

NGHIÊN CỨU KHẢ NĂNG HẤP PHỤ CHẤT KHÍ CỦA BOROPHENE PHA TẠP NGUYÊN TỬ KIM LOẠI: TÍNH TOÁN MÔ PHỎNG BẰNG DFT

Phạm Minh Nguyệt

Trường Đại học Công nghiệp Thực phẩm TP.HCM

Email: *phamminhnguyet261187@gmail.com*

Ngày nhận bài: 13/01/2022; Ngày chấp nhận đăng: 16/5/2022

TÓM TẮT

Bài báo này khảo sát khả năng hấp phụ chất khí của borophene đơn lớp thông qua việc pha tạp vào lớp borophene này một nguyên tử kim loại. Phương pháp nghiên cứu được sử dụng là tính toán mô phỏng bằng lý thuyết hàm mật độ (DFT) thông qua gói thư viện dMol3. Trong bài đã tính toán được năng lượng hấp phụ chất khí của borophene nguyên thủy và borophene pha tạp các kim loại khác nhau. Qua đó cho thấy borophene khi được pha tạp nguyên tử kim loại chuyển tiếp có khả năng hấp phụ chất khí tốt hơn borophene nguyên thủy. Điều này lại không đúng với các kim loại kiềm và kiềm thổ. Đây là một tính toán mô phỏng mang tính định hướng cho các nghiên cứu ứng dụng liên quan đến chế tạo các cảm biến chất khí độc hại.

Từ khóa: Borophene đơn lớp, DFT, dMol3, năng lượng hấp phụ, cảm biến chất khí.

1. MỞ ĐẦU

Việc phát hiện các chất khí độc hại ngày càng trở nên cần thiết, đặc biệt trong các ngành như môi trường, giám sát chất lượng không khí trong nhà, trong nông nghiệp, trong công nghiệp và trong các hầm mỏ. Không phát hiện kịp thời các khí độc có thể gây ra những ảnh hưởng nghiêm trọng đến cơ thể con người [1]. Do đó, việc phát triển ra các thiết bị có thể phát hiện kịp thời các khí độc hại ngày càng trở nên quan trọng. Điều đó dẫn đến việc tìm ra vật liệu cảm biến khí độc có độ nhạy cao, gọn nhẹ và ổn định là điều cực kỳ cần thiết. Cho đến nay, các vật liệu sử dụng cho các cảm biến khí vẫn chủ yếu là các vật liệu dạng rắn. Tuy nhiên, các nhà khoa học luôn mong muốn nâng cao tỷ lệ giữa bề mặt tiếp xúc và thể tích vật rắn để phát triển các vật liệu cảm biến tốt. Điều này cho thấy vật liệu 2D hoàn toàn có thể đáp ứng yêu cầu để trở thành các vật liệu cảm biến tốt. Do đó, vật liệu 2D cũng đã và đang thu hút sự quan tâm nghiên cứu của nhiều nhà khoa học trên thế giới bởi những tính chất vô cùng độc đáo cho thấy tiềm năng ứng dụng trong các thiết bị chuyển đổi năng lượng và điện tử ở thế hệ tiếp theo [2, 3]. Do đặc tính bề mặt tiếp xúc lớn trong các vật liệu 2D, sự hấp phụ các chất khí lên bề mặt vật liệu 2D có khả năng sẽ tốt hơn dẫn đến vật liệu đạt hiệu suất cảm biến cao hơn. Các chất khí bị hấp phụ có thể trao đổi điện tích giữa chất hấp phụ và chất bị hấp phụ gây ảnh hưởng đến tính chất điện tử của vật liệu [4].

