

ГЕКСАГОНАЛЬНЫЙ БОРОФЕН, СТАБИЛИЗИРОВАННЫЙ СМЕШАННЫМ ДОПИРОВАНИЕМ: СТРУКТУРА, УСТОЙЧИВОСТЬ, ЭЛЕКТРОННЫЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

© 2025 г. Д. В. Стегленко^{a,*}, Т. Н. Грибанова^a, Р. М. Миняев^a

^aЮжный федеральный университет, Институт физической и органической химии,
пр-т Стачки, 194/2, Ростов-на-Дону, 344090 Россия

*e-mail: dvsteglenko@srfedu.ru

Поступила в редакцию 08.07.2024 г.

После доработки 09.09.2024 г.

Принята к публикации 11.09.2024 г.

С помощью DFT-расчетов показана возможность стабилизации гексагональной сотовой формы борофена посредством смешанного допирования в системе $B_6Ga_2Mg_4$, где плоский лист борофена размещен между двумя слоями, сформированными атомами магния и галлия. $B_6Ga_2Mg_4$ представляет собой относительно мягкий материал с металлической проводимостью. Оценка термодинамической устойчивости этого соединения показала, что плавление будет происходить при температуре выше 1200 К.

Ключевые слова: двумерные материалы, DFT-расчеты, зонная структура, механические свойства, термическая стабильность

DOI: 10.31857/S0044457X25010082, **EDN:** CVNOSN

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время двумерные (2D) материалы привлекают большое внимание в связи с их необычными физическими и химическими свойствами [1, 2]. Благодаря пониженной размерности и возможности дополнительной функционализации они приобретают такие улучшенные свойства, как снижение склонности к коагуляции, химическую устойчивость, технологичность [3], и могут найти применение в качестве электронных или оптоэлектронных устройств [4–7], в спинтронике [8, 9], а также в элементах солнечных батарей, катализаторах, аккумуляторах электрической энергии и сенсорных устройствах [3, 10, 11]. Особый интерес вызывают построенные из атомов бора двумерные системы, имеющие сотовую структуру [12–15], поскольку предполагается, что именно борная гексагональная подрешетка ответственна за сверхпроводимость в MgB_2 [16–18]. Однако из-за отсутствия электронов на p_z -орбиталях двумерный лист бора с сотовой структурой демонстрирует решеточную нестабильность, поэтому вопрос стабилизации гексагональной борной структуры имеет первостепенное значение.

Эффективным способом стабилизации нестандартных борных форм, таких как фуллерены, протяженные борные цепочки и др., является допирование, которое может осуществляться

с использованием атомов как металлов, так и неметаллов [19–23]. Стабилизировать двумерную борную решетку с сотовой структурой можно посредством донирования электронной плотности на p_z -орбитали путем ее допирования атомами щелочных и щелочноземельных металлов [24] или самодопирования [25]. Как показали исследования, полиморфные модификации двумерных борных листов, возникающие в случае самодопирования, могут обладать сверхпроводящими свойствами с температурой $T_c \sim 10\text{--}20\text{ К}$ [26]. Модификации донорной системы позволяют регулировать свойства и устойчивость борофеновых производных, а исследование способов стабилизации двумерных борных листов с гексагональной решеткой открывает новые возможности для получения материалов с технологически полезными свойствами. Ранее [27] нами был предложен способ стабилизации гексагональной борной решетки путем двухстороннего допирования, где в качестве донора электронов рассматривался натрий. В настоящей работе представлено теоретическое исследование трехслойной системы $B_6Ga_2Mg_4$ (рис. 1), в которой стабилизация плоского борофенового листа обеспечивается двухсторонним допированием в результате его расположения между двумя слоями смешанного состава, сформированными атомами Ga и Mg.

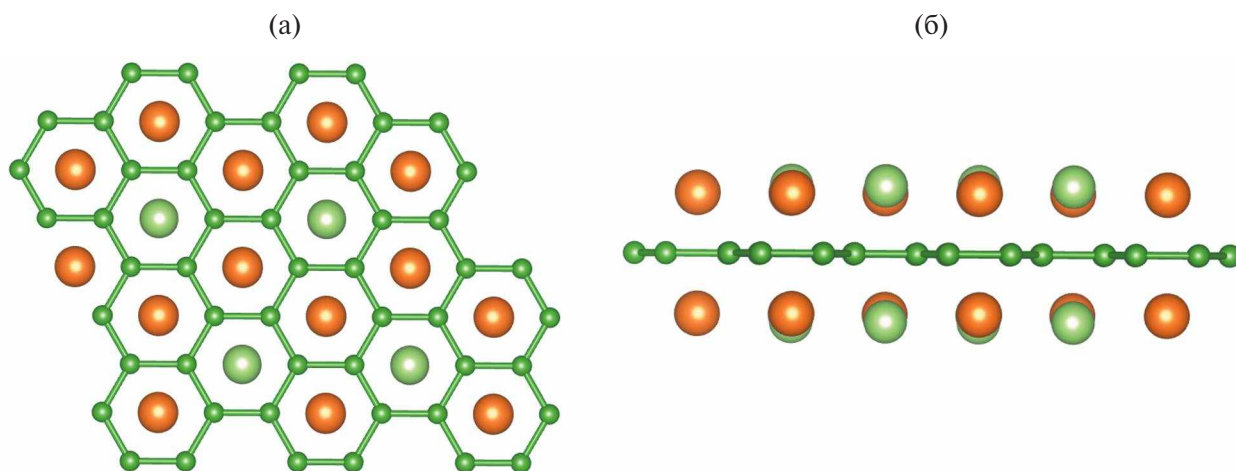


Рис. 1. Строение двумерной системы $B_6Ga_2Mg_4$. Атомы бора, формирующие сотовую структуру, изображены зеленым цветом, атомы магния и галлия, находящиеся в апикальном положении, — оранжевым и светло-зеленым цветом соответственно: а — вид сверху, б — вид сбоку.

