

Borofeno: Motivações, aplicações e comparativo com o grafeno.

Borophene: Motivations, applications and comparison with graphene

¹Antonio Narciso De Lima, ²José Emanuel Silva, ³Everton Cavalcante

^{1,2,3}Departamento de Física, Universidade Estadual da Paraíba, Campina Grande, PB, Brasil.

Resumo: O borofeno é um material bidimensional(2D) composto por uma única camada de átomos de boro. Fazendo uma breve comparação com o grafeno, material 2D mais conhecido na atualidade, percebe-se diferenças e semelhanças estruturais, nas formas de síntese dos materiais e em suas características. Embora o borofeno tenha várias dificuldades de fabricação em larga escala, os estudos apontam soluções, como por exemplo, o borofeno hidrogenado. Oferecendo algumas características eletrônicas, ópticas e mecânicas até melhores que as do grafeno, o borofeno tem potenciais aplicações em futuras tecnologias e no aprimoramento das que já existem. Este presente artigo pretende mostrar estas características, estruturas e desafios para a fabricação do borofeno.

Palavras chave: Borofeno, grafeno, materiais.

Abstract: Borophene is a two-dimensional (2D) material composed of a single layer of boron atoms. Making a brief comparison with graphene, the best-known 2D material today, we can see structural differences and similarities in the forms of synthesis of the materials and their characteristics. Although borophene has several difficulties in large-scale manufacturing, studies point to solutions, such as hydrogenated borophene. Offering some electronic, optical and mechanical characteristics that are even better than those of graphene, borophene has potential applications in future technologies and in improving existing ones. This article aims to show these characteristics, structures and challenges for the manufacture of borophene.

Keywords: Borophene, graphene, material.

¹antonio.narciso@aluno.uepb.edu.br

²jose.emanuel@aluno.uepb.edu.br

³everton@servidor.uepb.edu.br



¹antonio.narciso@aluno.uepb.edu.br
²jose.emmanuel@aluno.uepb.edu.br
³everton@servidor.uepb.edu.br

Introdução:

O estudo de nanomateriais tem sido amplamente explorado nas últimas décadas, ganhando ainda mais destaque com a descoberta do grafeno, em 2004, pelos físicos russos Andre Geim e Konstantin Novoselov. Como uma forma alotrópica do carbono, com propriedades extremamente interessantes e uma estrutura bidimensional (2D), o grafeno impulsionou as pesquisas em busca de outros materiais com propriedades semelhantes. Dentre os análogos ao grafeno, podemos citar os fosforeno, germaneno, arseneno, antimoneno e, o foco deste artigo, o borofeno [1].

Com o avanço dos estudos em nanomateriais nas últimas décadas, a busca por materiais com propriedades cada vez mais intrigantes, tanto do ponto de vista físico quanto aplicativo, tem sido uma fonte constante de pesquisa no campo da nanotecnologia. O grafeno, por exemplo, destacou-se como um dos primeiros materiais sintetizados, exibindo notáveis características, como excelente condutividade elétrica, baixa transferência de calor e propriedades supercondutoras. No entanto, o grafeno não está sozinho nesse cenário, pois a mesma abordagem poderia ser estendida a outros elementos, incluindo o boro.

O borofeno, assim como outros materiais 2D, apresenta as mesmas propriedades incomuns do grafeno, que vão desde as estruturas de bandas, que podem ser calibradas para algo específico, até altas mobilidades eletrônicas de férmions em sua rede. Folhas de borofeno em arranjos curvos e planares só foram relatadas quando foram cultivados em substrato de prata (Ag) e cobre (Cu) onde foi possível observar a formação de estruturas 2D. [2]

Síntese do Borofeno: O problema da estabilidade

O boro é um elemento químico presente na tabela periódica, sendo vizinho do carbono (C) e do berílio (Be). Formado por uma camada bidimensional de átomos de boro, o borofeno é um material alotrópo desse elemento e possui características muito interessantes, como propriedades mecânicas incomuns, propriedades supercondutoras, bem como características ópticas e de estrutura eletrônica atraentes para o desenvolvimento da nanoengenharia [2,3]. Este material mostrou-se comportar tanto como um metal ou não metal, e isto está a depender de como sua estrutura que possui uma vasta variedade de configurações está distribuída. Aqui vamos simplificar o borofeno para o esquema de camadas bidimensionais de átomos de boro.

De fato, as estruturas de Boro possuem uma grande semelhança com as estruturas de carbono, formando aglomerados planares, esféricos em forma de gaiola (como fulerenos) e nanotubos. Uma estrutura especialmente interessante é a de nitrato de boro hexagonal (h-BN). Que tem uma rede de favo de mel estável, e tem numerosos estados próximos à linha de energia do estado fundamental. Justamente por sua rede possuir hexágonos ociosos (HHs) em uma rede triangular de referência.