Việc tách thành công graphene (cấu trúc tổ ong 2D của Carbon) đã mở ra một cơ hội để nghiên cứu các vật liệu 2D khác [5]. Graphene có bề mặt diện tích lớn và độ dẫn điện cao do đó một tương tác nhỏ với môi trường cũng có thể tạo ra những thay đổi lớn về tính chất của nó. Các đặc tính điện tử của graphene có thể bị thay đổi thông qua trao đổi điện tử với phân tử khí bị hấp phụ, nên nó có thể sử dụng để làm cảm biến khí. Tương tự đối với một số vật liệu 2D khác như germanene, silicene, phosphorene, stanene, boron nitride, nhôm nitride, arsenene,

antimonene, ... cũng được quan tâm nghiên cứu với mục đích tìm ra ứng dụng của chúng trong việc phát triển vật liệu cảm biến khí hiệu quả hơn [6, 7].

Mannix và cộng sự đã thành công tổng hợp được một lớp borophene trên nền Ag trong môi trường chân không cực cao mở ra một hướng nghiên cứu mới cho các nghiên cứu vật liệu 2D [8]. Liu và cộng sự đã thực hiện tính toán dựa trên phương pháp phiếm hàm mật độ (DFT) sự hấp phụ của một số chất khí chọn lọc trên nền borophene đơn lớp và cho thấy tiềm năng của borophene trong việc phát triển vật liệu cảm biến khí [9]. Các đặc tính cảm biến khí của borophene cũng được Shukla và cộng sự xác nhận một lần nữa thông qua thực hiện tính toán dựa trên phương pháp Hàm Green không cân bằng (NEGF) [10]. Gần đây, Weihua Wang và cộng sự cũng thực hiện tính toán sự hấp phụ của nguyên tố oxy lên borophene đơn lớp có pha tạp các kim loại nhôm (Al), bạc (Ag) và vàng (Au) [11]. Tuy nhiên, công trình của các tác giả này không đi sâu vào nghiên cứu khả năng cảm biến chất khí mà nghiên cứu khả năng mở rộng vùng cấm của borophene đơn lớp. Sengupta cũng có công trình nghiên cứu sự pha tạp của nguyên tố Li ảnh hưởng đến các tính chất của borophene cho thấy vật liệu này cũng có tiềm năng ứng dụng trong việc chế tạo pin Li-ion [12]. Ngoài ra, rất ít báo cáo liên quan đến đặc tính cảm biến các chất khí của borophene đặc biệt là các chất khí độc hại.

Bài báo này trình bày sự nghiên cứu lý thuyết dựa trên tính toán mô phỏng bằng DFT cho sự hấp phụ khí của borophene đơn lớp pha tạp các kim loại. Chúng tôi dự đoán rằng sẽ mở rộng được khả năng hấp phụ khí của borophene khi pha tạp kim loại và tìm ra được nguyên tố kim loại pha tạp tốt nhất với borophene, giúp mở ra triển vọng cho các nghiên cứu ứng dụng nhằm phát triển vật liệu cảm biến chất khí độc hại hiệu quả hơn.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Nghiên cứu được thực hiện bằng cách tính toán mô phỏng bằng lý thuyết hàm mật độ Density Functional Theory (DFT) với sự trợ giúp của phần mềm Material Studio với module dMol3 [13]. DMol3 cho phép xây dựng mẫu cấu trúc điện tử và năng lượng của phân tử, chất rắn và năng lượng bề mặt. Phần mềm này sử dụng lý thuyết DFT. Các nghiên cứu có thể thực hiện bao gồm: Các phân tử vô cơ, các tinh thể phân tử, chất rắn cộng hoá trị, chất rắn kim loại và bề mặt vô hạn của vật liệu.

