

# GRAFENO

2

1

RQI - 4º trimestre 2019

O carbono é um dos elementos que mais fascinam os químicos por conta de suas formas alotrópicas (compostos contendo átomos de um só elemento químico, que se diferem pela atomicidade ou pela estrutura cristalina).

Afora o diamante e a grafita, encontradas na natureza, o número de alótropos aumentou nos últimos anos graças à descrição do grafeno, dos nanotubos de carbono, dos fulerenos e – descrito neste ano – o ciclooctadeca-1,3,5,7,9,11,13,15,17-nona ou ciclo[18]carbono [1].

O grafeno é na atualidade um dos mais promissores nanomateriais em estudo hoje devido às suas excelentes propriedades estruturais, eletrônicas, vibracionais, elétricas, ópticas, térmicas e mecânicas. Porém, são as propriedades eletrônicas que tornaram o grafeno uma estrela da ciência e da fronteira do conhecimento. Para sua produção, diversos métodos vêm sendo pesquisados; entretanto, tais métodos precisam ser aperfeiçoados e o escalonamento (*scale up*) ainda constitui um gargalo para pôr o grafeno em produção comercial.

Linus Pauling (1901-1994), no seu clássico *The Nature of the Chemical Bond*, publicado pela primeira vez em 1939, já discutia as propriedades do então hipotético grafeno.

Raciocinando com base no benzeno, tenta explicar o comprimento das ligações C–C. Em 1947, Philip Russel Wallace (1915-2006), ignorando completamente as interações entre elétrons, calculou a estrutura eletrônica do grafeno, obtendo o que é hoje a descrição aceita [2]. Convém lembrar que a grafita é constituída por um empilhamento de camadas de grafeno.

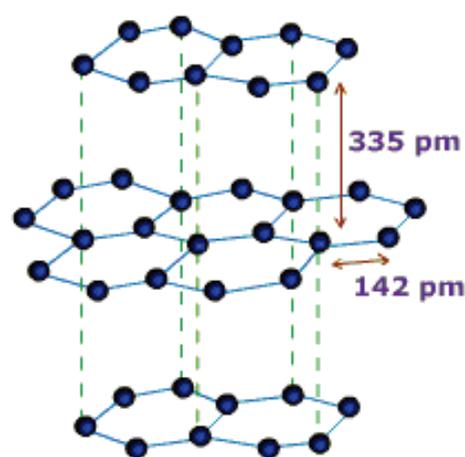


FOTO: Wikipedia

À esquerda, uma amostra de grafita: à direita, sua estrutura

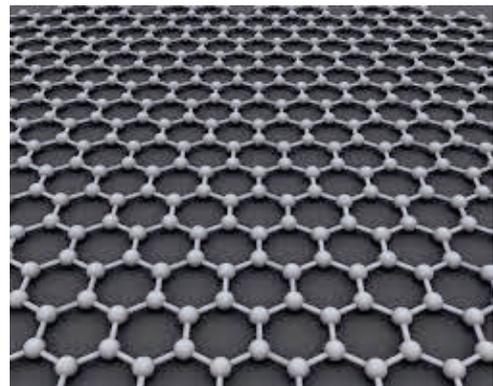
O termo “grafeno” foi proposto como uma combinação de grafita e o sufixo -eno por Hanns-Peter Boehm. [3] Foi ele quem descreveu as folhas de carbono em 1962. O termo grafeno reapareceu em 1987 para descrever folhas soltas de grafita como constituinte de compostos de intercalação de grafita (GIC); conceitualmente, um GIC é um sal

crystalino do intercalante e grafeno. O termo também foi usado nas descrições iniciais de nanotubos de carbono, e também em grafeno epitaxial e hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH) [4]. O grafeno foi oficialmente definido pela União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC) em 1994 como [5]: *“Uma única camada da estrutura gráfitica pode ser considerada como o último membro da série de naftalenos, antracenos, coronenos, etc., e o termo “grafeno” deve, portanto, ser utilizado para designar a camada individual de carbono em compostos de intercalação de grafita. O uso do termo “camada de grafeno” é também considerada para a terminologia geral dos carbonos.”*

