layer with its two-sided hydrogen adsorption and good properties was the most dynamically stable. This article also presents relatively recently obtained hexa- and pentagonal two-dimensional materials not only for the elements C, Si, Ge, B, but also for Cu_{1-x}Ni_x, Ti_{1-x}Ni_x alloys and Bi_{1-x}Sb_x, CN₂, BN₂, PdSe₂, etc. compounds. So, with the new unique materials created – the synthesis of superstrong, thermostable nanocomposites, superconducting layered composites (based on Bi, Hg and Sb),

prospects are opening up for the development of nanoelectronics, spintronics, computer technology, as well as the creation of portable strain gauges, pressure sensors, gas sensors and dialysis catalysts for water dialysis with the release of hydrogen and oxygen.

Keywords: hexagonal and pentagonal structures of 2D materials, material modeling, mechanical properties, catalytic properties.

Курбанова Эльмира Джумиудовна – к.х.н., научный сотрудник ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»

Полухин Валерий Анатольевич – д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»

Elmira D. Kurbanova – Ph.D., Researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Science

Valery A. Polukhin – Dr. Sc., Chief Researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Science

Поступила в редакцию/received: 19.08.2022; после рецензирования/revise: 25.09.2022; принята/accepted 27.09.2022.