

Borofeno: de la simulación a la aplicación, una perspectiva teórica Borophene: from simulation to application, a theoretical perspective

L. A. Zárate Hernández ^a, E. A. Ramírez-Paredes ^a, J. M. Vázquez-Pérez ^b, C. Z. Gómez-Castro ^b,
R. L. Camacho-Mendoza ^{a,*}, J. Cruz-Borbolla ^{a,*}

^a Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42186, Pachuca, Hidalgo, México.

^b SECIHTI, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42186, Pachuca, Hidalgo, México.

Resumen

El borofeno, miembro más reciente de los materiales bidimensionales (2D), representa uno de los descubrimientos más prometedores de la ciencia de los materiales. Este material de boro presenta una estructura y propiedades electrónicas excepcionales que podrían superar al grafeno: metalicidad intrínseca, alta movilidad electrónica, notable conductividad térmica y polimorfismo estructural. Desde su síntesis experimental en 2015, ha mostrado un gran potencial en aplicaciones relacionadas con almacenamiento y gestión de energía, catálisis, biomedicina y electrónica de alto desempeño. Esta revisión presenta una visión integral a los métodos de simulación aplicables al borofeno, explicando desde fundamentos teóricos hasta los métodos computacionales que han acelerado su estudio. Finalmente, se exploran las aplicaciones que pueden resultar prometedoras y las perspectivas futuras de este material revolucionario.

Palabras Clave: borofeno, materiales 2D, propiedades electrónicas, almacenamiento de energía, DFTB.

Abstract

Borophene, the most recent member of the two-dimensional (2D) material family, represents one of the most promising discoveries in materials science. This boron-based material exhibits exceptional structural and electronic properties that may even surpass those of graphene, such as intrinsic metallicity, high electron mobility, remarkable thermal conductivity, and structural polymorphism. Since its experimental synthesis in 2015, borophene has shown great potential in applications related to energy storage and management, catalysis, biomedicine, and high-performance electronics. This review provides a comprehensive overview of the simulation methods applicable to borophene, covering theoretical foundations and computational approaches that have accelerated its study. Finally, it discusses the most promising applications and outlines future perspectives for this revolutionary material.

Keywords: borophene, two-dimensional materials, electronic properties, energy storage, DFTB.

1. Introducción

En la primera década del siglo XXI, la investigación en materiales bidimensionales (2D) conocidos como “Xenes”, tuvo un notable impulso, ya sea mediante el enfoque de estudios teóricos o bien experimentales, debido a las características físicas, químicas, electrónicas y ópticas que presentan, confiriéndoles aplicaciones en campos como biomedicina, generación, producción y almacenamiento de energía, creación de materiales de nueva generación, entre otras. (Pal & Nandi, 2024).

Desde la síntesis del grafeno al inicio de este siglo, no se había destacado otro material 2D hasta la obtención del borofeno, su éxito radica en la combinación de características

que lo distinguen como su comportamiento metálico, su movilidad electrónica, la excelente conductividad térmica y módulos mecánicos que superan incluso al grafeno. Estas características hacen del borofeno un candidato prometedor, para revolucionar múltiples áreas, desde la electrónica avanzada hasta aplicaciones biomédicas (Pal & Nandi, 2024), las cuales han sido recientemente presentadas en una revisión sistemática en el transcurso de una década por Anju & Shiju (2025).

Es en este contexto que a partir de la obtención en 2015 del borofeno, en combinación con las herramientas computacionales y software especializado se incrementó el interés en predecir y elucidar estructuras de este material eficientes a fin de que puedan ser la pauta para realizar

*Autor para la correspondencia: jacruz@uaeh.edu.mx

Correo electrónico: luis_zarate@uaeh.edu.mx (Luis A. Zárate-Hernández), earapa123@gmail.com (Emanuel A. Ramírez-Paredes), josemanuel_vasquez@uaeh.edu.mx (José M. Vázquez-Pérez), carlos_gomez@uaeh.edu.mx (Carlos Z. Gómez-Castro), rosa_camacho@uaeh.edu.mx (Rosa L. Camacho-Mendoza), jacruz@uaeh.edu.mx (Julián Cruz-Borbolla)

investigación en nuevas rutas de síntesis, aplicaciones y materiales. Por lo que en este trabajo se presenta un panorama general de la simulación y modelado computacional del borofeno, así como las tendencias y desafíos futuros en este campo.