Таблица 1. Рассчитанные параметры решетки Браве, координаты атомов и позиции Вайкоффа для $B_6Ga_2Mg_4$

Вектора трансляции, Å					
$\bar{a} = 5.2839$			$\bar{c} = 13.3784$		
атом	позиции Вайкоффа	координаты атомов			
		x	y	z	
Ga	$2e$	0.00000	0.00000	0.64319	
Mg	$4h$	0.33333	0.66666	0.62737	
B	$6k$	0.33201	0.00000	0.50000	

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Расчеты в приближении двумерного бесконечного кристалла были выполнены с помощью программного пакета VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [28–31] с использованием функционала PBE [32] и псевдопотенциалов PAW (версия GW) [33, 34]. Во всех расчетах энергия плоских волн составляла 550 эВ, порог минимизации волновой функции был установлен на уровне 1×10^{-8} эВ, а остаточные градиенты на атомах были меньше 1×10^{-4} эВ/Å. Дискретизацию зоны Бриллюэна проводили по методу Монкхорста–Пэка [35] с автоматически генерируемой сеткой плотностью $15 \times 15 \times 1$. Фононный спектр рассчитывали с помощью программы Phonopy [36] для суперъячейки размером $6 \times 6 \times 1$. При расчетах зонной структуры дискретизация зоны Бриллюэна была увеличена до $31 \times 31 \times 1$. Для снижения влияния соседних слоев друг на друга было установлено межслойное расстояние > 13 Å. Для оценки термической стабильности $B_6Ga_2Mg_4$ были выполнены расчеты методом молекулярной динамики (МД) в приближении канонического (NVT) ансамбля при температурах 1000, 1200 и 1300 К. Для этого

использовали суперъячейку размером $4 \times 4 \times 1$, а дискретизация зоны Бриллюэна устанавливалась как $1 \times 1 \times 1$. Во всех расчетах методом МД энергия плоских волн составляла 550 эВ. Температурный контроль осуществляли по схеме термостата Nosé [37]. Для визуализации исследуемых систем использовали программу Vesta [38]. Пространственную группу симметрии определяли с помощью программного пакета ISOTROPY (FINDSYM) [39].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Как показывают результаты расчетов, оптимизированная кристаллическая структура имеет гексагональную сингонию и относится к пр. гр. $R\bar{6}/mmm$ (191). В табл. 1 приведены длины соответствующих векторов решетки Браве, координаты атомов в элементарной ячейке и позиции Вайкоффа для атомов галлия, магния и бора. На рис. 2 показано пространственное строение $B_6Ga_2Mg_4$.

Базис решетки Браве составляют шесть атомов бора, два атома галлия и четыре атома магния со стехиометрическим соотношением 1 : 2 : 3 (Ga : Mg : B). Атомы бора формируют идеально

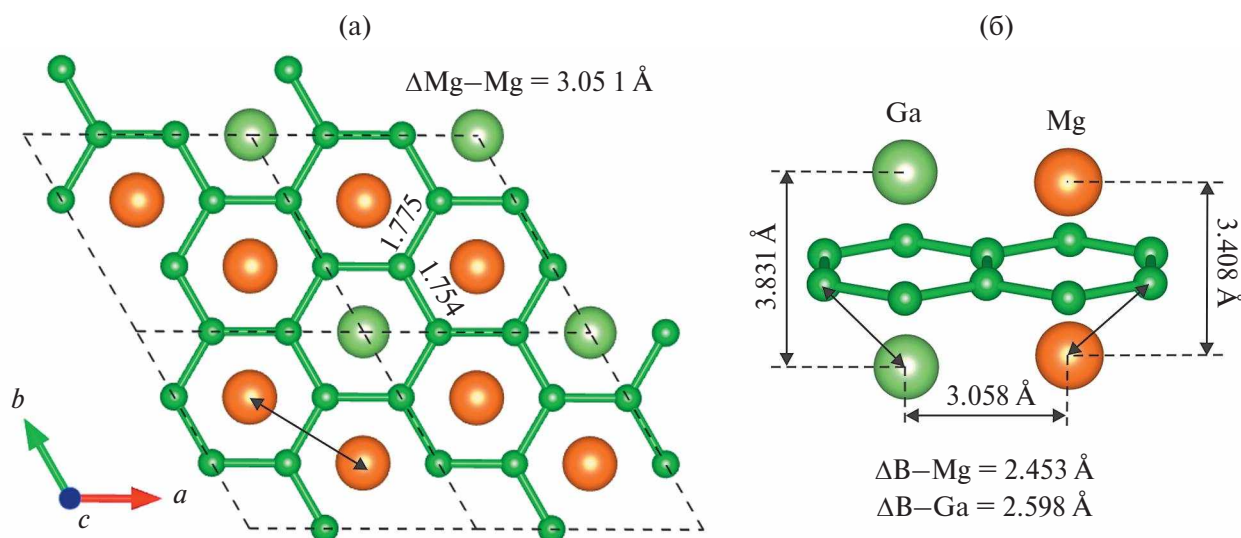


Рис. 2. Вид сверху и строение элементарной ячейки двумерной системы $B_6Ga_2Mg_4$ (а), вид сбоку фрагмента поверхности (б).