Uma coisa é saber que um material faz sentido do ponto de vista químico, outra é fabricá-lo, isolá-lo e medir as suas propriedades. Isso só foi conseguido em 2004. Dois pesquisadores da Universidade de Manchester, Andre Geim e Konstantin Novoselov, conseguiram extrair o grafeno de uma amostra de grafita utilizando a técnica pioneira de esfoliação mecânica [6]. Por esse feito, em 2010, os dois dividiram o Prêmio Nobel de Física.

A estrutura do grafeno é composta de uma monocamada de átomos de carbono com

hibridização  $sp^2$  ligados e dispostos em um retículo bidimensional. O orbital  $s$  combina-se com dois orbitais  $p$  produzindo três orbitais planares formando ângulos de  $120^\circ$  [2]. Os orbitais  $p_x$  e  $p_y$  formam ligações  $\sigma$  com seus carbonos vizinhos, enquanto o orbital  $p_z$  não hibridizado se sobrepõe a outros orbitais  $p_z$  formando bandas de valência e de condução. O comprimento da ligação entre os átomos de carbono é de  $1.42 \text{ \AA}$  [7]. O grafeno pode ser descrito em termos de uma estrutura em 2D de átomos de carbono ligados em formato de hexágono chamado “favo de mel” [8]. A enorme estabilidade das ligações planares C–C da folha de grafeno e a quase ausência de defeitos nestes cristais dão a ele notáveis propriedades mecânicas. A presença de defeitos reduziria drasticamente a resistência dos materiais.



**A estrutura bidimensional do grafeno (“favo de mel”)**



**Andre Geim e Konstantin Novoselov, laureados com o Nobel de Física em 2010 por suas pesquisas com o grafeno**

A condutividade elétrica do grafeno é de até  $2104 \text{ S/cm}$  e a mobilidade eletrônica é de  $2105 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ , a qual é mais de 100 vezes maior que a do silício.

A condutividade térmica do grafeno a temperatura ambiente pode chegar a  $5000 \text{ W/m.K}$  (para comparação, o cobre é de  $400 \text{ W/m.K}$ ). Possui uma área superficial muito alta ( $2600 \text{ m}^2/\text{g}$ ), muito maior que as áreas de superfície da grafita e dos nanotubos de carbono ( $1300 \text{ m}^2/\text{g}$ ). No que tange às propriedades

ópticas, o grafeno tem quase total transparência, absorve uma fração de 2,3% da luz visível [8].

### Obtenção do grafeno

Apesar de o grafeno ser um material de estrutura relativamente simples, sua obtenção ainda precisa ser aprimorada. Atualmente, as barreiras que impedem o avanço na exploração do material estão ligadas às poucas formas de sintetizar o grafeno de forma econômica. O grafeno pode ser preparado por vários métodos [7,8]:

**Esfoliação mecânica.** Consiste no método mais simples. Envolve a retirada de camadas de grafita pirolítica altamente orientada (HOPG). A energia de interação entre as camadas de grafeno na estrutura grafítica é da ordem de grandeza das forças de Van der Waals. Esta força é considerada suficientemente fraca e pode ser facilmente atingida com o uso de uma fita adesiva para deslocar estas camadas. A técnica consiste em friccionar com uma ponta afiada de vidro micropilares de grafita e em seguida depositar o material obtido em um local desejado.

A folha de grafeno adere ao substrato por ter afinidade maior do que o próprio grafeno. A detecção pode ser observada através de microscopia ótica, pois há um contraste entre o substrato e a folha de grafeno.

Em uma versão mais elaborada é utilizado um microscópio de força atômica, cujo “cantilever” está acoplado a uma mola preparada para controlar a pressão e a força de cisalhamento na esfoliação da grafita.