2. Desarrollo histórico

El desarrollo histórico computacional del borofeno comenzó en la década de 1990 con las primeras predicciones computacionales, cuando a partir de la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) se evidenció la viabilidad del boro como material 2D desde los cálculos *ab initio*. Posteriormente en el inicio del nuevo siglo y el avance de los métodos computacionales, fue factible trabajar a detalle en algunas interrogantes relacionadas con el comportamiento del material, por ejemplo, el análisis de los orbitales desde el enfoque de la densidad de estados, siendo este y otros resultados los que establecieron las bases para una síntesis exitosa del borofeno en 2015.

Hasta este punto parecería que a 10 años desde la síntesis del borofeno, la investigación para este material 2D había concluido, no obstante, a continuación, se presenta una revisión detallada de su evolución desde la perspectiva teórica a través de la cual se evidencia que existen líneas de investigación por explorar, como la implementación de nuevas metodologías, alternativas a los métodos basados en la DFT, que permitan predicciones de gran calidad a un costo computacional menor, como la parametrización desde el enfoque del método de enlace fuerte (*Tight-Binding*) basado en la teoría del funcional de la densidad (DFTB).

2.1. El borofeno un material 2D

Del análisis de la tabla periódica se observa la proximidad del boro respecto del carbono, por lo que, partiendo de la premisa en el comportamiento químico de los elementos, se observan similitudes en los orbitales de valencia de ambos, siendo este hecho la pauta para analizar las semejanzas en formación de enlaces, reactividad, geometría molecular y propiedades de los materiales.

Considerando esta similitud entre ambos átomos, se analiza de manera análoga los cúmulos de grafito y boro. En este contexto las primeras predicciones computacionales aparecieron en 1997 evolucionando de cúmulos hasta redes hexagonales similares a un panal (Figura 1) y concluyendo con propuestas de estructuras bidimensionales de borofeno, estos resultados establecieron las bases para la síntesis experimental exitosa que vendría años después. (Tang & Ismail-Beigi, 2007; Wang et al, 2019, Ou et al., 2021)

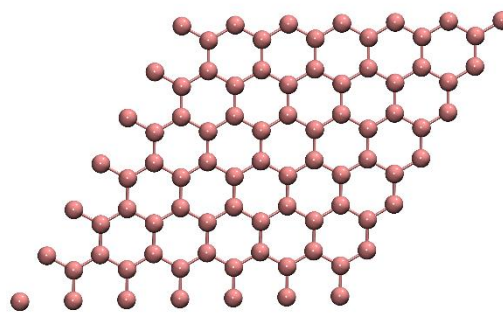


Figura 1: Estructura tipo *panal de abejas* del Borofeno, estructura construida en Vesta (Momma, 2008) y renderizada utilizando VMD (Humphrey, 1996).

En los últimas décadas a partir del surgimiento de instrumentos de medición con resoluciones nanométricas, fue factible visualizar superficies a nivel atómico, realizar la manipulación de átomos y consecuentemente caracterizar y sintetizar materiales, entre los que destacan los bidimensionales (2D), siendo el MoS₂ uno de los primeros materiales estudiados, seguido en el año 2004 de la obtención del grafeno y recientemente en 2015 se sintetiza el borofeno (Mannix et al., 2015), este descubrimiento validó décadas previas de estudios teóricos, del material que ha sido catalogado desde hace diez años como el miembro más reciente de la familia de los “Xenes” (Figura 2) (Wang et al., 2019; Adekoya, 2024; Anju & Shiju, 2025).

