

УДК 539.196.3
doi: 10.21685/2072-3040-2025-1-6

Нековалентное взаимодействие атомов бора и азота

А. А. Сокуров¹, С. Ш. Рехвиашвили²

^{1,2}Институт прикладной математики и автоматизации – филиал
Федерального государственного бюджетного научного учреждения
«Федеральный научный центр «Кабардино-Балкарский научный центр
Российской академии наук», Нальчик, Россия

¹isokuroff@mail.ru, ²rsergo@mail.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Расчет взаимодействия между атомами бора и азота интересен с точки зрения прогнозирования физических свойств и создания новых диэлектрических материалов и безуглеродных наноматериалов. Цель работы заключается в расчете нековалентного (дисперсионного) взаимодействия для пар атомов B–B, N–N и B–N из первых квантово-механических принципов. Данный расчет на практике проводится впервые. *Материалы и методы.* Используется теория функционала плотности в приближении электронного газа. При этом учитываются кулоновский, кинетический, обменный и корреляционный вклады в энергию взаимодействия. Электронная плотность задается с учетом оболочечной структуры атомов в приближении Рутаана – Хартри – Фока. Для вычисления несобственных интегралов используется оригинальный численный алгоритм, основанный на применении квадратурных формул и технологии распараллеливания вычислений CUDA. *Результаты.* В широком диапазоне межатомных расстояний построены функции радиальных электронных плотностей и соответствующие потенциальные кривые, рассчитаны параметры потенциальных ям и константы дисперсионного взаимодействия, проверена корректность эмпирических правил Лоренца – Бергло комбинирования параметров потенциалов. *Выводы.* Полученные значения констант дисперсионного взаимодействия для гомоатомных пар согласуются с известными из литературы результатами. С помощью первопринципных расчетов можно определять параметры модельных парных потенциалов, в частности потенциала Сазерленда. Показано, что для нековалентного взаимодействия атомов бора и азота правила Лоренца – Бергло не работают.

Ключевые слова: нековалентное взаимодействие, метод функционала электронной плотности, метод Хартри – Фока, приближение электронного газа, парный потенциал взаимодействия, параметры парных потенциалов

Для цитирования: Сокуров А. А., Рехвиашвили С. Ш. Нековалентное взаимодействие атомов бора и азота // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 1. С. 70–80. doi: 10.21685/2072-3040-2025-1-6

Non-covalent interaction of boron and nitrogen atoms

A.A. Sokurov¹, S.S. Rekhviashvili²

© Сокуров А. А., Рехвиашвили С. Ш., 2025. Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License / This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

^{1,2}Institute of Applied Mathematics and Automation –
branch of Federal Scientific Center “Kabardino-Balkarian Scientific
Center of the Russian Academy of Sciences”, Nalchik, Russia

¹isokuroff@mail.ru, ²rsergo@mail.ru

Abstract. *Background.* The calculation of the interaction between boron and nitrogen atoms is interesting from the point of view of predicting physical properties and creating new dielectric materials and carbon-free nanomaterials. The purpose of the work is to calculate non-covalent (dispersion) interaction for pairs of atoms B-B, N-N and B-N based on the first principles of quantum mechanics. The calculation is carried out in practice for the first time. *Materials and methods.* The article uses the density functional theory (DFT) in the electron gas approximation. The Coulomb, kinetic, exchange, and correlation contributions to the interaction energy are taken into account. The electron density is given taking into account the shell structure of atoms in the Roothaan-Hartree-Fock approximation. An original numerical algorithm based on the use of quadrature formulas and CUDA computing parallelization technology is used to calculate improper integrals. *Results.* Radial electron density functions and corresponding potential curves are constructed over a wide range of interatomic distances. The parameters of potential wells and the constants of the dispersion interaction are calculated. The correctness of the Lorentz-Berthelot rules of thumb for combining potential parameters has been verified. *Conclusions.* The obtained values of the dispersion interaction constants for homoatomic pairs are consistent with the results known from the literature. Using first-principles calculations, it is possible to determine the parameters of model pair potentials, in particular the Sutherland potential. It is shown that the Lorentz-Berthelot rules do not work for the non-covalent interaction of boron and nitrogen atoms.