Uma vantagem desta técnica é a possibilidade de escolher a localização da deposição do grafeno. Geralmente nesta técnica monocamadas de grafeno são depositadas em um substrato de Si/SiO<sub>2</sub>. A

principal desvantagem é que pode deixar resíduos de cola da fita adesiva na amostra. Por isso, é necessária uma etapa de tratamento térmico de redução para remover os resíduos orgânicos, em uma câmara aquecida contendo argônio e hidrogênio.

Esse método não produz uma quantidade eficaz comercialmente, sendo interessante apenas empregar o método em escala laboratorial.

**Esfoliação química.** Esta técnica enfraquece as forças de Van der Waals mediante inserção de reagentes no espaço entre as camadas (quebra das interações de *stacking* π-π - interações intermoleculares do tipo empilhamento). Esses reagentes promovem uma elevação de pressão com formação de gases, provocando o rompimento parcial da rede sp<sup>2</sup>-sp<sup>2</sup> gerando uma folha sp<sup>2</sup>-sp<sup>3</sup> de menor estabilidade. A rota mais rápida e segura para obtenção do óxido de grafita disperso é mergulhar a grafita em uma mistura de ácido sulfúrico, nitrato de sódio e permanganato de potássio a 45 °C por 2 h. O espaçamento entre as camadas chega a cerca de 0,70 nm e depende do teor de água em solução. Nesta técnica o material resultante é uma mistura mal definida de grafeno e óxido de grafeno.

A desvantagem deste método é a modificação química que ocorre na estrutura da grafita, com a conversão de grande fração da configuração carbono-carbono sp<sup>2</sup> em sp<sup>3</sup>. Como resultado, o óxido de grafeno mostra diferentes propriedades eletrônicas se comparado àquelas do grafeno obtido por esfoliação mecânica ou deposição química a vapor.

É preciso adicionar uma etapa de tratamento de redução química para tentar restaurar as propriedades específicas do grafeno.

**Deposição química em fase vapor (CVD, *chemical vapor deposition*).** Este método baseia-se na obtenção do grafeno diretamente sobre substratos sólidos, particularmente o cobre. Este metal, por ter pouca afinidade com o carbono e formar ligações fracas na superfície já que possui uma configuração eletrônica estável, além de outras características, se constitui num material propício para o crescimento do grafeno em sua superfície.

O processo é realizado depois de um tratamento térmico prévio da superfície do cobre (com argônio e hidrogênio), aumentando os grãos do metal e assim, proporcionando uma superfície mais uniforme. Após esse tratamento, um hidrocarboneto gasoso ou em fase vapor (metano, acetileno, etileno, benzeno etc.) é colocado no forno de CVD. O hidrocarboneto é, então, degradado a altas temperaturas e baixa pressão aderindo ao substrato presente. Após o crescimento da folha de grafeno, o forno é esfriado para a sua retirada.

É um método de baixo custo, já que o custo da amostra é relativamente baixo comparado a com outros processos de obtenção. Isso oferece uma alternativa atraente capaz de produzir grafeno em larga escala. Porém, o tamanho da folha de grafeno produzido é limitado pelo tamanho da superfície da amostra de cobre. Outra desvantagem está no transporte elétrico. Os pontos de nucleação do grafeno não apresentam uma orientação única, devido à baixa interação do grafeno com o substrato, provocando um espalhamento dos elétrons e por consequência um transporte elétrico de qualidade menor do que é visto em processos onde o grafeno é obtido por esfoliação do grafita.