El auge y vigencia de estos materiales 2D reside en las aplicaciones de cada uno en diferentes campos de la ciencia, siendo la principal similitud entre ellos la capacidad de formar una o pocas capas atómicas con enlaces fuertes en el plano y fuerzas débiles del tipo de Van der Waals entre capas. Mientras que algunas de las diferencias se observan en su estructura cristalina, por ejemplo, en el disulfuro de molibdeno es hexagonal tipo sándwich (S-Mo-S), para grafeno es hexagonal similar a un panal, mientras que para borofeno se tienen varias fases corrugada o plana, las cuales dependen de las condiciones y tipo de síntesis (Feng *et al.*, 2016). Respecto de la estabilidad química el grafeno se considera el más estable en el aire, también presenta la movilidad electrónica más alta y es extremadamente resistente y flexible. Aparentemente el grafeno pudiese ser el mejor de los tres materiales sin embargo el band gap diferente a cero del MoS₂ le confiere aplicaciones particulares como en transistores. Y el borofeno al ser el de más reciente obtención, presenta un gran potencial en la investigación tanto teórica como experimental ya que las vacancias espaciales naturales de su estructura proporcionan cavidades fraccionarias de nanómetros proporcionando un sitio interesante para estudiar su reactividad química. (Novoselov et al, 2004; Wang 2014; Anju & Shiju, 2025).

3. Aplicaciones Revolucionarias

El interés científico por los materiales innovadores surge no solo por su naturaleza novedosa, sino también por la identificación de propiedades que los hacen útiles en diversas áreas, especialmente cuando dichas aplicaciones responden a necesidades relevantes para la sociedad. El borofeno es un ejemplo importante de este fenómeno al mostrarse como un material prometedor en varios campos de la ciencia.

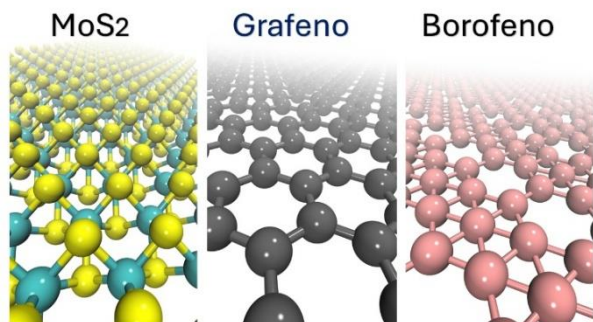


Figura 2: Evolución materiales bidimensionales 2D estructura construida en Vesta (Momma, 2008) y renderizada utilizando VMD (Humphrey, 1996).

El borofeno sobresale como sistema eficiente para el almacenamiento y la liberación de energía, lo que le otorga relevancia en el desarrollo de tecnologías energéticas avanzadas. Su potencial en este ámbito se explica por sus peculiares propiedades físicas y químicas, como la notable capacidad de carga y la facilidad para liberar energía bajo condiciones controladas.

Además de su papel en el sector energético, el borofeno brinda características ópticas y electrónicas sobresalientes. Estas cualidades abren la puerta a aplicaciones valiosas en el mundo de la electrónica, permitiendo el diseño de dispositivos y sensores de nueva generación que aprovechan su elevada movilidad electrónica y su estructura bidimensional.

Por último, el borofeno permite vislumbrar nuevas posibilidades en áreas como la catálisis y la medicina. Su versatilidad y la facilidad para ser funcionalizado lo convierten en una opción idónea para perfeccionar procesos catalíticos, así como para el desarrollo de métodos terapéuticos innovadores y sistemas de liberación controlada de fármacos en aplicaciones biomédicas.

3.1 Almacenamiento y Gestión de Energía: Baterías y Supercapacitores

El borofeno surgió como un material de gran relevancia en diversas áreas científicas y tecnológicas, su movilidad electrónica excepcional y diversidad de fases cristalinas, han permitido su reconocimiento como un material versátil para la construcción de sensores, su uso en catálisis, en biomedicina y, de forma destacada, en tecnologías energéticas, impulsando un rápido crecimiento en la investigación y el desarrollo de estas (Kumar *et al.*, 2024).