Cấu trúc borophene đơn lớp được xây dựng trước hết. Sau đó thực hiện các tính toán liên quan đến các hệ borophene nguyên thủy, borophene – kim loại, borophene – kim loại + chất khí để tính toán các năng lượng hấp phụ tương ứng. Các tính toán được thực hiện bằng phương pháp DFT với phiếm hàm tương quan trao đổi sử dụng của Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) của phương pháp gần đúng gradient suy rộng (GGA) [14]. Trong các ô nguyên tố, một vùng chân không 20Å được thêm vào dọc theo trục z của borophene đơn lớp để tránh sự tương tác biên trong tính toán. Phương pháp smearing Gaussian cũng được sử dụng với độ rộng 0.1eV. Giá trị k-point sử dụng trong các tính toán là 6x6x1 và năng lượng hội tụ trong các vòng lặp SCF được thiết lập ở mức 10^{-6} eV.

Hơn nữa, để khảo sát khả năng cảm biến chất khí của borophene và borophene pha tạp nguyên tố kim loại, các tính toán năng lượng hấp phụ cũng được thực hiện. Trong đó, năng lượng hấp phụ các chất khí lên borophene được tính bởi công thức

$$E_a = E_{borophene+khí} - E_{borophene} - E_{khí} \quad (1)$$

Trong đó $E_{borophene+khí}$, $E_{borophene}$ và $E_{khí}$ lần lượt là năng lượng tổng của hệ borophene + chất khí, borophene nguyên thủy và của phân tử khí riêng lẻ.

Đối với trường hợp borophene pha tạp nguyên tố kim loại, năng lượng hấp phụ được tính toán theo công thức

$$E_a = E_{borophene+kim\ lo\ ai+khí} - E_{borophene+kim\ lo\ ai} - E_{khí} \quad (2)$$

Trong đó, $E_{borophene+kim\ loai+khí}$, $E_{borophene+kim\ loai}$ lần lượt là năng lượng toàn phần của hệ borophene pha tạp kim loại với chất khí và của borophene chỉ pha tạp kim loại.

Giá trị năng lượng hấp phụ càng âm cho thấy sự cảm biến của hệ borophene càng thuận lợi về mặt phương pháp luận. Nghiên cứu này thực hiện với borophene pha tạp các nguyên tố kim loại thuộc chu kỳ 3 trong bảng tuần hoàn (K, Ca, ... Zn) và thực hiện tính năng lượng hấp phụ cho các khí độc phổ biến bao gồm CO, NO₂ và H₂S.

Sơ đồ thực hiện tính toán năng lượng hấp phụ ứng với một phân tử chất khí và một loại nguyên tố pha tạp được trình bày ở Bảng 1.

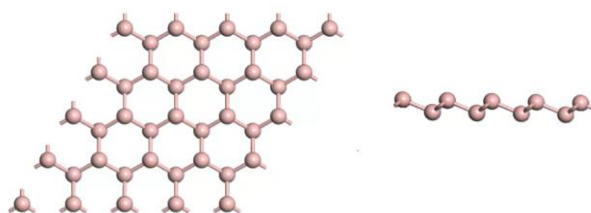
Bảng 1. Sơ đồ tiến hành tính toán năng lượng hấp phụ ứng với một phân tử khí trên borophene pha tạp một nguyên tố kim loại

SƠ ĐỒ TIẾN HÀNH TÍNH TOÁN	Xây dựng cấu trúc borophene đơn lớp
	Thực hiện tối ưu hóa cấu trúc và tính toán năng lượng của hệ borophene nguyên thủy
	Thực hiện pha tạp một nguyên tố kim loại. Tối ưu hóa cấu trúc và tính toán lại năng lượng của hệ $E_{borophene+kim\ loai}$
	Cho hệ borophene + kim loại hấp phụ một phân tử khí trên bề mặt.
	Tối ưu hóa cấu trúc của hệ. Tính toán lại năng lượng của hệ $E_{borophene+kim\ loai+khí}$
	Tính năng lượng của một phân tử riêng lẻ $E_{khí}$
	Sử dụng công thức (2) để xác định năng lượng hấp phụ.
	Thực hiện tính toán lại với phân tử khí khác và nguyên tố kim loại pha tạp khác.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Cấu trúc của borophene nguyên thủy