**Crescimento de grafeno epitaxial em SiC (carbeto de silício).** Existem vários processos para obtenção do grafeno nas superfícies de

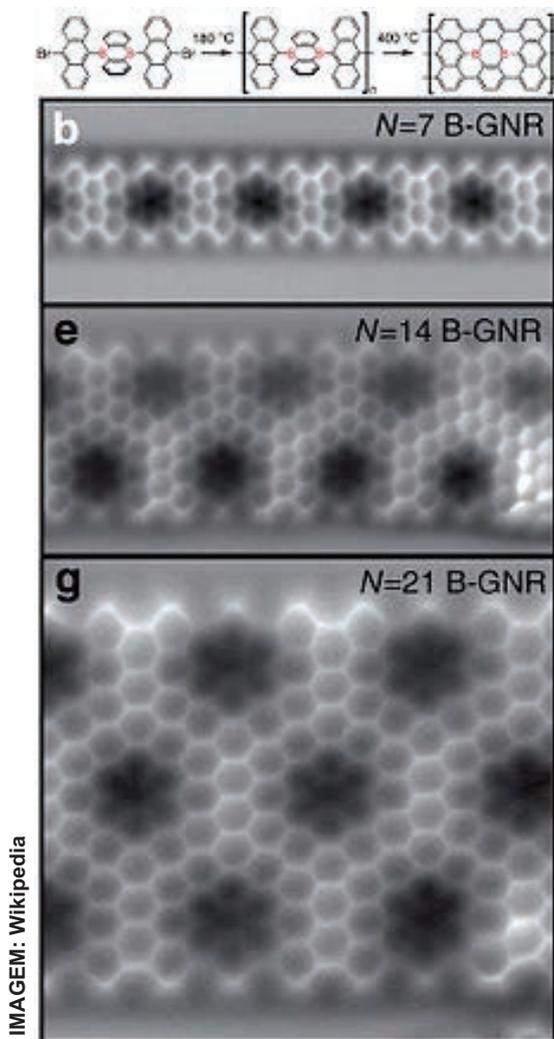
carbeto de silício (SiC). O método que permite os melhores resultados é o crescimento a pressão atmosférica. A amostra de SiC é colocado dentro de um forno à pressão atmosférica em ambiente contendo argônio. O forno é aquecido até temperaturas variando de 1500 °C a 2000 °C, levando à sublimação do silício do substrato. O carbono se mantém depositado sobre a superfície do SiC, onde se reorganiza para formar as monocamadas do grafeno.

Esse método apresenta bons resultados no que diz respeito à qualidade e produção do grafeno, mas o custo é muito elevado.

**Outras técnicas:** Recentemente, materiais baseados em grafeno foram fabricados com sucesso pela técnica de deposição por eletroforese e exibiram várias propriedades extraordinárias. Alguns materiais à base de grafeno preparados pelo processo de eletroforese incluem: filmes de grafeno, compósitos de grafeno não metálicos, compostos de nanopartículas à base de metalgrafeno e compostos de grafeno e polímeros [10].

### **Um alótropo polivalente**

A importância na investigação e aprofundamento das pesquisas sobre grafeno está baseada na tendência do mercado para os próximos anos para a produção em escala industrial de nanomateriais com aplicações em diversas áreas. As propriedades do grafeno oferecem à indústria de nanomateriais uma alternativa ao silício em aplicações tais como condutores transparentes, eletrodos flexíveis e transparentes para células de energia solar ou de cristal líquido, transistores de efeito de campo, sensores de pressão e ressonadores. O uso do grafeno se estende até a eletrônica, podendo ser usado em baterias que duram



Exemplo de nanomaterial: nanofibras de grafeno

mais, deixando-as leves e com carregamento muito mais rápido.

Mais recentemente, o interesse dos investigadores tem-se alargado a outros materiais, sejam derivados do grafeno como o óxido de grafeno, sejam outros materiais bidimensionais. Um exemplo, vindo do grupo da Universidade de Manchester, é o de agregados de membranas filtrantes à base de óxido de grafeno. Este material é extremamente poroso à água, mas, surpreendentemente, impermeável a qualquer gás, incluindo hélio! Aparentemente, as moléculas de água conseguem escoar em forma de uma monocamada molecular entre as camadas de grafeno; ou estas monocamadas bloqueiam a passagem de outras moléculas e átomos, ou, na ausência de água, os canais estreitam e fecham. Seja como for, moléculas de

água difundem através dessas membranas  $10^{10}$  vezes mais depressa do que o hélio [2].