En almacenamiento, conservación y gestión de energía, se reconoce como un excelente ánodo, de muy alta capacidad para baterías de iones ($\text{Li}^+/\text{Na}^+/\text{Mg}^{2+}/\text{Al}^{3+}$), y con barreras de difusión bajas; esto debido a sus propiedades, baja densidad, alta conductividad y abundancia de sitios activos, derivada de su arquitectura con vacancias y crestas (Wang *et al.*, 2019; Shang *et al.*, 2018; Ou *et al.*, 2021; Kumar *et al.*, 2024). Particularmente, en el desarrollo de baterías de última generación, el borofeno exhibe capacidades teóricas sobresalientes para baterías de iones metálicos, superando a otros materiales con cifras que alcanzan los 9917 mAh/g para baterías de aluminio, 6611 mAh/g para magnesio, 2341 mAh/g para sodio y 1860 mAh/g para litio (Wang *et al.*, 2019).

En el campo de los supercapacitores avanzados, tanto el borofeno como sus alótropos han demostrado capacitancias específicas de hasta 400 F/g, cuadruplicando los valores observados en el grafeno, y ofrecen ventanas de potencial que oscilan entre 1.2 y 3.0 V (Zhan *et al.*, 2016), además es un material prometedor para almacenamiento de hidrógeno mediante decoración metálica; con estas características el borofeno y sus derivados responden a la presión mundial en el desarrollo de materiales energéticos verdes y eficientes como alternativas a los recursos energéticos actuales (Wang *et al.*, 2019; Shang *et al.*, 2018; Ou *et al.*, 2021; Kumar *et al.*, 2024).

3.2 Dispositivos Electrónicos y Sensores de Nueva Generación

De forma paralela, la electrónica avanzada ha encontrado en el borofeno una plataforma ideal para el diseño de arquitecturas de dispositivos innovadores, como los transistores de efecto de campo $\text{B}_8\text{H}_4\text{-FET}$, que, con canales de 5 nm, logran corrientes de estado encendido de 1194 $\mu\text{A}/\mu\text{m}$ y relaciones $I_{\text{ON}}/I_{\text{OFF}}$ superiores a 3000, cumpliendo así con los estándares internacionales de rendimiento (Hou *et al.*, 2020; Kumar *et al.*, 2024).

El borofeno también se introduce en el desarrollo de sensores de nueva generación. Su estructura laminar, alta movilidad electrónica y amplia área superficial permiten la detección ultrarrápida y selectiva de diversos analitos, desde gases tóxicos hasta biomoléculas, lo que posibilita aplicaciones ópticas en los rangos ultravioleta, infrarrojo y visible (Wang *et al.*, 2019; Ou *et al.*, 2021; Kumar *et al.*, 2024). En particular, en el sector de biosensores, el borofeno se distingue por su alta sensibilidad para detectar gases peligrosos como formaldehído, monóxido de carbono, óxidos de nitrógeno y amoníaco, mediante cambios observables en sus propiedades de transporte, contribuyendo así de manera significativa a la prevención de accidentes por fugas (Ou *et al.*, 2021; Wang *et al.*, 2019).

3.3 Catálisis, Medicina y Perspectivas Futuras

En lo referente a catálisis avanzada, el borofeno y el borofano han sido ampliamente investigados en sus diferentes formas alotrópicas como catalizadores para procesos químicos más eficientes y sostenibles. Por ejemplo, las láminas α y β_{12} de borofeno han demostrado superar al platino en la reacción de evolución de hidrógeno, con valores de energía libre de adsorción de hidrógeno ($\Delta G_{\text{H}^+}^a$) de 0.0023 eV y 0.04 eV, respectivamente, en comparación con los -0.09 eV reportados para el platino (Liu *et al.*, 2018; Kumar *et al.*, 2024) siendo los valores más cercanos a cero los que tienen mejor actividad catalítica. Además, en la reacción de evolución de oxígeno, el borofeno dopado con nanopartículas de plata y soportando Co_3O_4 ha exhibido una estabilidad cíclica sobresaliente durante 2000 ciclos, presentando pendientes de tafel de solo 62 mV dec^{-1} (Saad *et al.*, 2021; Kumar *et al.*, 2024). También, Han *et al.* (2022) estudiaron por primeros principios la oxidación de CO sobre $\text{Fe}@ \chi_3\text{-borofeno}$, identificando rutas Eley–Rideal (E-R) y trimolecular E-R (TER) con barreras bajas de 0.49 eV (E-R) y 0.57 eV (TER), mostrando rutas de reacción eficientes.