Keywords: non-covalent interaction, electron density functional method (DFT), Hartree-Fock method, electron gas approximation, pair interaction potential, parameters of pair potentials

For citation: Sokurov A.A., Rekhviashvili S.S. Non-covalent interaction of boron and nitrogen atoms. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2025;(1):70–80. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-1-6

Введение

Интерес к атомам бора и азота и взаимодействию между ними обусловлен, в частности, таким перспективным материалом, как нитрид бора (BN). Главным образом это касается гексагонального нитрида бора (hBN) [1–4]. Гексагональный нитрид бора представляет собой слоистый неорганический синтетический кристалл, обладающий чрезвычайно высокими твердостью, удельным электрическим сопротивлением, теплопроводностью и термической прочностью. В качестве керамического материала он используется для регулирования температуры, теплозащиты, смазки, а также в качестве наполнителя для конструкционных композитов [1, 2]. Кроме того, hBN обладает уникальными оптическими свойствами, которые проявляются в ультрафиолетовом и инфракрасном диапазонах. Благодаря этому материал находит применение в фотонике [3]. В CMOS-технологии производства интегральных микросхем hBN может применяться в качестве двумерного изолятора в подзатворной области транзисторов [4].

Различные вопросы, относящиеся к валентному взаимодействию атомов бора и азота, а также к взаимодействию Ван-дер-Ваальса нитрида бора в конденсированном состоянии, рассматривались во многих работах, среди которых можно отметить [5–13]. Однако расчеты из первых принципов в единых теоретических рамках дисперсионного взаимодействия Ван-дер-

Ваальса для атомных пар В–В, N–N и В–N до сих пор не проводились. Между тем взаимодействие данного типа играет весьма важную роль, поскольку предшествует ковалентному связыванию атомов, например в газовой фазе. Кроме того, нековалентные взаимодействия играют ключевую роль в формировании супрамолекулярных структур, которые широко распространены в химии, биологии и нанотехнологиях. Они характеризуются низкими значениями энергии и короткими временами образования ассоциатов, что позволяет эффективно управлять их структурными и физическими свойствами. Супрамолекулярная химия структур со связями В–N рассмотрена, например, в [14, 15].

В настоящей статье решаются следующие основные задачи:

1) расчет зависимости потенциала взаимодействия от расстояния для пар атомов В–В, N–N и В–N;

2) вычисление параметров потенциальной ямы (глубина D и равновесное расстояние r_0);

3) проверка эмпирических правил комбинирования параметров парного межатомного потенциала Лоренца – Бергло для атомной пары В–N;

4) расчет констант дисперсионного взаимодействия.

В расчетах применяется метод функционала электронной плотности и приближение электронного газа. Электронные плотности рассчитываются с помощью слейтеровских орбиталей в приближении Рутаана – Хартри – Фока с учетом оболочечной структуры взаимодействующих атомов. Все формулы в статье записаны в атомной системе единиц ($\hbar = e = m_e = 1$). Графики потенциалов и соответствующие данные в таблице приведены в привычных единицах.

1. Потенциал взаимодействия

Приближение Гордона – Кима [16, 17] используется в качестве теоретической модели для нековалентного взаимодействия двух атомов. Предполагается, что результирующая электронная плотность равна сумме плотностей отдельных атомов. Кулоновская составляющая потенциала взаимодействия учитывает отталкивание между ядрами, отталкивание между электронными облаками и притяжение между ядрами и электронными облаками атомов. Все вклады объединяются в одно выражение:

$$U_1(r) = 16\pi^2 \int_0^\infty \int_0^\infty \rho_a(x) \rho_b(y) I(r, x, y) x^2 y^2 dx dy, \quad (1)$$

$$I(r, x, y) = \frac{1}{r} + F(r, x, y) - \frac{2}{r+x+|r-x|} - \frac{2}{r+y+|r-y|}, \quad (2)$$

$$F(r, x, y) = \begin{cases} \frac{2}{r+x+|r-x|}, & y < |r-x|, \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{y} \right) - \frac{r}{4xy} - \frac{(x-y)^2}{4rxy}, & |r-x| < y < |r+x|, \\ \frac{1}{y}, & y > r+x, \end{cases} \quad (3)$$

где r – расстояние между атомами; $\rho_{a,b}$ – электронные плотности атомов, индексы a и b обозначают взаимодействующие атомы.