Borophene nguyên thủy chứa 2 nguyên tử boron (B) trong ô nguyên tố. Cấu trúc borophene nguyên thủy khi nhìn trên xuống và nhìn từ cạnh bên được thể hiện trên hình 1. Nhìn từ trên xuống, borophene nguyên thủy có cấu trúc như dạng tổ ong. Tuy nhiên, khi nhìn từ bên qua, borophene không thể hiện cấu trúc phẳng như graphene mà có cấu trúc dạng vênh, một lớp nguyên tử ở trên và một lớp nguyên tử ở dưới. Trước khi thực hiện bất kỳ tính toán nào, borophene nguyên thủy phải được thực hiện tối ưu hóa cấu trúc như bước đầu tiên trong sơ đồ tính toán. Tính toán cho thấy trong cấu trúc tối ưu của borophene, lớp nguyên tử trên và dưới có khoảng cách 0,82Å, khoảng cách giữa 2 nguyên tử lân cận là 1,83Å, góc giữa các nguyên tử B trong cấu trúc này là 102°. Các tham số tính toán được trong nghiên cứu này phù hợp với các công bố trước đó [10, 15]

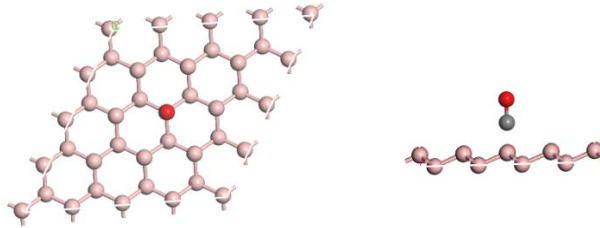


Hình 1. Cấu trúc borophene nguyên thủy nhìn từ trên xuống và từ cạnh ngang

Để thực hiện tính toán tính chất cảm biến khí của borophene, ô nguyên tố của borophene được mở rộng thành supercell thông qua hệ số nhân 4×4×1. Điều này tạo ra supercell của borophene gồm 32 nguyên tử boron.

3.2. CO, NO₂ và H₂S trên borophene nguyên thủy

Nghiên cứu trước hết được thực hiện trên borophene nguyên thủy, nghiên cứu quá trình hấp phụ các chất khí này trên borophene. Cấu trúc của borophene hấp phụ một phân tử khí CO sau khi tối ưu hóa cấu trúc được cho bởi Hình 2.



Hình 2. Cấu trúc borophene hấp phụ 1 phân tử khí CO nhìn từ trên xuống và từ cạnh ngang.

Các năng lượng hấp phụ của các chất khí CO, NO₂ và H₂S được tính dựa trên công thức (1). Kết quả tính toán được cho bởi Bảng 2.

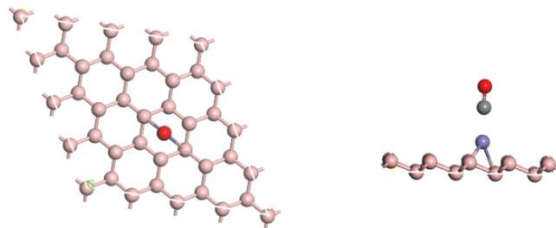
Bảng 2. Năng lượng hấp phụ của CO, NO₂ và H₂S trên borophene nguyên thủy

Chất khí hấp phụ	Năng lượng hấp phụ (eV)
CO	-1,222
NO ₂	-1,382
H ₂ S	-0,528

Kết quả tính toán cho thấy năng lượng hấp phụ của 3 chất khí trên borophene nguyên thủy đều mang giá trị âm. Điều này cho thấy borophene có khả năng cảm biến các chất khí tốt và rất tiềm năng để trở thành một vật liệu cảm biến. Ngoài ra, CO và NO₂ cho thấy sự hấp phụ khá mạnh lên trên borophene, H₂S được hấp phụ ở mức trung bình. Khả năng hấp phụ của borophene lên các chất khí CO, NO₂ và H₂S có thể giải thích một cách đơn giản như sau: Khi các chất khí này tiến đến gần borophene đơn lớp sẽ xuất hiện sự trộn lẫn giữa các orbital p của nguyên tố B (orbital B-p) và orbital p của nguyên tố O hoặc S (orbital O/S-p).