El borofeno presenta un potencial significativo en aplicaciones médicas, especialmente en la innovación para la creación o mejora de equipos y medicamentos, como la generación de cápsulas que permiten transportar principios activos de manera más eficiente como nano-transportadores (Kumar *et al.*, 2024). Entre sus aplicaciones más destacadas se encuentran las terapias avanzadas, donde la eficiencia de conversión fototérmica del 42.5%, superior al fósforo negro, junto con su excelente estabilidad, permiten posicionar a este material como un candidato ideal para el tratamiento del cáncer (Ou *et al.*, 2021). A esto se suma la posibilidad de liberar fármacos en regiones tumorales específicas durante la quimioterapia, lo cual contribuye a reducir de forma significativa los efectos secundarios asociados a estos tratamientos. El borofeno resulta idóneo para estas aplicaciones gracias a su superficie específica ultra alta, que facilita la carga del fármaco y permite el anclaje de grupos funcionales para la modificación dirigida. Además, se ha reportado una capacidad de carga del 114% para doxorubicina, con liberación controlada por pH y efectos fototérmicos, lo cual, combinado con recubrimientos de polietilenglicol (PEG) para prolongar la circulación en el organismo, optimiza la eficacia terapéutica (Ou *et al.*, 2021).

Finalmente, el borofeno ha permitido el avance de la bioimagen multimodal, que posibilita la obtención de diferentes imágenes de manera simultánea, mejorando así la precisión diagnóstica (Ou *et al.*, 2021). En cuanto a la terapia de captura neutrónica de boro (BNCT), la alta pureza de este elemento ofrece un potencial único para el tratamiento de tumores cerebrales, ya que los efectos fototérmicos del borofeno facilitan una mejor penetración de la barrera hematoencefálica (Kumar *et al.*, 2024). Finalmente, los nanogeneradores triboeléctricos basados en borofeno logran densidades de potencia de salida de hasta 18 W m^{-2} , lo cual los vuelve viables para aplicaciones en dispositivos biomédicos portátiles y sistemas de recolección de energía (Kumar *et al.*, 2024).

4. Métodos Computacionales del Borofeno

Obtener y estudiar al borofeno y sus derivados de forma experimental no es tarea sencilla. La estructura del material y sus propiedades son muy sensibles a las condiciones de síntesis, lo que hace que su crecimiento controlado sea un verdadero reto. Entre los métodos de síntesis más exitosos se encuentra la *epitaxia de haz molecular* (MBE), que permite depositar boro muy puro sobre superficies metálicas, como Ag(111), a temperaturas cercanas a 700°C (Feng *et al.*, 2016). Gracias a esto, se puede lograr un control preciso de la estructura cristalina y formar dominios extensos y bien ordenados. Otras técnicas, como la deposición física de vapor (PVD) o la deposición química de vapor (CVD), han ampliado las posibilidades de síntesis, e incluso han permitido obtener nuevas fases, como la $\gamma\text{-B}_{28}$ sobre cobre (Tail *et al.*, 2015), lo que representa un avance importante hacia una producción más escalable. También se han explorado métodos top-down, como la exfoliación micromecánica, sonoquímica o solvotermal (Casanova-Chafer & Bittencourt, 2025; Chung *et al.*, 2024; Zhang *et al.*, 2020), que han permitido aislar láminas de borofeno sin necesidad de un sustrato metálico.