O que torna o grafeno o centro de interesse de muitos grupos de pesquisa é a sua aplicabilidade em diversas áreas de estudo. Pode ser duzentas vezes mais resistente à tração que o aço, é leve, flexível, condutor de eletricidade e calor, transparente, um milhão de vezes menor que um fio de cabelo humano (para se ter uma ideia, 3 milhões de camadas de grafeno empilhadas têm altura de apenas 1 milímetro), e é um material com estrutura molecular bidimensional.

### Um assunto estratégico

Desde sua obtenção em 2004 a quantidade de patentes concedidas apresentou um crescimento extraordinário, superior a 20.000% entre 2004 e 2011. No Brasil existem mais de dez grupos de pesquisa atuantes na área de grafeno.

As reservas de grafita natural no país perfazem mais de 40% do total mundial. Com matéria-prima abundante e investimentos na área, o Brasil poderá ser um *player* relevante na cadeia produtiva do grafeno. Um dos projetos pioneiros para a produção de grafeno no mercado brasileiro está sediado em Minas Gerais. A iniciativa, que começou em junho de 2016, prevê investimentos da Companhia de Desenvolvimento Econômico de Minas Gerais (Codemig) da ordem de R\$ 21,3 milhões, em três anos, para desenvolver a tecnologia e implantar uma fábrica piloto no Brasil. Denominado MG Grafeno, o projeto é realizado em parceria com o Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear/Comissão Nacional de Energia Nuclear (CDTN/CNEN), por meio do Laboratório de Química de Nanoestruturas de Carbono (LQN), e com a Universidade Federal de Minas Gerais, por intermédio do Departamento de Física.

O processo gera dois nanomateriais: o grafeno e as nanoplacas de grafeno. Porém, as restrições orçamentárias impostas à CAPES em 2019 travaram o desenvolvimento do MG Grafeno. *Na Câmara dos Deputados, o tema é debatido desde 2017. Já na época pesquisadores apontaram a falta de investimento de pesquisas sobre grafeno na Comissão de Ciência e Tecnologia, Comunicação e Informática (CCTCI). Em 2019, as discussões continuam e até uma frente parlamentar para discutir o tema foi criada. A iniciativa do deputado Giovani Cherini (PR/RS) também envolve o nióbio e ficou conhecida como Frente do Nióbio e do Grafeno. Além disso, dois projetos de lei que citam o grafeno tramitam na Casa. Um deles estabelece a Política Nacional de Investimento em Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação dos Recursos Minerais. O outro limita a exportação e a exploração do grafeno e do nióbio [11].*

Grafeno é comercializado em mono ou multicamadas depositadas sobre diferentes substratos, tais como dióxido de silício, folhas de cobre e níquel e até em vidro ou poli(tereftalato de etileno), por micrometros quadrados ou em kits, segundo empresas como a “Graphene Supermarket” ou a “Graphene Industries”. Isso mostra a importância de se desenvolver meios de produzir o grafeno com um nível de qualidade e custos compatíveis com uma escala comercial.

### **O grafeno é tóxico?**

A toxicidade do grafeno tem sido amplamente debatida na literatura. A revisão mais abrangente sobre toxicidade do grafeno publicada por Lalwani e colaboradores [12], resume exclusivamente os efeitos *in vitro*, *in vivo*, antimicrobiano e ambiental e destaca os vários mecanismos de toxicidade do grafeno. Os resultados mostram que a toxicidade do

grafeno depende de vários fatores, como forma, tamanho, pureza, etapas do processamento pós-produção, estado oxidativo, grupos funcionais, estado de dispersão, métodos de síntese, via e dose de administração e tempos de exposição.