плоскую гексагональную решетку, находящуюся между двумя гетероатомными слоями, в которых атомы галлия и магния расположены апиально с двух сторон относительно центров борных шестиугольников. Рассчитанные расстояния B—Ga и B—Mg составляют 2.598 и 2.453 Å. Борная решетка имеет два типа связей: длина связи между атомами бора, формирующими цикл, над которым расположен атом галлия, составляет 1.754 Å, а длины связей B—B, соединяющих борные циклы с апиальными атомами галлия, равны 1.775 Å (рис. 2). Такие экзоциклические связи B—B незначительно (0.025 Å) превышают сумму ковалентных радиусов атомов бора, а эндоциклические — фактически равны длине одинарной связи B—B (1.75 Å [40]). В то же время расстояния B—Ga и B—Mg превышают соответственно сумму ковалентных радиусов B—Ga на 0.468 Å ($d_{cov} = 2.130$ Å) B—Mg на 0.213 Å ($d_{cov} = 2.224$ Å). При этом расстояния между соседними атомами магния равны 3.051 Å, что превышает сумму ковалентных радиусов ($d_{cov} = 2.720$ Å) на 0.331 Å. Расстояние Ga—Mg практически равно расстоянию Mg—Mg и составляет величину 3.058 Å, которая превышает сумму ковалентных радиусов ($d_{cov} = 2.61$ Å) на 0.448 Å.

Для оценки динамической устойчивости двумерной борографеновой системы нами был рассчитан фононный спектр (рис. 3). Результаты расчетов показывают, что в фононном спектре отсутствуют дисперсионные кривые, лежащие в мнимой области, т.е. рассматриваемая структура является динамически устойчивой. На фононном спектре можно отметить отсутствие энергетической щели между акустическими и оптическими ветвями.

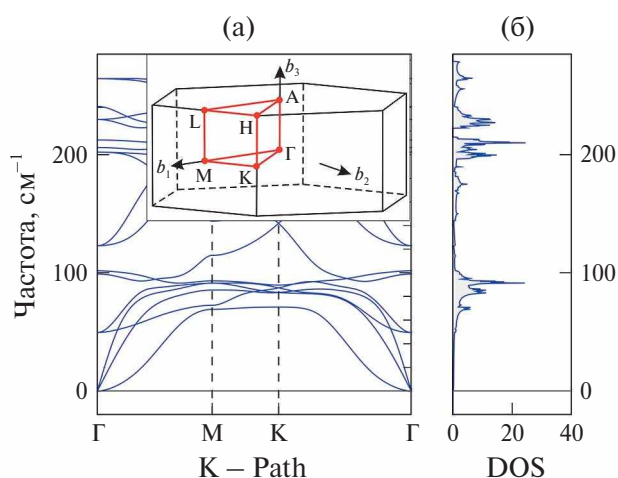


Рис. 3. Рассчитанные дисперсионные кривые фононного спектра вдоль пути Γ —M—K— Γ (а) и плотность фононных состояний (б) для $B_6Ga_2Mg_4$.

Расчеты электронной зонной структуры $B_6Ga_2Mg_4$ вдоль высокосимметричных направлений зоны Бриллюэна показывают, что такое соединение должно обладать металлическими свойствами (рис. 4). Так, здесь отсутствует запрещенная зона, а зона проводимости и валентная зона пересекают уровень Ферми ($E = 0$). Таким образом, аналогично двумерному натрий-допированному борофену [27] $B_6Ga_2Mg_4$ также будет металлом. На рис. 5–7 представлены частичные плотности электронных состояний, сформированные атомами бора, галлия и магния.

Как видно из рис. 5, в $B_6Ga_2Mg_4$ зона, расположенная ниже уровня Ферми, сформирована главным образом p -орбиталями атомов бора. В меньшей степени здесь представлены p -орбитали

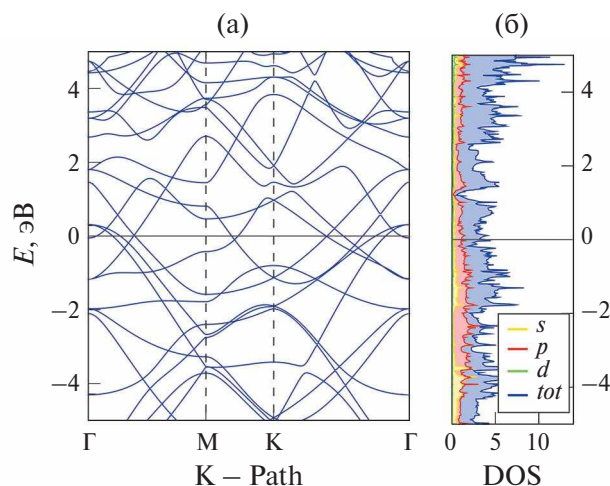


Рис. 4. Электронная зонная структура $B_6Ga_2Mg_4$ вдоль пути Γ –M–K– Γ (а) и плотность электронных состояний (б).