3.2. Sự hấp phụ các chất khí trên borophene có gắn thêm tạp chất

Đã có nghiên cứu cho thấy khi pha tạp thêm nguyên tố kim loại chuyển tiếp vào germanene giúp vật liệu này nâng cao khả năng cảm biến các chất khí [10]. Do đó nghiên cứu ở đây cũng được thực hiện từ ý tưởng tương tự như vậy. Tuy nhiên, nghiên cứu này xét tất cả kim loại trên chu kỳ 3 của bảng tuần hoàn hóa học, bao gồm 12 nguyên tố (K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu và Zn). Thực hiện nghiên cứu quá trình hấp phụ của các chất khí đã thực hiện ở mục trên lên borophene pha tạp từng loại nguyên tố này để so sánh với borophene nguyên thủy. Hình 3 thể hiện cấu trúc của borophene có pha tạp Fe sau khi hấp phụ các chất khí CO.

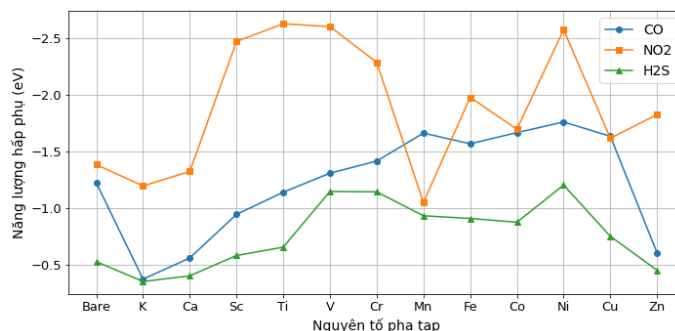


Hình 3. Cấu trúc borophene có pha tạp Fe khi hấp phụ phân tử CO nhìn từ trên xuống và từ cạnh ngang.

Các năng lượng hấp phụ của các chất khí trên nền borophene có pha tạp thêm nguyên tố kim loại được xác định thông qua công thức (2). Bảng 3 cho thấy kết quả tính toán năng lượng hấp phụ (eV) của borophene nguyên thủy lên các chất khí và các năng lượng hấp phụ chất khí của borophene khi pha tạp thêm các nguyên tố kim loại. Đồ thị ở Hình 4 được trình bày để trực quan tốt hơn các kết quả tính toán. Chú ý rằng năng lượng hấp phụ càng âm thì sự cảm biến chất khí càng tốt nên trục y của đồ thị đã được vẽ đảo chiều.

Bảng 3. Năng lượng hấp phụ (eV) của CO, NO₂ và H₂S trên borophene nguyên thủy và có pha tạp nguyên tố kim loại

Pha tạp	CO	NO ₂	H ₂ S
Nguyên thủy	-1,222	-1,382	-0,528
K	-0,373	-1,195	-0,353
Ca	-0,560	-1,322	-0,402
Sc	-0,944	-2,467	-0,582
Ti	-1,139	-2,623	-0,655
V	-1,307	-2,598	-1,146
Cr	-1,414	-2,283	-1,142
Mn	-1,660	-1,048	-0,932
Fe	-1,566	-1,975	-0,908
Co	-1,664	-1,694	-0,875
Ni	-1,758	-2,570	-1,202
Cu	-1,632	-1,615	-0,751
Zn	-0,604	-1,824	-0,452



Hình 4. Biểu đồ thể hiện năng lượng hấp phụ của CO, NO₂ và H₂S trên borophene nguyên thủy và có pha tạp nguyên tố kim loại

Dựa vào biểu đồ có thể rút ra được một số kết quả:

- Các kim loại kiềm và kiềm thổ (ở đây là K và Ca) không giúp borophene cảm biến chất khí tốt hơn. Hầu như đối với cả ba chất khí xem xét, giá trị tuyệt đối năng lượng hấp phụ đều giảm. Đặc biệt đối với chất khí CO, việc pha tạp thêm K hoặc Ca làm cho borophene cảm biến với chất khí này kém đi rất nhiều.
- Đối với các kim loại chuyển tiếp, đa số các chất này khi được pha tạp vào borophene đều có khả năng gia tăng sự cảm biến khí của borophene nguyên thủy. Trừ một số trường hợp như Mn trong cảm biến NO₂ và Zn trong cảm biến CO có năng lượng hấp phụ cao hơn. Ni cho thấy tiềm năng để trở thành chất pha tạp tốt cho borophene 2D vì có khả năng hỗ trợ borophene tạo được cảm biến các chất khí tốt hơn.

Ở đây, pha tạp thêm các nguyên tố kim loại chuyển tiếp làm cho khả năng hấp phụ các chất khí tăng lên. Kết quả này có thể là do sự ảnh hưởng của orbital d của các kim loại chuyển

tiếp lên vùng trộn lẫn của orbital B-p và orbital O/S-p. Cách giải thích liên quan đến sự ảnh hưởng orbital d cũng hợp lý khi mà các kim loại kiềm và kiềm thổ không có orbital d mà chỉ có các orbital s. Do đó khả năng hấp phụ chất khí của borophene pha tạp thêm kim loại kiềm và kiềm thổ bị kém đi.

Như vậy, kết quả tính toán mô phỏng đã phù hợp với dự đoán ban đầu của tác giả rằng việc pha tạp kim loại có thể làm mở rộng khả năng cảm biến khí của borophene và tìm được nguyên tử kim loại phù hợp hơn cả là các nguyên tử kim loại chuyển tiếp nhất là Ni.

4. KẾT LUẬN

Bài báo đã trình bày một nghiên cứu mới về tính chất cảm biến khí của borophene. Trong đó nghiên cứu được quá trình hấp phụ khí lên borophene nguyên thủy và borophene pha tạp nguyên tử kim loại. Nghiên cứu cho thấy đối với borophene nguyên thủy, tính chất hấp phụ của các chất khí theo chiều hướng $\text{NO}_2 > \text{CO} > \text{H}_2\text{S}$. Khi pha tạp kim loại kiềm và kiềm thổ vào borophene, tính chất cảm biến khí của borophene có chiều hướng suy giảm. Tuy nhiên, khi pha tạp các kim loại chuyển tiếp, tính chất cảm biến khí của borophene lại gia tăng, đặc biệt là đối với nguyên tử kim loại Ni. Công trình này xem như góp một phần vào nghiên cứu ứng dụng của borophene trong các vật liệu cảm biến khí.

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này do trường Đại học Công nghiệp Thực phẩm TP. Hồ Chí Minh bảo trợ và cấp kinh phí theo Hợp đồng số 11/HĐ-DCT ngày 05/11/2021.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Kong J., Franklin N. R., Zhou C., Chaplin M. G., Peng S., Cho K., Dai H. - Nanotube molecular wires as chemical sensor, *science* **287** (5453) (2000) 622-627. <https://doi.org/10.1126/science.287.5453.622>.
2. Novoselov K. S., Fal'ko V. I., Colombo L., Gellert P. R., Schwab M. G., Kim K. - A roadmap for graphene, *Nature* **490** (2012) 192-200. <https://doi.org/10.1038/nature11458>.
3. Balendhran S., Walia S., Nili H., Sriram S., Bhaskaran M. - Elemental analogues of graphene: Silicene, germanene, stanene, and phosphorene, *Small* **11** (6) (2014) 640-652. <https://doi.org/10.1002/sml.201402041>.
4. Kannan P. K., Late D. J., Morgan H., Rout C. S. - Recent developments in 2d layered inorganic nanomaterials for sensing, *Nanoscale* **7** (32) (2015) 13293-13312. <https://doi.org/10.1039/C5NR03633J>
5. Neto A. H. C., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S., Geim A. K. - The electronic properties of graphene, *Rev Mod Phys* **81** (1) (2009) 109-162. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
6. Prasongkit J., Amorim R. G., Chakraborty S., Ahuja R., Scheicher R. H., Amornkitbamrung V. - Highly sensitive and selective gas detection based on silicene, *J Phys Chem C* **119** (29) (2015) 16934-16940. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b03635>.
7. Hussain T., Kaewmaraya T., Chakraborty S., Vovusha H., Amornkitbamrung V., Ahuja R. - Defected and functionalized germanene based nanosensors under sulfur comprising gas exposure, *ACS Sens* **3** (4) (2018) 867-874. <https://doi.org/10.1021/acssensors.8b00167>