Uma pesquisa na Stony Brook University (Nova Iorque, EUA) mostrou que as nanofitas de grafeno, as nanoplateletas de grafeno e as nanocébolos de grafeno não são tóxicas em concentrações de até 50 µg/mL. Essas nanopartículas não alteram a diferenciação das células-tronco da medula óssea humana em relação aos osteoblastos (osso) ou adipócitos (gordura), sugerindo que em baixas doses as nanopartículas de grafeno são seguras para aplicações biomédicas. [13] Uma pesquisa da Universidade Brown (Providence, Rhode Island, EUA) descobriu que flocos de grafeno de 10 µm e poucas camadas são capazes de perfurar as membranas celulares em solução. Eles foram observados entrando inicialmente através de pontos agudos e irregulares, permitindo que o grafeno fosse inserido na célula. Os efeitos fisiológicos disso permanecem incertos, e esse campo permanece relativamente inexplorado.

### **Do grafeno ao plumbeno**

Na “onda” do grafeno, pesquisas conduzidas por vários grupos em diversas partes do mundo levaram à obtenção de novas formas alotrópicas análogas a ele para os demais elementos do grupo 14 da Tabela Periódica. Esses materiais são preparados em processos similares, as quais empregam alto vácuo e altas temperaturas para formar um depósito monoatômico sobre a superfície de um substrato.

É o caso do siliceno, formado por uma única camada atômica de átomos de silício. Ele traz consigo a promessa de uma nova onda de miniaturização e equipamentos eletrônicos mais

rápidos e com menor consumo de energia [14]. Teoricamente, o siliceno tem propriedades comparáveis às do grafeno. Seu grande atributo é a sua compatibilidade com o a eletrônica, já que é essencialmente o mesmo material (isto é, à base de silício, semicondutor) já usado atualmente no mercado, facilitando sua integração no processo produtivo. O siliceno poderá aumentar a velocidade e diminuir o gasto de energia das futuras gerações de chips de computador, caso as previsões sejam confirmadas por experimentos que estão em andamento em vários laboratórios no mundo [15].

Contudo, trabalhar com o siliceno é difícil porque, ao contrário do grafeno, que é plano, a camada monoatômica de silício tem um "relevo", com os átomos de silício permanecendo sob tensão (sua aparência lembra a de uma tela de

galinheiro, onde cada "nó" dessa tela é um átomo de silício). Isto explica porque pouco progresso foi feito na área desde que o siliceno foi isolado pela primeira vez em 2012.

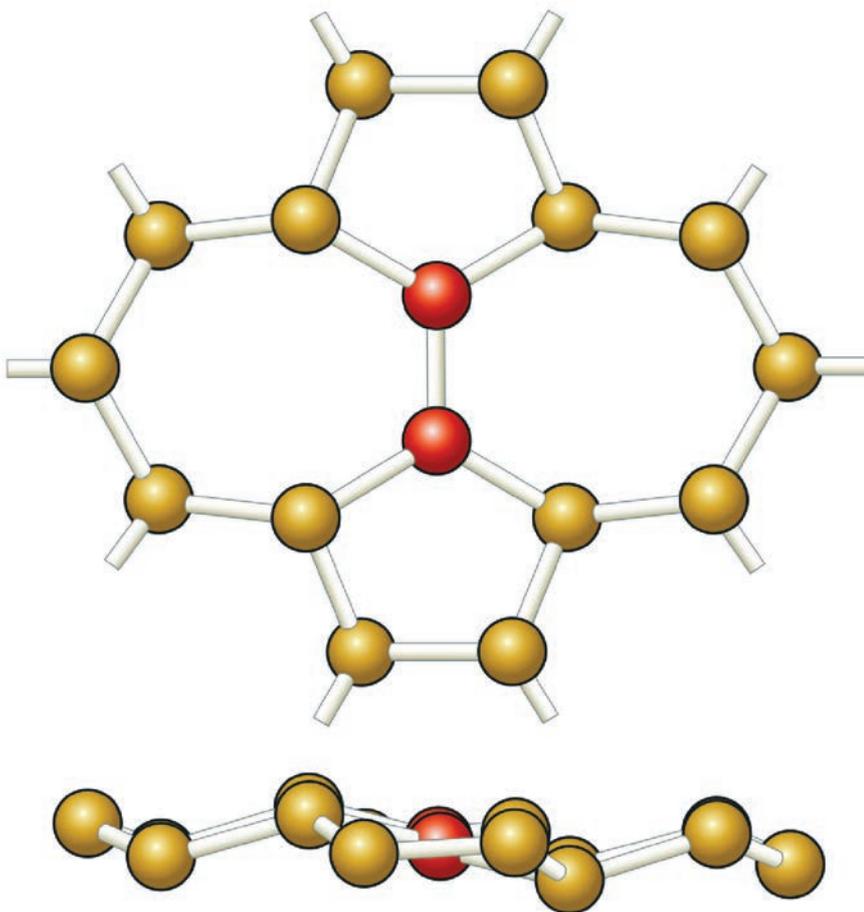
Em setembro de 2014, G. Le Lay e colaboradores relataram a deposição de uma camada monoatômica de germânio sobre uma superfície de ouro. Análises por microscopia de varredura de tunelamento (STM) revelaram uma estrutura de favo de mel quase plana [16].