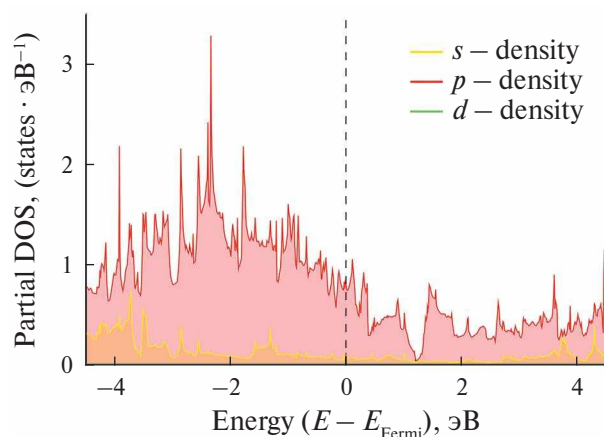


Рис. 5. Частичная плотность электронных состояний, образованная атомами бора. Вертикальной пунктирной линией отмечен уровень Ферми.

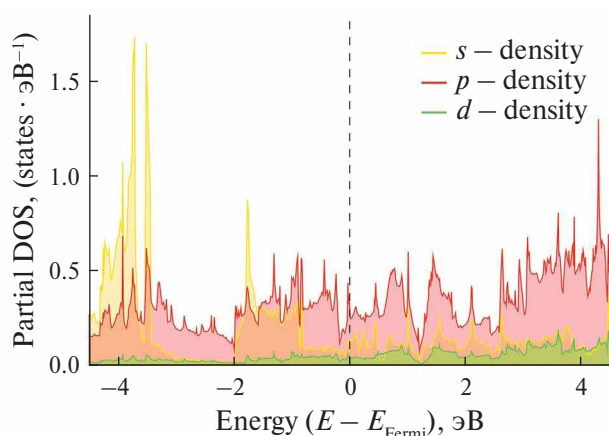


Рис. 6. Частичная плотность электронных состояний, образованных атомами галлия. Вертикальной пунктирной линией отмечен уровень Ферми.

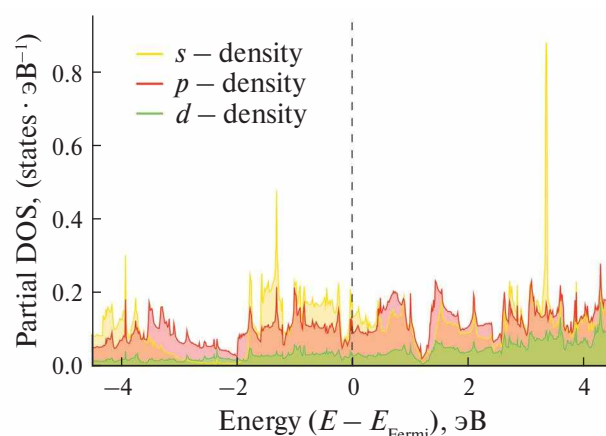


Рис. 7. Частичная плотность электронных состояний, образованных атомами магния. Вертикальной пунктирной линией отмечен уровень Ферми.

атомов галлия (рис. 6). В то же время основной вклад от атомов магния в формирование зоны, лежащей выше уровня Ферми, приходится на s -орбитали, а вклад p -орбиталей совсем незначителен (рис. 7).

Зона проводимости сформирована в основном p -орбиталями атомов бора и галлия, и вклады p -орбиталей этих атомов сопоставимы (рис. 5 и 6). В меньшей степени в формировании зоны проводимости участвуют s - и p -орбитали атомов магния.

С помощью DFT-расчетов нами был определен критерий механической устойчивости двумерного $B_6Ga_2Mg_4$, а также модуль Юнга и коэффициент Пуассона, которые характеризуют меру жесткости и поперечной деформации при сжатии или растяжении твердого

тела. В случае гексагональных систем необходимый и достаточный критерий механической устойчивости определяется следующим образом [41]: $c_{11} > |c_{12}|$, $2c_{13}^2 < c_{33}(c_{11} + c_{12})$, $c_{44} > 0$. В двумерном случае приведенные выше неравенства для компонент тензора упругости принимают вид: $c_{11} > |c_{12}|$, $c_{66} > 0$. Рассчитанные значения упругих постоянных представлены в табл. 2. Для поперечно-изотропного материала модуль Юнга можно рассчитать по формуле: $Y_x = (c_{11} - c_{12}) \cdot ((c_{22} + c_{21}) \cdot c_{33} - 2c_{13}^2) / (c_{22} \cdot c_{33} - c_{13}^2)$ [42]. В случае двумерного поперечно-изотропного материала получаем: $Y_{2D} = c_{11}^2 - c_{12}^2 / c_{11}$. Аналогичным образом коэффициент Пуассона определяется как $\nu = c_{12}/c_{11}$ [43, 44].