Квантово-статистическая составляющая, относящаяся к электронному газу, вычисляется с помощью интеграла:

$$U_2(r) = \frac{\pi r^3}{4} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 [(\rho_a + \rho_b)E(\rho_a + \rho_b) - \rho_a E(\rho_a) - \rho_b E(\rho_b)] d\mu d\lambda, \quad (4)$$

$$E(\rho) = \frac{3}{10} (3\pi^2 \rho)^{2/3} - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \rho \right)^{1/3} + E_c(\rho), \quad (5)$$

$$E_c(\rho) = \begin{cases} 2,711816\rho^{1/2} - 0,706052\rho^{1/3} - 3,819822\rho^{2/3} - 1,319676\rho^{5/6}, & \rho < \eta_1, \\ -0,7062 - 0,00633 \ln(\rho), & \eta_1 \leq \rho \leq \eta_2, \\ -0,010367 \ln(\rho) - (0,001861 \ln(\rho) + 0,008869)\rho^{-1/3} - 0,062849, & \rho > \eta_2, \end{cases}$$

$$\rho_a(r; \lambda, \mu) = \rho_a \left(\frac{r(\lambda + \mu)}{2} \right), \quad \rho_b(r; \lambda, \mu) = \rho_b \left(\frac{r(\lambda - \mu)}{2} \right),$$

где отдельные слагаемые в (5) отвечают кинетическому, обменному и корреляционному вкладам соответственно; $\eta_1 = 2,387324 \cdot 10^{-4}$ и $\eta_2 = 0,696013$ – параметры шивки в корреляционном вкладе. Двойной интеграл в (4) выражен через эллипсоидальные координаты (λ, μ) . При его вычислении с учетом (5) под ρ понимаются электронные плотности взаимодействующих атомов $\rho_{a,b}$ и их сумма $\rho_b + \rho_a$. Результирующая потенциальная энергия взаимодействия двух атомов есть

$$U(r) = U_1(r) + U_2(r). \quad (6)$$

В модели (1)–(6) требуется задать $\rho_{a,b}$. Кроме того, возникает потребность в эффективном алгоритме численной реализации модели, которая основывается на вычислении кратных интегралов в (1) и (4).

2. Электронная плотность

Для вычисления электронных плотностей можно воспользоваться хорошо проверенными численными данными из [18], которые получены в приближении Рутаана – Хартри – Фока с волновыми функциями Слейтера. Электронная плотность связана с многоэлектронной волновой функцией атома [19]:

$$\rho(\mathbf{r}) = Z \iint |\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})|^2 d\boldsymbol{\sigma} d\mathbf{x}, \quad (7)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ и \mathbf{x} – спиновые и пространственные переменные; Z – заряд ядра атома. В сферической системе координат (7) принимает вид

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi} \int \rho(\mathbf{r}) d\Omega, \quad (8)$$

где Ω – телесный угол. Для (7) выполняется условие нормировки

$$4\pi \int_0^{\infty} \rho(r) r^2 dr = Z. \quad (9)$$

Функции Слейтера представляют собой волновые функции водородо-подобного атома

$$\Psi_{n,l,m}(r, \Omega) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\Omega), \quad (10)$$

где использованы стандартные из атомной физики обозначения. Вследствие ортогональности сферических гармоник усредненную по сфере электронную плотность можно записать в виде

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n,l} N_{n,l} |R_{n,l}(r)|^2, \quad (11)$$

$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{(2\lambda_{n,l})!} (2\zeta_{n,l})^{\lambda_{n,l}+1/2} r^{\lambda_{n,l}-1} \exp(-\zeta_{n,l}r), \quad (12)$$

$$Z = \sum_{n,l} N_{n,l}, \quad (13)$$

где $\lambda_{n,l}$ и $\zeta_{n,l}$ – таблично заданные параметры [18]; $N_{n,l}$ – количество электронов в подоболочке, определяемое квантовыми числами n и l .

3. Численные расчеты и обсуждение

Для численных расчетов потенциала межатомного взаимодействия используется алгоритм, разработанный в [20]. Алгоритм включает в себя применение квадратурных формул, анализ подынтегральных функций электронных плотностей и процедуру распараллеливания вычислений на графических процессорах CUDA. Благодаря данному алгоритму расчет потенциала взаимодействия по модели (1)–(6) производится с точностью вплоть до шестого знака после запятой за непродолжительное машинное время.

