



## **MATERIAIS BIDIMENSIONAIS COMO POSSÍVEIS CANDIDATOS PARA ARMAZENAGEM DE HIDROGÊNIO**

Maiara Raissa Kretschmer Lopes, discente de graduação, Universidade Federal do Pampa,  
Campus Itaqui

Caroline Jaskulski Rupp, docente, Universidade Federal do Pampa, Campus Itaqui

e-mail: maiaralopes.aluno@unipampa.edu.br

As nanoestruturas bidimensionais, como as semicondutoras e as metálicas, apresentam diversas propriedades físicas, químicas e físico-químicas interessantes possibilitando aplicações em diferentes áreas, como a Física, a Química, a Engenharia de Materiais, a Medicina, a Odontologia, etc. Uma aplicação interessante no uso de nanoestruturas semicondutoras é na produção de energia renovável através do processo de fotocatalise da água. Neste processo utiliza-se um fotocatalisador (nanoestrutura), água e energia solar para quebrar a molécula de água em seus constituintes, ou seja, as moléculas de  $H_2$  e de  $O_2$ . O mecanismo da fotocatalise depende da estrutura eletrônica do semicondutor que é formada por uma banda de valência (BV) e uma banda de condução (BC). A diferença de energia entre estes dois níveis é conhecida como banda proibida de energia, ou *gap* de energia ( $E_g$ ). As nanoestruturas semicondutoras podem ser excitadas pelos fótons com energia igual à  $E = hv$  (onde  $h$  é a constante de Planck e  $v$  é a frequência) provenientes da luz solar que devem possuir energia igual ou superior ao *gap* de energia da nanoestrutura. Assim, elétrons da banda de valência são excitados para a banda de condução gerando buracos (do inglês, *holes*) na banda de valência. Os buracos gerados na banda de valência fazem a reação de oxidar a água gerando oxigênio molecular e cátions hidrogênio. Os cátions hidrogênio gerados interagem com os elétrons foto-excitados que encontram-se na banda de condução e são reduzidos a hidrogênio molecular. Este hidrogênio molecular que poderá ser usado nas células combustíveis para a geração de eletricidade sem a emissão de gás carbônico ( $CO_2$ ). A preferência é que a nanoestrutura apresente propriedades semicondutoras, mas, se a nanoestrutura for metálica, poderemos utilizar a dopagem substitucional (um átomo da rede é removido e um átomo de elemento diferente é introduzido) para que ocorra a abertura de um *gap* de energia. Dessa forma, neste trabalho realizamos uma pesquisa bibliográfica sobre algumas nanoestruturas bidimensionais que podem ser usadas para a armazenagem de hidrogênio. Como metodologia, utilizamos o Google Acadêmico para realizar a pesquisa bibliográfica a respeito destes materiais. Os critérios utilizados para a pesquisa foram: (a) utilizamos o nome da nanoestrutura bidimensional acompanhada da palavra hidrogênio; (b) escolhemos o intervalo de anos entre “2004-2021”, pois foi em 2004 que o grafeno foi obtido experimentalmente e, assim ocorreu, a partir disso, uma intensa pesquisa destes materiais; (c) selecionamos quatro nanoestruturas que possuem um grande número de trabalhos voltados para a interação e armazenagem de hidrogênio. Como resultados, podemos destacar, primeiramente, o Grafeno, que é um material formado por uma camada de átomos de carbono organizados em uma rede hexagonal. A sua descoberta foi em 2004 pelos pesquisadores Andre Geim e Konstantin Novoselov da Universidade de Manchester, resultando no Nobel de Física em 2010. O termo referente ao grafeno havia sido adotado ainda em 1962 sendo a junção de grafite com o sufixo “eno”, por causa da dupla ligação existente. Antes de ser

obtido experimentalmente, era utilizado de forma teórica para explicar a formação de outras formas alotrópicas do carbono, pois pensava-se que sua estrutura não seria estável. O segundo material pesquisado foi o siliceno, que consiste de uma camada monoatômica formada por átomos de silício arranjados em uma rede hexagonal que pode ter três possíveis configurações, sendo elas: *planar*, *high buckled* e *low buckled*. A vantagem do siliceno em relação ao grafeno é a sua compatibilidade com semicondutores que são baseados em silício em outras formas estruturais, podendo se integrar facilmente na atual indústria eletrônica. O terceiro material pesquisado foi o Germaneno que consiste em uma rede hexagonal de átomos de germânio, sendo um candidato natural para a nanotecnologia, pois possui compatibilidade e integração com a tecnologia à base de germânio. Apresenta-se na forma corrugada (*buckled*), sendo contrário do grafeno que apresenta forma planar. Por fim, o quarto material pesquisado foi o Borofeno que é formado por átomos de boro e em meados da década de 1990 foi proposto tendo diferentes estruturas que foram confirmadas experimentalmente em 2015. Todos os quatro materiais são bastante reativos em sua superfície para a adsorção de moléculas de hidrogênio. A reatividade pode ser aumentada quando estes materiais são dopados com metais alcalinos, metais alcalinos terrosos e metais de transição. Além disso, algumas dessas nanoestruturas tornam-se semicondutoras quando alguns átomos de suas estruturas são ligados em átomos de hidrogênio, formando, por exemplo, o Grafano, o Silicano, o Germanano e o Borofano. Dessa forma, temos que diversas nanoestruturas bidimensionais se mostram promissoras para o uso em armazenagem de hidrogênio, principalmente, se a reatividade de suas superfícies são aumentadas.

**Agradecimentos:** Este projeto está sendo realizado graças ao apoio financeiro e incentivo do PDA (Programa de Desenvolvimento Acadêmico da UNIPAMPA).

**Palavras-chave:** Nanoestruturas; Física; Hidrogênio.