Из данных, представленных в табл. 2, видно, что рассчитанный модуль Юнга (Y_{2D}) для $B_6Ga_2Mg_4$

Таблица 2. Рассчитанные значения констант эластичности (c_{ij} , Н/м), модуль Юнга (Y_{2D} , в Н/м) и коэффициент Пуассона ν

Соединение	c_{11}	c_{12}	c_{66}	Y_{2D}	ν
Графен	358.0 ^[45]	55.0 ^[45]	152.0 ^[45]	340.0 \pm 50 ^[46, 47]	
2D- <i>hex</i> -BN	293.2 ^[48]	66.1 ^[48]	113.6 ^[48]	289 \pm 24 ^[49]	0.218 ^[48]
2D-MoS ₂	140.0 ^[50]	40.0 ^[50]	50.0 ^[50]	130 ^[50, 51]	0.290 ^[50]
2D-B ₄ P ₂	142.5 ^[52]	2.5 ^[52]	13.6 ^[52]	142.5 ^[52]	0.017 ^[52]
2D-B ₆ Ga ₂ Mg ₄	145.8	30.2	57.79	139.6	0.206
2D-B ₄ As ₂	130.4 ^[53]	1.9 ^[53]	13.2 ^[53]	130.4 ^[53]	0.015 ^[53]
2D-B ₂ Na ₂	107.1 ^[27]	8.36 ^[27]	49.35 ^[27]	106.4 ^[27]	0.078 ^[27]
Силицен	71.3 ^[54]	23.2 ^[54]	24.1 ^[54]	62 ^[55]	0.325 ^[54]

Таблица 3. Рассчитанные значения энергии (в эВ) атомов бора, галлия, магния и двумерного B₆Ga₂Mg₄. Энергия образования E_f в пересчете на формульную единицу (эВ), E_p в пересчете на атом (эВ/атом)

Соединение	B	Ga	Mg	B ₆ Ga ₂ Mg ₄	E_f , эВ	E_p , эВ/атом
Энергия, эВ	-0.337	-0.277	-0.001	-50.148	-47.57	-3.96

составляет 139.6 Н/м, что значительно ниже, чем для графена (340 \pm 50 Н/м) [46, 47] и двумерного нитрида бора *hex*-BN (289 \pm 24 Н/м) [49], однако сопоставимо с двумерным MoS₂ (180 \pm 60, 130 Н/м) [50, 51] и незначительно выше, чем у допированного натрием борофена B₂Na₂ [27] или монослоя силицена (62 Н/м) [52, 55]. По своим механическим свойствам B₆Ga₂Mg₄ схож с двумерными B₄P₂ и B₄As₂, для которых Y_{2D} = 42.5 и 130.4 Н/м соответственно [53]. Таким образом, теоретически предсказанный B₆Ga₂Mg₄ — относительно мягкий материал. Низкое значение коэффициента Пуассона указывает на то, что при одноосном растяжении или сжатии поперечная деформация монослоя B₆Ga₂Mg₄ будет сопоставимой с двумерным *hex*-BN.

В табл. 3 приведены рассчитанные значения энергии атомов бора, галлия, магния и двумерного B₆Ga₂Mg₄. Для изолированных атомов спин-поляризованные DFT-расчеты проводили методом нарушенной симметрии.

Энергию образования рассчитывали по формуле:

$$E_f = \frac{E_{B_6Ga_2Mg_4} - (6E_B + 2E_{Ga} + 4E_{Mg})}{n},$$

где $n = 1$ в случае E_f и $n = 12$ в случае E_p .

Как следует из табл. 3, предсказанный двумерный B₆Ga₂Mg₄ должен представлять собой относительно стабильное соединение, термодинамическая стабильность которого выше, чем двумерного борофена, допированного натрием (3.54 эВ/атом) [27].

Для оценки термической стабильности было выполнено квантово-химическое моделирова-

ние процесса плавления листа B₆Ga₂Mg₄ методом МД. Во всех расчетах методом МД шаг интегрирования составлял 3 фс, а полная траектория в фазовом пространстве — 10.5 пс (3500 шагов). Для моделирования процесса плавления использовали суперъячейку размером 4 \times 4 \times 1, содержащую 192 атома. Серия расчетов, проведенных при различных температурах, показала, что лист B₆Ga₂Mg₄ сохраняет свою стабильность при 1200 К (рис. 8).

Для отслеживания процесса плавления была использована парная корреляционная функция, отражающая степень дальнего порядка в веществе [56]. При фазовом переходе твердое тело—жидкость пики, отвечающие наличию дальнего порядка, исчезают, что указывает на плавление [57], происходящее в двумерном листе B₆Ga₂Mg₄ при 1300 К (рис. 8). Уширение и уменьшение пиков обусловлено ростом амплитуды тепловых колебаний, которые искажают структуру (рис. 8в), однако плавление не происходит (по крайней мере, при 1200 К).