Кривая $U(r)$ для каждой атомной пары строится от некоторого выбранного расстояния между атомами r_{\min} , определяемого величиной энергии отталкивания, и до $r_{\max} = 15$ а.е. Глубина потенциальной ямы D и равновесное расстояние между атомами r_0 находятся по табулированным данным путем их условного перебора.

Результаты расчета приведены в виде графиков на рис. 1, 2. Для сравнения в табл. 1 указаны суммы ковалентных радиусов r_c взаимодействующих атомов по данным [21]. Их значения задают расстояния, на которых образуются ковалентные неполярные связи. При таких расстояниях (это менее 0,2 нм) у атомов бора и азота происходит гибридизация электронных орбиталей, поэтому использованное приближение уже применять нельзя. Можно видеть, что во всех случаях выполняется условие $r_c < r_0$.

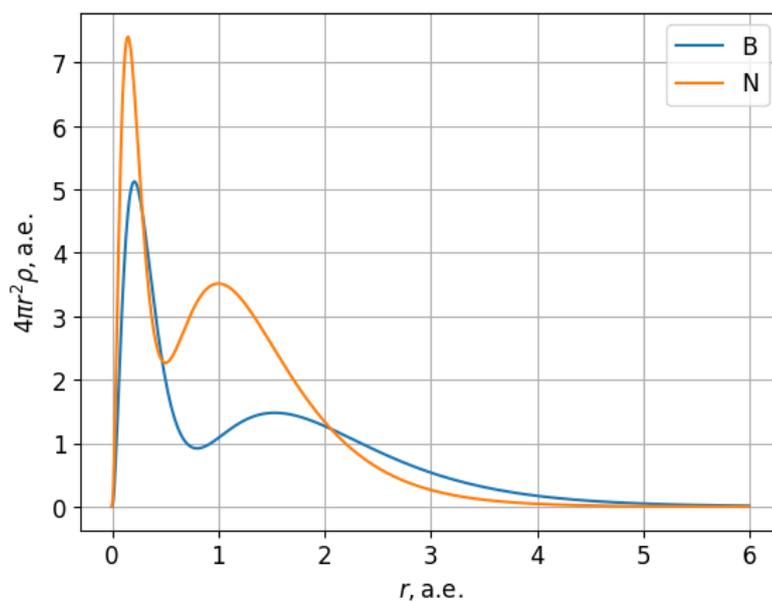


Рис. 1. Радиальные электронные плотности атомов бора и азота

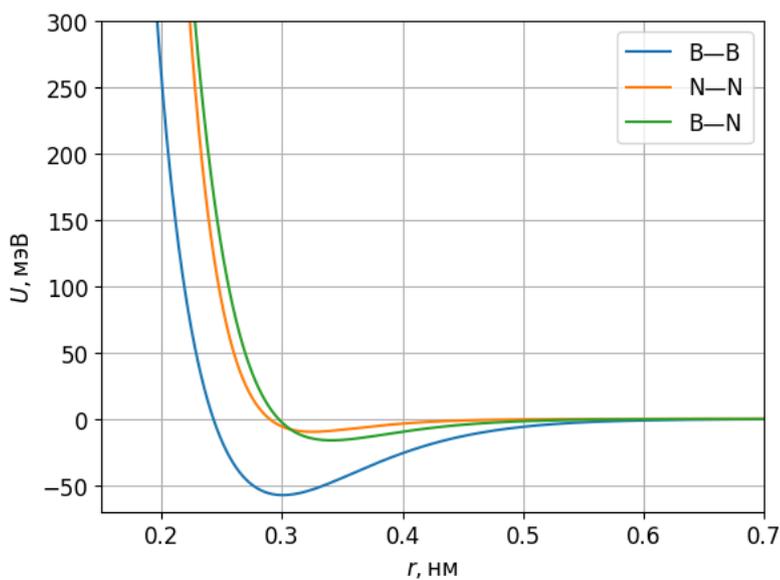


Рис. 2. Зависимости парных межатомных потенциалов от расстояния

Расчеты потенциальной функции по модели (1)–(6) в области ямы позволяют оценить дисперсионную константу C_6 для какого-либо модельного потенциала. Рассмотрим здесь простейший потенциал Сазерленда [22, с. 206]:

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r < r_0, \\ -D \left(\frac{r_0}{r} \right)^6, & r \geq r_0, \end{cases} \quad (14)$$

для которого

$$C_6 = Dr_0^6, \tag{15}$$

где D и r_0 в нашем случае рассчитываются по модели (1)–(6). Отметим, что потенциал (14) находит применение в термодинамических и статистических моделях, например при вычислении вириальных коэффициентов, а также оказывается удобным для описания адсорбции наночастиц на поверхности твердого тела [23]. Из теории сил Ван-дер-Ваальса известна формула Слейтера – Кирквуда, которая получена вариационным методом [24, с. 36]:

$$C_6 = \frac{3}{2} \frac{\alpha_a \alpha_b}{\sqrt{\alpha_a / N_a + \alpha_b / N_b}}, \tag{16}$$

где $\alpha_{a,b}$ и $N_{a,b}$ – статические поляризуемости и валентности атомов; $\alpha_a = 20,5$ а.е., $\alpha_b = 7,4$ а.е. [25] и $N_a = N_b = 3$ (индексы обозначают "a" → бор, "b" → азот). По (15) и (16) проводились расчеты, результаты которых в сравнении с данными из [26] представлены в табл. 1. Можно видеть, что по порядку величины все значения согласуются друг с другом, хотя формула (15) дает несколько заниженные результаты.

Таблица 1

Параметры взаимодействия

| Система | D , мэВ | r_0 , нм | r_c , нм | C_6 , а.е. [26] | C_6 , а.е. (15) | C_6 , а.е. (16) |
|---------|-----------|------------|------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| B–B | 57,475 | 0,302 | 0,170 | 95,7; 99,5 | 72,4 | 120,6 |
| N–N | 9,740 | 0,325 | 0,142 | 22,0; 24,2 | 19,4 | 26,2 |
| B–N | 16,170 | 0,341 | 0,156 | – | 42,8 | 54,4 |

На практике параметры взаимодействия разнородных атомов часто оцениваются по параметрам взаимодействия одинаковых атомов согласно правилам комбинирования Лоренца – Бергло [27, с. 29]:

$$D_{ab} = \sqrt{D_a D_b}, \quad r_{ab} = \frac{r_a + r_b}{2}. \tag{17}$$

Из представленной выше теории следует, что эмпирические формулы (17) не могут считаться универсальными. Так, из полученных результатов следует, что для системы B–N правила комбинирования не выполняются даже качественно. Первопринципные расчеты дают $r_{ab} > r_a, r_b$ (табл. 1), что не согласуется с (17). Это объясняется электронным строением взаимодействующих атомов. Вдали от ядер имеется область пространства, в которой электронная плотность атома бора превышает электронную плотность атома азота (см. рис. 1). Это приводит к изменению энергии отталкивания и смещению положения минимума потенциальной кривой вправо. Вычисление глубины потенциальной ямы по (17) дает погрешность более 45 %, что также неприемлемо.

Заключение

Построены зависимости потенциальной энергии нековалентного взаимодействия от расстояния для комбинаций атомов B–B, N–N, B–N. В известных нам литературных источниках подобные зависимости отсутствуют. Использовалась теория функционала плотности в приближении электронного газа с электронными плотностями, учитывающими оболочечную структуру атомов. Проведен расчет параметров взаимодействия всех пар атомов (глубина потенциальной ямы и равновесное расстояние) и оценены значения константы дисперсионного взаимодействия. Первопринципные расчеты могут быть использованы для идентификации параметров модельных потенциалов, которые находят применение при моделировании методами молекулярной динамики и Монте-Карло. Показано, что правила Лоренца – Бергло для нековалентного взаимодействия атомов бора и азота дают ошибочные результаты.