Análogo aos nanotubos de carbono, que podem ser construídos a partir de uma folha de grafeno fazendo com que ela se enrole construindo uma estrutura tubular, o borofeno também pode formar os nanotubos de boro, que, por sinal, são previstos que sejam metálicos. Durante a síntese do borofeno, aglomerados quase planares de boro tendem a remover ligações pendentes, formando modificações tubulares fechadas ou poliédricas. E isto é possível de ser observado graças a estudos sobre a estrutura do borofeno [1,5,6,10].

O borofeno foi previsto inicialmente em quatro estruturas: 2-Pmmn, β 12, χ 3 e fases de favo de mel [1, 13], veja Figura 1. E foram

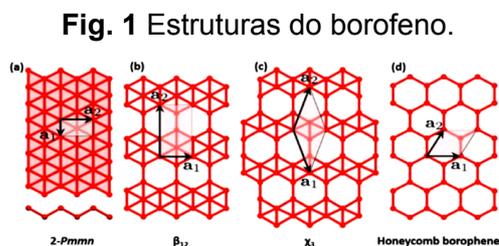
¹antonio.narciso@aluno.uepb.edu.br

²jose.emmanuel@aluno.uepb.edu.br

³everton@servidor.uepb.edu.br

sintetizadas em substrato de Ag sob condições bem controladas como de vácuo ultra-alto e altas temperaturas. E, devido a sua baixa dimensionalidade, notou-se grande diferença de energia entre o mesmo e o boro a granel. O borofeno é difícil de ser sintetizado.

Esse é um dos grandes problemas deste material, devido a sua deficiência em ser produzido e por ser apenas observado em vácuo especial, pois, quando colocado em contato com o ar, apresenta oxidação em questão de horas [2, 9, 10]. Ele possui outras configurações estruturais, que mostram ter características únicas, como, por exemplo, na fase 2-Pmmn, o borofeno possui uma estrutura curvada com as fileiras adjacentes de átomos de boro corrugando ao longo da direção em zigue-zague. Ao longo da outra direção plana (direção poltrona), a estrutura atômica não é ondulada. Curiosamente, os índices de Poisson ao longo ambas as direções no plano são negativas. Altamente anisotrópicas, o borofeno apresenta propriedades físicas diferentes para cada direção analisada [10].



Embora compartilhe semelhanças estruturais com o grafeno, devido à natureza deficiente de elétrons do boro, o borofeno na forma hexagonal é instável. Entretanto foi observado que quando colocado sobre um substrato onde fornece elétrons para compensar essa escassez, possibilita o borofeno ter uma maior estabilidade [1]. Uma forma de melhorar a estabilidade deste material é chamada de hidrogenação.

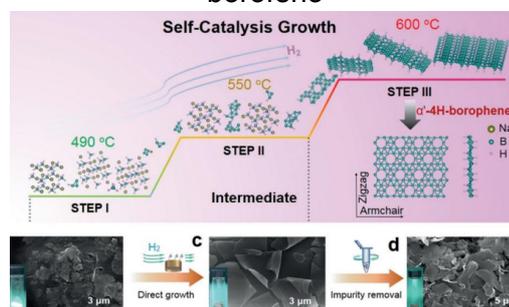
Uma Alternativa possível: Borofano

¹antonio.narciso@aluno.uepb.edu.br
²jose.emmanuel@aluno.uepb.edu.br
³everton@servidor.uepb.edu.br

Como dissemos, existe uma abordagem para modificar propriedades físicas e químicas de materiais 2D que é a hidrogenação. Esse processo pode fazer com que o determinado material possa ser observado com outros comportamentos que antes não era visto.

No caso do grafeno, quando é totalmente hidrogenado é observado que o intervalo de bandas vai de 1,2 eV em um lado para 3,5 eV para ambos os lados [3]. Com concentrações muito baixas de hidrogênio, o grafeno apresenta propriedades de ferromagnetismo induzido [13]. Já no caso do borofeno, que apresenta um grande problema de instabilidade [4], esse método é aplicado com a dispersão do elemento de boro inserido na superfície do substrato de metal nobre, como por exemplo, a prata e logo após expõe o nanomaterial ao hidrogênio. Veja Figura 2.

Fig. 2 Processo de hidrogenação do borofeno



O borofeno hidrogenado é chamado de Borofano e foi observado que a hidrogenação completa pode estabilizar a estrutura. Algumas características foram observadas na estrutura deste alótropo, como por exemplo, a detecção de um cone de Dirac em zona de Brillouin em que descrevem o transporte de elétrons e férmions de Dirac que são pequenas excitações de energia. Essa sequência de características apresentadas pelo Borofano, somado com o fato dele ter um bom desempenho mecânico, faz com que ele seja um ótimo candidato para aplicações em dispositivos nanoeletrônicos. Vale destacar que o

conhecimento de propriedades mecânicas é um parâmetro para ajustar propriedades físicas e químicas dos materiais. É visto que a estabilidade desse alótropo é maior, onde foi exposto ao ar por mais de dois meses e o mesmo não apresentou instabilidade relevante. Sua estabilidade térmica foi observada e demonstra ser melhor do que a do borofeno. [1, 2, 12, 13]

Desafios e potenciais aplicações

Um desafio é a produção em larga escala desse material, embora tenha uma série de técnicas de fabricação confiáveis, como, a esfoliação em fase líquida, clivagem mecânica e esfoliação eletroquímica, deposição química de vapor e epitaxia por feixe molecular. Essas são ainda bastante difíceis, caras, e produzem materiais com uma área superficial limitada [1]. Outro desafio é a contaminação ambiental e a transferência do borofeno para um substrato metálico. Implicando em uma dificuldade de aplicação em dispositivos elétricos.