Из графика парной корреляционной функции (рис. 8а) можно сделать вывод, что начало плавления наступает при температуре \sim 1300 К. На это указывают уширение и уменьшение пиков, что говорит о резком уменьшении дальнего порядка в твердом теле. Это также заметно и по значительному искажению структуры двумерного B₆Ga₂Mg₄ (рис. 8г). При этом МД-моделирование при температурах 1000 и 1200 К в течение 10.5 пс показало, что несмотря на значительные искажения общая структура двумерного листа B₆Ga₂Mg₄ сохраняется (рис. 8б, 8в). Отсюда можно сделать вывод, что термическая устойчивость B₆Ga₂Mg₄ должна сохраняться до температуры

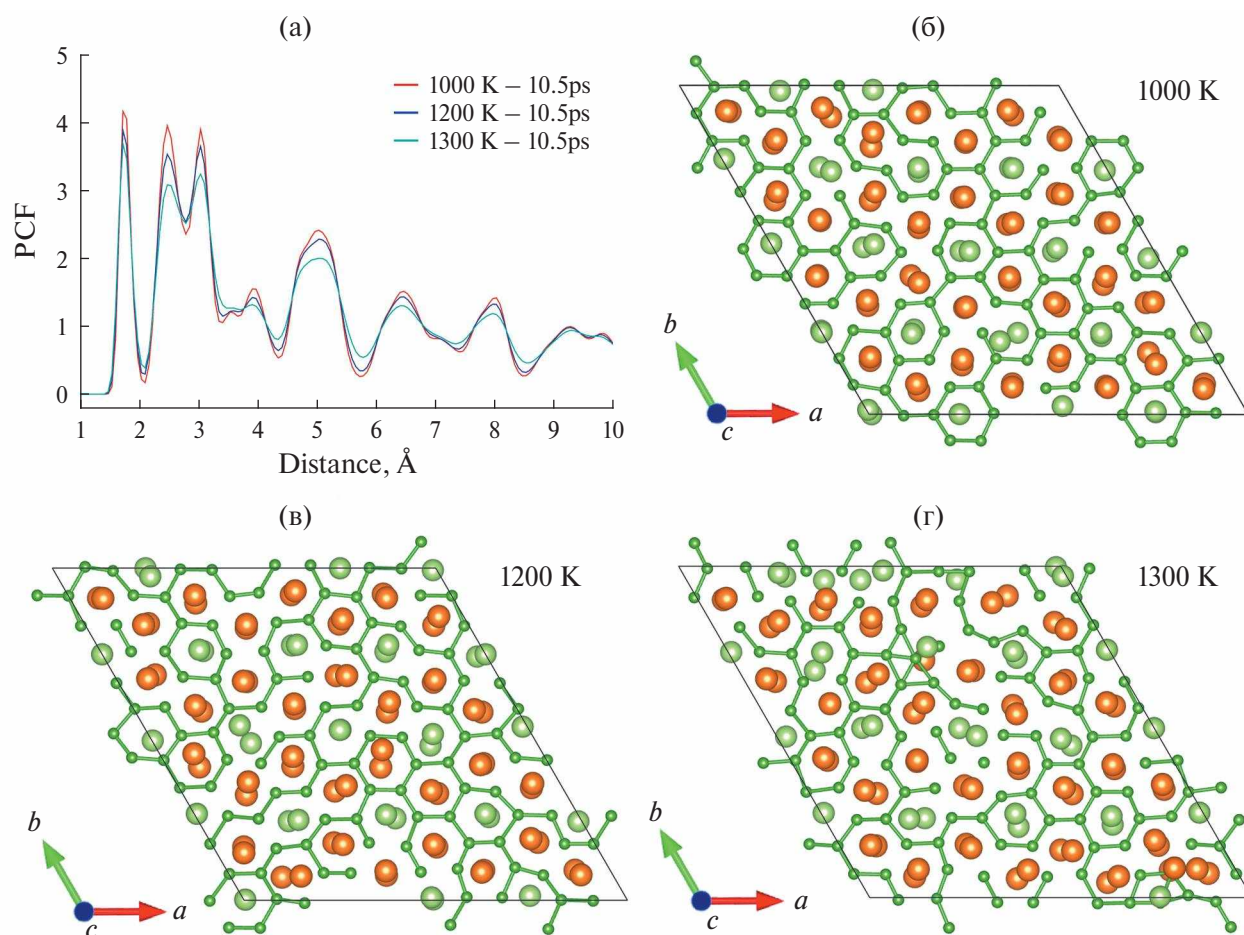


Рис. 8. Парная корреляционная функция (PCF), рассчитанная для двумерного $B_6Ga_2Mg_4$ при различных температурах (а); фрагмент поверхности размером $4 \times 4 \times 1$ при 1000 (б), 1200 (в) и 1300 К (г).