Список литературы

1. Перевислов С. Н. Структура, свойства и области применения графитоподобного гексагонального нитрида бора // Новые огнеупоры. 2019. № 6. С. 35.
2. Naclerio A. E., Kidambi P. R. A review of scalable hexagonal boron nitride (h-BN) synthesis for present and future applications // *Advanced Material*. 2022. Vol. 35, № 6. P. 2207374. doi: 10.1002/adma.202207374
3. Ogawa S., Fukushima S., Shimatani M. Hexagonal boron nitride for photonic device applications: A review // *Materials*. 2023. Vol. 16, № 5. P. 2005. doi: 10.3390/ma16052005
4. Knobloch T., Illarionov Y. Y., Ducry F. [et al.]. The performance limits of hexagonal boron nitride as an insulator for scaled CMOS devices based on two-dimensional materials // *Nature Electronics*. 2021. Vol. 4. P. 98. doi: 10.1038/s41928-020-00529-x
5. Lorenz M., Agreiter J., Smith A. M., Bondybey V. E. Electronic structure of diatomic boron nitride // *Journal of Chemical Physics*. 1996. Vol. 104, № 8. P. 3143.
6. Acharya A., Sharma S., Liu, X. [et al.]. A review on van der Waals boron nitride quantum dots // *Journal of Carbon Research*. 2021. Vol. 7. P. 35. doi: 10.3390/c7020035
7. Cheng-Rong Hsing, Ching Cheng, Jyh-Pin Chou [et al.]. Van der Waals interaction in a boron nitride bilayer // *New Journal of Physics*. 2014. Vol. 16. P. 113015. doi: 10.1088/1367-2630/16/11/113015
8. Vuong T. Q. P., Liu S., Van der Lee A. [et al.]. Isotope engineering of van der Waals interactions in hexagonal boron nitride // *Nature Materials*. 2018. Vol. 17. P. 152. doi: 10.1038/NMAT5048
9. Hongping Li, Wendi Fu, Ke Xu [et al.]. The electronic structure and physicochemical property of boron nitridene // *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. 2020. Vol. 94. P. 107475. doi: 10.1016/j.jmgs.2019.107475
10. Zaliziak V. E., Zolotov O. A., Sidorov K. A. Interatomic potential for metal diborides // *Molecular Simulation*. 2021. Vol. 47, № 12. P. 982. doi: 10.1080/08927022.2021.19359
11. Kochaev A., Katin K., Maslov M., Singh S. Covalent and van der Waals interactions in a vertical heterostructure composed of boron and carbon // *Physical Review B*. 2022. Vol. 105. P. 235444. doi: 10.1103/PhysRevB.105.235444
12. Chkhartishvili L. Relative stability of boron planar clusters in diatomic molecular model // *Molecules*. 2022. Vol. 27. P. 1469. doi: 10.3390/molecules27051469
13. Chkhartishvili L. Construction of semiclassical interatomic B–B pair potential to characterize all-boron nanomaterials // *Characterization and Application of Nanomaterials*. 2023. Vol. 6, № 1. P. 1. doi: 10.24294/can.v6i1.1852

14. Icli B., Sheepwash E., Riis-Johannessen T. [et al.]. Dative boron–nitrogen bonds in structural supramolecular chemistry: Multicomponent assembly of prismatic organic cages // *Chemical Science*. 2011. Vol. 2. P. 1719. doi: 10.1039/C1SC00320H
15. Chen B., Jäkle F. Boron-nitrogen Lewis pairs in the assembly of supramolecular macrocycles, molecular cages, polymers, and 3D materials // *Angewandte Chemie International Edition*. 2024. Vol. 63, № 3. P. e202313379. doi: 10.1002/anie.202313379
16. Gordon R. G., Kim Y. S. Theory for the forces between closed-shell atoms and molecule // *Journal of Chemical Physics*. 1972. Vol. 56. P. 3122. doi: 10.1063/1.1677649
17. Waldman M., Gordon R. G. Scaled electron gas approximation for intermolecular forces // *Journal of Chemical Physics*. 1972. Vol. 71. P. 1325. doi: 10.1063/1.438433
18. Clementi E., Roetti C. Atomic data and nuclear data tables. 1974. Vol. 14, № 3-4. P. 177. doi: 10.1016/S0092-640X(74)80016-1
19. Koga T. Analytical Hartree-Fock electron densities for atoms He through Lr // *Theoretica Chimica Acta*. 1997. Vol. 95. P. 113. doi: 10.1007/BF02341696
20. Сокуров А. А. Вычисление интегралов в теории функционала электронной плотности в приближении электронного газа с использованием технологии CUDA // *Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 10. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления*. 2024. Т. 20, № 3. С. 335. doi: 10.21638/spbu10.2024.303
21. Pyykö P., Atsumi M. Molecular single-bond covalent radii for elements 1–118 // *Chemistry: A European Journal*. 2009. Vol. 15. P. 186. doi: 10.1002/chem.200800987
22. Каплан И. Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 397 с.
23. Рехвиашвили С. Ш., Бухурова М. М. Адсорбционное взаимодействие серебряных наночастиц с кремниевой подложкой // *Физика твердого тела*. 2025. Т. 67, № 1. С. 175. doi: 10.61011/FTT.2025.01.59785.224
24. Бараш Ю. С. Силы Ван-Дер-Ваальса. М. : Наука, 1988. 344 с.
25. Schwerdtfeger P., Nagle J. K. Table of static dipole polarizabilities of the neutral elements in the periodic table // *Molecular Physics*. 2019. Vol. 117, № 9-12. P. 1200.
26. Chu X., Dalgarno A. Linear response time-dependent density functional theory for van der Waals coefficients // *Journal of Chemical Physics*. 2004. Vol. 121. P. 4083. doi: 10.1063/1.1779576
27. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика, 2005. 160 с.