Conclusão

As folhas de boro 2D são um material novo e promissor com uma ampla quantidade de potenciais aplicações. A pesquisa sobre este material está progredindo rapidamente, e espera-se que desempenhe um papel importante no desenvolvimento de novas tecnologias nos próximos anos.

Os extensivos estudos sobre o borofeno mostraram que além de se ter um material que oferece características eletrônicas, ópticas e mecânicas com desempenhos ainda maiores em alguns pontos ao se comparar com o grafeno, exibiram também fases do mesmo material e com maneiras de arranjos diferentes são observadas, como os borofenos B36 e o 2-pmmm [8].

Entretanto, enfrentamos ainda desafios em sua cultivação. Que ao se reagir com o ar oxida, limitando-se ao

cultivo em vácuo. Problema este que tem como alternativa a hidrogenação que dá origem ao Borofano (borofeno hidrogenado). Como o borofeno é material 2D mais leve e boa condutividade elétrica, ele pode ser utilizado para ser materiais anódicos para baterias de íons de lítio. Também é um material promissor para armazenamento de hidrogênio pelo elemento boro e serve como catalisador de alto desempenho [1,10].

Agradecimentos:

Agradecemos a CNPq e a UEPB pelo apoio financeiro.

Referências:

- [1] LI, C. et al. Two dimensional borophene nanomaterials: Recent developments for novel renewable energy storage applications. **Progress in solid state chemistry**, v. 71, n. 100416, p. 100416, 2023.
- [2] ZHANG, Z. et al. Elasticity, flexibility, and ideal strength of borophenes. **Advanced functional materials**, v. 27, n. 9, 2017.
- [3] WANG, Zhiqiang et al. High anisotropy of fully hydrogenated borophene. **Physical Chemistry Chemical Physics**, Royal Society of Chemistry, v. 18, n. 46, p. 31424–31430, 2016.
- [4] HOU, C. et al. Ultrastable crystalline semiconducting hydrogenated borophene. **Angewandte Chemie (International ed. in English)**, v. 59, n. 27, p. 10819–10825, 2020.
- [5] KUNSTMANN, J.; QUANDT, A. Broad boron sheets and boron nanotubes: *An ab initio* study of structural, electronic, and mechanical properties. **Physical review. B, Condensed matter and materials physics**, v. 74, n. 3, 2006.
- [6] LIN, T. et al. Nitrogen-doped mesoporous carbon of extraordinary capacitance for electrochemical energy

¹antonio.narciso@aluno.uepb.edu.br

²jose.emmanuel@aluno.uepb.edu.br

³everton@servidor.uepb.edu.br

storage. **Science (New York, N.Y.)**, v. 350, n. 6267, p. 1508–1513, 2015.

[7] MEDDEB, S. et al. **Conformational analysis of a family of potent antithrombotic peptides using high temperature molecular dynamics**. AIP Conference Proceedings. **Anais...AIP**, 1995.

[8]PIAZZA, Z. A. et al. Planar hexagonal B36 as a potential basis for extended single-atom layer boron sheets. **Nature communications**, v. 5, n. 1, 2014.

[9] TANG, H.; ISMAIL-BEIGI, S. Novel precursors for boron nanotubes: The competition of two-center and three-center bonding in boron sheets. **Physical review letters**, v. 99, n. 11, 2007.

[10] WANG, Z.-Q. et al. Review of borophene and its potential applications. **Frontiers of physics**, v. 14, n. 3, 2019.

[11] ZHAI, H.-J. et al. Hydrocarbon analogues of boron clusters — planarity, aromaticity and antiaromaticity. **Nature materials**, v. 2, n. 12, p. 827–833, 2003.

[12] ALVAREZ-QUICENO, J. C. et al. Oxidation of free-standing and supported borophene. **2d materials**, v. 4, n. 2, p. 025025, 2017.

[13] Wang, Z.-Q., Lü, T.-Y., Wang, H.-Q., Feng, Y. P., & Zheng, J.-C. (2019). Band gap opening in 8-*pmmn* borophene by hydrogenation. **ACS Applied Electronic Materials**, 1(5), 667–674.

¹antonio.narciso@aluno.uepb.edu.br

²jose.emmanuel@aluno.uepb.edu.br

³everton@servidor.uepb.edu.br