As propriedades eletrônicas e ópticas do germaneno foram determinadas a partir de cálculos *ab initio*. Esse material revela propriedades eletrônicas adequadas à aplicação em dispositivos semicondutores e concepção de novos materiais [17].

O estaneno, preparado pela primeira vez em 2015, é composto por átomos de  $\alpha$ -Sn organizados em uma única camada biatômica hexagonal, de estrutura similar à do grafeno [18].

O estaneno vem sendo objeto de pesquisas pela sua potencial supercondutividade a temperatura ambiente, característica que poderia revolucionar e baratear a composição de circuitos integrados e, conseqüentemente, toda a tecnologia informatizada [19].

Prevê-se que o estaneno deve ser bastante reativo frente a poluentes atmosféricos como NO<sub>x</sub> e CO<sub>x</sub>, sendo capaz de retê-los e dissociá-los em baixas temperaturas. O último membro da família, o plumbeno, foi descrito em 2019 por pesquisadores indianos [20, 21], cuja estrutura também lembra a de um favo de mel, quase plano.



Representação do siliceno, não planar

## Referências

- [1] Kaiser, K.; Scriven, L. M.; Schluz, F.; Gawel, P.; Gross, L.; Anderson, H. L. An sp-hybridized molecular carbon allotrope, cyclo[18]carbon. *Science*, 2019, vol. 365, n. 6459, p. 1299-1301.
- [2] Santos, J. M. B. L. O grafeno. *Revista de Ciência Elementar*, 2014, vol. 2, n. 2, p. 1-6.
- [3] Schniepp, H. C.; Li, J. L.; McAllister, M. J.; Sai, H.; Herrera-Alonso, M.; Adamson, D. H.; Prud'homme, R. K.; Car, R.; Saville, D. A.; Aksay, I. A. Functionalized Single Graphene Sheets Derived from Splitting Graphite Oxide. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2006, vol. 110, n. 17, p. 8535–8539.
- [4] Simpson, C. D.; Brand, J. D.; Berresheim, A. J.; Przybilla, L.; Räder, H. J.; Müllen, K. Synthesis of a Giant 222 Carbon Graphite Sheet. *Chemistry*. 2002, vol. 8, n. 6, p. 1424–1429.
- [5] Boehm, H. P.; Setton, R.; Stumpp, E. Nomenclature and terminology of graphite intercalation compounds. *Pure and Applied Chemistry*, 1994, vol. 66, n. 9, p. 1893–1901.
- [6] Geim, A. K.; Novoselov, K. S. The rise of graphene. *Nature Materials*, 2007, vol. 6, n. 3, p. 183–191.
- [7] Jesus, K. A.; Freire, E.; Guimarães, M. J. O. C. Grafeno: Aplicações e Tendências Tecnológicas. *Revista de Química Industrial*, 2012, n. 737, p. 14-19.
- [8] Alencar, E.; Santana, D. Processos de obtenção do grafeno, suas aplicações e sua importância para o Brasil. *Revista Acadêmica Oswaldo Cruz*, 2017, ano 4, n. 16 ([http://revista.oswaldocruz.br/content/pdf/edicao\\_16\\_alencar\\_eduardo.pdf](http://revista.oswaldocruz.br/content/pdf/edicao_16_alencar_eduardo.pdf)); Geim, A. Graphene: Status and Prospects. *Science*, 2009, vol. 324, n. 5934, p. 1530-1534.