References

1. Perevislov S.N. Structure, properties and applications of graphite-like hexagonal boron nitride. *Novye ognepory = New refractories*. 2019;(6):35. (In Russ.)
2. Naclerio A.E., Kidambi P.R. A review of scalable hexagonal boron nitride (h-BN) synthesis for present and future applications. *Advanced Material*. 2022;35(6):2207374. doi: 10.1002/adma.202207374
3. Ogawa S., Fukushima S., Shimatani M. Hexagonal boron nitride for photonic device applications: A review. *Materials*. 2023;16(5):2005. doi: 10.3390/ma16052005
4. Knobloch T., Illarionov Y.Y., Ducry F. et al. The performance limits of hexagonal boron nitride as an insulator for scaled CMOS devices based on two-dimensional materials. *Nature Electronics*. 2021;4:98. doi: 10.1038/s41928-020-00529-x
5. Lorenz M., Agreiter J., Smith A.M., Bondybey V.E. Electronic structure of diatomic boron nitride. *Journal of Chemical Physics*. 1996;104(8):3143.
6. Acharya A., Sharma S., Liu, X. et al. A review on van der Waals boron nitride quantum dots. *Journal of Carbon Research*. 2021;7:35. doi: 10.3390/c7020035

7. Cheng-Rong Hsing, Ching Cheng, Jyh-Pin Chou et al. Van der Waals interaction in a boron nitride bilayer. *New Journal of Physics*. 2014;16:113015. doi: 10.1088/1367-2630/16/11/113015
8. Vuong T.Q.P., Liu S., Van der Lee A. et al. Isotope engineering of van der Waals interactions in hexagonal boron nitride. *Nature Materials*. 2018;17:152. doi: 10.1038/NMAT5048
9. Hongping Li, Wendi Fu, Ke Xu et al. The electronic structure and physicochemical property of boron nitridene. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. 2020;94:107475. doi: 10.1016/j.jmgm.2019.107475
10. Zalizniak V.E., Zolotov O.A., Sidorov K.A. Interatomic potential for metal diborides. *Molecular Simulation*. 2021;47(12):982. doi: 10.1080/08927022.2021.19359
11. Kochaev A., Katin K., Maslov M., Singh S. Covalent and van der Waals interactions in a vertical heterostructure composed of boron and carbon. *Physical Review B*. 2022;105:235444. doi: 10.1103/PhysRevB.105.235444
12. Chkhartishvili L. Relative stability of boron planar clusters in diatomic molecular model. *Molecules*. 2022;27:1469. doi: 10.3390/molecules27051469
13. Chkhartishvili L. Construction of semiclassical interatomic B–B pair potential to characterize all-boron nanomaterials. *Characterization and Application of Nanomaterials*. 2023;6(1):1. doi: 10.24294/can.v6i1.1852
14. Icli B., Sheepwash E., Riis-Johannessen T. et al. Dative boron–nitrogen bonds in structural supramolecular chemistry: Multicomponent assembly of prismatic organic cages. *Chemical Science*. 2011;2:1719. doi: 10.1039/C1SC00320H
15. Chen B., Jäkle F. Boron-nitrogen Lewis pairs in the assembly of supramolecular macrocycles, molecular cages, polymers, and 3D materials. *Angewandte Chemie International Edition*. 2024;63(3):e202313379. doi: 10.1002/anie.202313379
16. Gordon R.G., Kim Y.S. Theory for the forces between closed-shell atoms and molecule. *Journal of Chemical Physics*. 1972;56:3122. doi: 10.1063/1.1677649
17. Waldman M., Gordon R.G. Scaled electron gas approximation for intermolecular forces. *Journal of Chemical Physics*. 1972;71:1325. doi: 10.1063/1.438433
18. Clementi E., Roetti C. *Atomic data and nuclear data tables*. 1974;14(3-4):177. doi: 10.1016/S0092-640X(74)80016-1
19. Koga T. Analytical Hartree-Fock electron densities for atoms He through Lr. *Theoretica Chimica Acta*. 1997;95:113. doi: 10.1007/BF02341696