~1200 К. Таким образом, $B_6Ga_2Mg_4$ является термически более устойчивым по сравнению с ранее изученным Na-допированным борофеном [27], который стабилен при температурах <200 К.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью квантово-химического моделирования методом DFT было изучено пространственное и электронное строение, проведена оценка динамической и термической стабильности, критерия механической устойчивости, рассчитаны модуль Юнга и коэффициент Пуассона для двумерного борного листа с сотовой структурой, допированного атомами магния и галлия. Полученные результаты показывают, что система $B_6Ga_2Mg_4$ является устойчивой, обладает металлическими свойствами и высокой термической стабильностью. Результаты анализа механических свойств показывают, что такое соединение должно быть относительно мягким

и походить на двумерный MoS_2 . Таким образом, смешанное допирование является эффективным способом стабилизации гексагональной структуры борофена, позволяющим направленно регулировать его устойчивость и свойства.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках ПЧ ГЗ “Теоретический дизайн, синтез и исследование новых полифункциональных органических, металлокомплексных, двух и трехмерных элементоорганических и неорганических структур и материалов для молекулярной электроники, спинтроники и медицинских целей” (FENW-2023-0017).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V. et al. // Science. 2004. V. 306. № 5696. P. 666. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>*

2. *Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R. et al.* // *Rev. Mod. Phys.* 2009. V. 81. № 1. P. 109.
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
3. *Yang X., Xu M., Qiu W. et al.* // *J. Mater. Chem.* 2011. V. 21. № 22. P. 8096.
<https://doi.org/10.1039/c1jm10697j>
4. *Wang Q.H., Kalantar-Zadeh K., Kis A. et al.* // *Nat. Nanotechnol.* 2012. V. 7. № 11. P. 699.
<https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193>
5. *Radisavljevic B., Radenovic A., Brivio J. et al.* // *Nat. Nanotechnol.* 2011. V. 6. № 3. P. 147.
<https://doi.org/10.1038/nnano.2010.279>
6. *Chen Y.L., Analytis J.G., Chu J.-H. et al.* // *Science.* 2009. V. 325. № 5937. P. 178.
<https://doi.org/10.1126/science.1173034>
7. *Jariwala D., Sangwan V.K., Lauhon L.J. et al.* // *ACS Nano.* 2014. V. 8. № 2. P. 1102.
<https://doi.org/10.1021/nn500064s>
8. *Miao N., Xu B., Bristowe N.C. et al.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2017. V. 139. № 32. P. 11125.
<https://doi.org/10.1021/jacs.7b05133>
9. *Kumar H., Frey N.C., Dong L. et al.* // *ACS Nano.* 2017. V. 11. № 8. P. 7648.
<https://doi.org/10.1021/acsnano.7b02578>
10. *Tan C., Cao X., Wu X.-J. et al.* // *Chem. Rev.* 2017. V. 117. № 9. P. 6225.
<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00558>
11. *Xu M., Liang T., Shi M. et al.* // *Chem. Rev.* 2013. V. 113. № 5. P. 3766.
<https://doi.org/10.1021/cr300263a>
12. *Gribanova T.N., Minyaev R.M., Minkin V.I. et al.* // *Struct. Chem.* 2020. V. 31. № 6. P. 2105.
<https://doi.org/10.1007/s11224-020-01606-9>
13. *Kaneti Y.V., Benu D.P., Xu X. et al.* // *Chem. Rev.* 2022. V. 122. № 1. P. 1000.
<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00233>
14. *Yadav S., Sadique M.A., Kaushik A. et al.* // *J. Mater. Chem. B.* 2022. V. 10. № 8. P. 1146.
<https://doi.org/10.1039/d1tb02277f>
15. *Wang Z.-Q., Lü T.-Y., Wang H.-Q. et al.* // *Front. Phys.* 2019. V. 14. № 3. P. 33403.
<https://doi.org/10.1007/s11467-019-0884-5>
16. *An J.M., Pickett W.E.* // *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 86. № 19. P. 4366.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.4366>
17. *Kortus J., Mazin I.I., Belashchenko K.D. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 86. № 20. P. 4656.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.4656>
18. *Choi H.J., Roundy D., Sun H. et al.* // *Nature.* 2002. V. 418. № 6899. P. 758.
<https://doi.org/10.1038/nature00898>
19. *Gribanova T.N., Minyaev R.M., Minkin V.I.* // *Chem. Phys.* 2019. V. 522. P. 44.
<https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2019.02.008>
20. *Gribanova T.N., Minyaev R.M., Minkin V.I.* // *Struct. Chem.* 2018. V. 29. № 1. P. 327.
<https://doi.org/10.1007/s11224-017-1031-y>
21. *Gribanova T.N., Minyaev R.M., Minkin V.I.* // *Struct. Chem.* 2017. V. 28. № 2. P. 357.
<https://doi.org/10.1007/s11224-016-0886-7>
22. *Gribanova T.N., Minyaev R.M., Minkin V.I.* // *Mendeleev Commun.* 2016. V. 26. № 6. P. 485.
<https://doi.org/10.1016/j.mencom.2016.11.008>
23. *Steglenko D.V., Gribanova T.N., Minyaev R.M.* // *J. Phys. Chem. C.* 2023. V. 127. № 31. P. 15533.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c02427>
24. *John D., Nharangatt B., Chatanathod R.* // *J. Mater. Chem. C.* 2019. V. 7. № 37. P. 11493.
<https://doi.org/10.1039/c9tc03628h>
25. *Tang H., Ismail-Beigi S.* // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 80. № 13. P. 134113.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.134113>
26. *Penev E.S., Kutana A., Yakobson B.I.* // *Nano Lett.* 2016. V. 16. № 4. P. 2522.
<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b00070>
27. *Steglenko D.V., Gribanova T.N., Minyaev R.M. et al.* // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2023. V. 68. P. 60.
<https://doi.org/10.1134/s0036023622601477>
28. *Kresse G., Hafner J.* // *Phys. Rev. B.* 1993. V. 47. № 1. P. 558.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.558>
29. *Kresse G., Hafner J.* // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 49. № 20. P. 14251.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.14251>
30. *Kresse G., Furthmüller J.* // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. № 16. P. 11169.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
31. *Kresse G., Furthmüller J.* // *Comput. Mater. Sci.* 1996. V. 6. № 1. P. 15.
[https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
32. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. № 18. P. 3865.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
33. *Blöchl P.E.* // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 50. № 24. P. 17953.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>
34. *Kresse G., Joubert D.* // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 59. № 3. P. 1758.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
35. *Monkhorst H.J., Pack J.D.* // *Phys. Rev. B.* 1976. V. 13. № 12. P. 5188.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
36. *Togo A., Tanaka I.* // *Scripta Mater.* 2015. V. 108. P. 1.
<https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2015.07.021>
37. *Nosé S.* // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. № 1. P. 511.
<https://doi.org/10.1063/1.447334>
38. *Koichi M., Fujio I.* // *J. Appl. Crystallogr.* 2011. V. 44. № 6. P. 1272.
<https://doi.org/10.1107/S0021889811038970>
39. *Stokes H.T., Hatch D.M.* // *J. Appl. Crystallogr.* 2005. V. 38. № 1. P. 237.
<https://doi.org/10.1107/S0021889804031528>
40. *Emsley J.* *The elements.* Oxford, 1991.
41. *Mouhat F., Coudert F.-X.* // *Phys. Rev. B.* 2014. V. 90. № 22. P. 224104.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.224104>