8. Mannix A. J., Zhou X. F., Kiraly B., Wood J. D., Alducin D., Myers B. D., Liu X., Fisher B. L., Santiago U., Guest J. R., Yacaman M. J., Ponce A., Oganov A. R., Hersam M. C., Guisinger N. P. - Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs, *Science* **350** (6267) (2015) 1513-1517.
<https://doi.org/10.1126/science.aad1080>.
9. Liu T., Chen Y., Zhang M., Yuan L., Zhang C., Wang J., Fan J. - A first-principles study of gas molecule adsorption on borophene, *AIP Advances* **7** (12) (2017) 125007.
<https://doi.org/10.1063/1.5005959>.
10. Shukla V., W̄arn̄a J., Jena N. K., Grigoriev A., Ahuja R. - Towards the realization of 2d borophene based gas sensor, *J Phys Chem C* **121** (48) (2017) 26869–26876.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b09552>.
11. Weihua Wang, Cuilan Zhao, Peifang Li, Kunpeng Zhou - Oxygen atom adsorption on borophene doped with aluminum, argentum and aurum: A density functional study, *Materials Today Communications* **30** (2022) 103036-103045.
<https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2021.103036>.
12. Sengupta A. - First principles study of Li adsorption properties of a Borophene based hybrid 2D material B₅Se, *Applied Surface Science Advances* **8**, (2022) 100218-100226.
<https://doi.org/10.1016/j.apsadv.2022.100218>.
13. Delley B. - From molecules to solids with the DMol3 approach, *J. Chem. Phys.* **113**, (2000) 7756-7764. <https://doi.org/10.1063/1.1316015>
14. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. - Generalized gradient approximation made simple, *Phys Rev Lett* **77** (1996) 3865-3868.
15. Chieh-Szu Huang, Altynbek Murat, Vasudeo Babar, Enrique Montes, Udo Schwingenschlöggl - Adsorption of the Gas Molecules NH₃, NO, NO₂, and CO on Borophene, *J. Phys. Chem. C* **122** (26) (2018) 14665-14670.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b03811>

ABSTRACT

STUDY OF GAS ADSORPTION ON METAL-DOPED BOROPHENE: DFT SIMULATION CALCULATION

Pham Minh Nguyet

Ho Chi Minh City University of Food Industry

Email: phamminhnguyet261187@gmail.com

This paper investigates the gas adsorption capacity of monolayer borophene through doping a metal atom in this borophene layer. The research method has been used is DFT simulation through dMol3 software package. In the article, the gas absorption quality of primordial borophene and different metal-doped borophene has been calculated. Thereby showing that borophene doped with transition metal atoms has better gas adsorption capacity than primitive borophene. The same is not true of the alkali and alkaline earth metals. This simulation calculation is a guide for applied research related to the manufacture of hazardous gas sensors.

Keywords: Monolayer borophene, DFT, dMol3, adsorption energy, gas sensor.