20. Sokurov A.A. Calculation of integrals in the electron density functional theory in the electron gas approximation using the CUDA technology. *Vestnik Sankt-Peterburgskogo universitetata. Seriya 10. Prikladnaya matematika. Informatika. Protsessy upravleniya = Bulletin of Saint Petersburg University. Series 10. Applied mathematics. Computer Science. Control Processes*. 2024;20(3):335. (In Russ.). doi: 10.21638/spbu10.2024.303
21. Pyykkö P., Atsumi M. Molecular single-bond covalent radii for elements 1–118. *Chemistry: A European Journal*. 2009;15:186. doi: 10.1002/chem.200800987
22. Kaplan I.G. *Mezhmolekulyarnye vzaimodeystviya. Fizicheskaya interpretatsiya, komp'yuternye raschety i model'nye potentsialy = Intermolecular interactions. Physical interpretation, computer calculations and model potentials*. Moscow: BINOM. Laboratoriya znaniy, 2012:397. (In Russ.)
23. Rekhviashvili S.Sh., Bukhurova M.M. Adsorption interaction of silver nanoparticles with silicon substrate. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*. 2025;67(1):175. (In Russ.). doi: 10.61011/FTT.2025.01.59785.224
24. Barash Yu.S. *Sily Van-Der-Vaal'sa = Van der Waals forces*. Moscow: Nauka, 1988:344. (In Russ.)
25. Schwerdtfeger P., Nagle J. K. Table of static dipole polarizabilities of the neutral elements in the periodic table. *Molecular Physics*. 2019;117(9-12):1200.
26. Chu X., Dalgarno A. Linear response time-dependent density functional theory for van der Waals coefficients. *Journal of Chemical Physics*. 2004;121:4083. doi: 10.1063/1.1779576

27. Rit M. *Nanokonstruivovanie v nauke i tekhnike. Vvedenie v mir nanorascheta = Nanoengineering in science and engineering. Introduction to the world of nanocalculation*. Izhevsk: Reguljarnaya i khaoticheskaya dinamika, 2005:160. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Аслан Артурович Сокуров

кандидат физико-математических наук,
заведующий лабораторией
автоматизации измерений,
Институт прикладной математики
и автоматизации – филиал Федерального
государственного бюджетного научного
учреждения «Федеральный научный
центр «Кабардино-Балкарский научный
центр Российской академии наук»
(Россия, г. Нальчик, ул. Шортанова, 89А)

E-mail: isokuroff@mail.ru

Aslan A. Sokurov

Candidate of physical and mathematical
sciences, head of the laboratory
of measurement automation, Institute
of Applied Mathematics and Automation –
branch of Federal Scientific Center
“Kabardino-Balkarian Scientific Center
of the Russian Academy of Sciences”
(89A Shortanova street, Nalchik, Russia)

Серго Шотович Рехвиашвили

доктор физико-математических наук,
заведующий отделом теоретической
и математической физики,
Институт прикладной математики
и автоматизации – филиал Федерального
государственного бюджетного научного
учреждения «Федеральный научный
центр «Кабардино-Балкарский научный
центр Российской академии наук»
(Россия, г. Нальчик, ул. Шортанова, 89А)

E-mail: rsergo@mail.ru

Sergo Sh. Rekhviashvili

Doctor of physical and mathematical
sciences, head of the department
of theoretical and mathematical physics,
Institute of Applied Mathematics and
Automation – branch of Federal Scientific
Center “Kabardino-Balkarian Scientific
Center of the Russian Academy
of Sciences” (89A Shortanova street,
Nalchik, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 06.03.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 22.03.2025

Принята к публикации / Accepted 16.04.2025