42. Lubarda V.A., Chen M.C. // J. Mech. Mater. Struct. 2008. V. 3. № 1. P. 153.
<https://doi.org/10.2140/jomms.2008.3.153>
43. Wei X., Fragneaud B., Marianetti C.A. et al. // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. № 20. P. 205407.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.205407>
44. Cadelano E., Palla P.L., Giordano S. et al. // Phys. Rev. B. 2010. V. 82. № 23. P. 235414.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.235414>
45. Klintonberg M., Lebègue S., Ortiz C. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. V. 21. № 33. P. 335502.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/33/335502>
46. Lee C., Wei X., Kysar J.W. et al. // Science. 2008. V. 321. № 5887. P. 385.
<https://doi.org/10.1126/science.1157996>
47. Kudin K.N., Scuseria G.E., Yakobson B.I. // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. № 23. P. 235406.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.235406>
48. Peng Q., Ji W., De S. // Comput. Mater. Sci. 2012. V. 56. P. 11.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.12.029>
49. Falin A., Cai Q., Santos E.J.G. et al. // Nat. Commun. 2017. V. 8. № 1. P. 15815.
<https://doi.org/10.1038/ncomms15815>
50. Cooper R.C., Lee C., Marianetti C.A. et al. // Phys. Rev. B. 2013. V. 87. № 3. P. 035423.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.035423>
51. Bertolazz S., Brivio J., Kis A. // ACS Nano. 2011. V. 5. № 12. P. 9703.
<https://doi.org/10.1021/nn203879f>
52. Steglenko D.V., Tkachenko N.V., Boldyrev A.I. et al. // J. Comput. Chem. 2020. V. 41. № 15. P. 1456.
<https://doi.org/10.1002/jcc.26189>
53. Fedik N., Steglenko D.V., Muñoz-Castro A. et al. // J. Phys. Chem. C. 2021. V. 125. № 31. P. 17280.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c02939>
54. Peng Q., Wen X., De S. // RSC Adv. 2013. V. 3. № 33. P. 13772.
<https://doi.org/10.1039/c3ra41347k>
55. Şahin H., Cahangirov S., Topsakal M. et al. // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. № 15. P. 155453.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.155453>
56. Ding J., Xu M., Guan P.F. et al. // J. Chem. Phys. 2014. V. 140. № 6. P. 064501.
<https://doi.org/10.1063/1.4864106>
57. Sun J., Liu P., Wang M. et al. // Sci. Rep. 2020. V. 10. № 1. P. 3408.
<https://doi.org/10.1038/s41598-020-60416-5>

HEXAGONAL BOROPHENE STABILIZED BY MIXED DOPING: STRUCTURE, STABILITY, ELECTRONIC AND MECHANICAL PROPERTIES

D. V. Steglenko^{a,*}, T. N. Griбанова^a, R. M. Minyaev^a

^a*Southern Federal University, Institute of Physical and Organic Chemistry, Rostov-on-Don, 344090 Russia*

**e-mail: dvsteglenko@sfsu.ru*

Using DFT calculations, the possibility of stabilizing the hexagonal honeycomb shape of borophene by mixed doping in the B₆Ga₂Mg₄ system was showed, where a flat sheet of borophene is placed between two layers formed by magnesium and gallium atoms. B₆Ga₂Mg₄ is a relatively soft material with metallic conductivity. Evaluation of the thermodynamic stability of this compound shows that melting will occur at temperatures above 1200 K.

Keywords: two-dimensional materials, DFT calculations, band structure, mechanical properties, thermal stability