- [9] Wehle, G. H.; Horst, D. J.; Duvoisim, C. A.; Viera, R. A. Uma revisão geral sobre as propriedades, mecanismos de produção e aplicações do grafeno. VIII Congresso Brasileiro de Engenharia de Produção, Ponta Grossa, dezembro de 2018, 10 pp.
- [10] Ma, Y.; Han, J.; Wang, M.; Chenjia, X. S. Electrophoretic deposition of graphene-based materials: A review of materials and their applications. *Journal of Materiomics*, 2018, vol. 4, n. 2, p.108-120.
- [11] “Mais forte que diamante: corte de bolsas prejudica exploração de grafeno”. *Correio Brasiliense*, 30 de setembro de 2019.
- [12] Lalwani, G.; D'Agati, M.; Mahmud K. A.; Sitharaman, B. Toxicology of graphene-based nanomaterials. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 2016, vol. 105(B), p. 109–144.
- [13] Talukdar, Y.; Rashkow, J. T.; Lalwani, G.; Kanakia, S.; Sitharaman, B. The effects of graphene nanostructures on mesenchymal stem cells. *Biomaterials*, 2014, vol. 35, n. 18, p. 4863–4877.
- [14] José, D.; Datta, A. Structures and Chemical Properties of Silicene: Unlike Graphene. *Accounts of Chemical Research*, 2014, vol. 47, n. 2, p. 593-602.
- [15] Zhao, J.; Liu, H.; Yu, Z.; Quhe, R.; Zhou, S.; K. Rise of silicene: A competitive 2D material. *Progress in Material Science*, 2016, vol. 83, p. 24-151.
- [16] Ni, Z.; Qihang, L.; Tang, K.; Zheng, J.; Zhou, J.; Qin, R.; Gao, Z.; Yu, D.; Lu, J. Tunable bandgap in silicene and germanene. *Nano Letters*, 2012, vol. 12, n. 1, p. 113–118.
- [17] Dávila, M. E.; L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G. Le Lay. Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene. *New Journal of Physics*, 2014, vol. 16, 10 pp (doi:10.1088/1367-2630/16/9/095002).
- [18] Hu, F. F.; Wei, J. Epitaxial growth of two-dimensional stanene. *Nature Materials*, 2015, vol. 14, n. 10, p. 1020–1025.
- [19] Fadaie, M.; Shahtahmassebi, N.; Roknabada, M.R.; Gulseren. O. Investigation of new two-dimensional materials derived from stanene. *Computational Materials Science*, 2017, vol. 137, p. 208-214.
- [20] Yuhara, J.; He, B.; Le Lay, G. (2019). Graphene's latest cousin: plumbene epitaxial growth on a nano water cube. *Advanced Materials*, 2019, vol. 31, n. 27 (<https://doi.org/10.1002/adma.201901017>).
- [21] Das, D. K.; Sarkar, J.; Singh, S. K. Effect of sample size, temperature and strain velocity on mechanical properties of plumbene by tensile loading along longitudinal direction: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, 2019, vol. 151, p. 196-203.