A pesar de estos logros, los experimentos siguen enfrentando varios obstáculos: las fases obtenidas no siempre son estables y las condiciones de crecimiento son muy específicas. En este punto, los cálculos teóricos juegan un papel importante ya que mediante métodos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) y aproximaciones más ligeras como DFTB, es posible explorar cómo cambian la estructura, la energía y la reactividad del borofeno sin las limitaciones del experimento. Con esto no se quiere decir que el punto de vista teórico no es un estudio trivial: pero si es un complemento que permite estudiar la gran variedad de configuraciones posibles y el carácter metálico de los sistemas esto debido a que los métodos teóricos requieren un tratamiento riguroso para asegurar la confiabilidad de los resultados y también requiere modelos que logren un equilibrio entre precisión y costo computacional.

4.1. Cálculos *ab initio*

La teoría de los funcionales de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés de *Density Functional Theory*) se ha empleado extensivamente en estudios teóricos de primeros principios para investigar las propiedades electrónicas y estructurales del borofeno. Las primeras evidencias experimentales y teóricas que nos aproximaron a la viabilidad del boro como material 2D fueron estudios de pequeños cúmulos de boro planos que se mostraron estables (Zhai *et al.*, 2003; Piazza *et al.*, 2014; Wang, 2016).

En el estudio de Chen *et al.* (2022), se efectuaron cálculos detallados de la estructura de bandas y la densidad de estados (DOS) —incluyendo la descomposición de los orbitales— para sistemas de borofeno con dos capas, tanto libres como soportadas sobre la superficie de Cu(111). Los resultados evidenciaron un claro comportamiento metálico, ya que múltiples bandas cruzan el nivel de Fermi. Así mismo, el análisis del DOS revela que los orbitales p del boro, especialmente el orbital p_z , presentan una contribución dominante en la región próxima al nivel de Fermi; esto puede atribuirse a que los electrones localizados en los orbitales p_z son los principales responsables de las señales observadas en las imágenes de microscopía de efecto túnel (STM), dado que estos orbitales se extienden perpendicularmente al plano y facilitan la transferencia de electrones entre la muestra y la punta del STM. Los cálculos fueron realizados empleando el software VASP 5.4.4, utilizando el funcional de intercambio y correlación GGA-PBE, con correcciones de dispersión de Grimme D3 para describir las interacciones de Van der Waals en la interfaz.

Como se mencionó anteriormente, los métodos computacionales han permitido examinar teóricamente las estructuras de bandas y características electrónicas del borofeno, incluyendo estructuras alotrópicas como por ejemplo 2-Pmmn, $\beta 12$, $\chi 3$ y panal de abeja, así como derivados funcionalizados como borofeno hexagonal intercalado con Be (Wang *et al.*, 2019; Aswathi & Baskaran, 2023). Estos enfoques computacionales han proporcionado conocimientos

fundamentales para el diseño de materiales 2D con propiedades electrónicas ajustables mediante técnicas de ingeniería molecular como dopaje, funcionalización y heteroestructuración (Chowdhury *et al.*, 2019). No obstante, el costo computacional asociado a estos estudios, realizados generalmente al más riguroso nivel DFT alcanzable, es considerable. Por otro lado, el escalamiento de cálculos DFT con respecto al tamaño del sistema es en muchas ocasiones prohibitivo, lo que ha llevado al surgimiento de parametrizaciones específicas para borofeno en el marco de la aproximación DFTB para mejorar la escalabilidad y factibilidad de cálculos cada vez más retadores y demandantes, que incluyen el estudio de la adsorción de sustratos sobre materiales 2D, la evaluación de efectos de agentes “decoradores” de la superficie, el análisis de defectos en los materiales, entre otros.

4.2 Ventajas y desventajas de DFTB respecto a DFT

La aproximación DFTB se deriva de la DFT, sin embargo, introduce una serie de parametrizaciones que permite reducir significativamente el costo computacional manteniendo una buena precisión en los resultados, de manera particular en materiales con cierto carácter metálico (Koskinen & Mäkinen, 2009; Koskinen *et al.*, 2006). En comparación con DFT, DFTB ofrece ventajas cuando se requieren tamaños de sistema grandes, tiempos de simulación largos o exploraciones estructurales y electrónicas ya que facilita las búsquedas de estructuras y conformaciones, así como tendencias de propiedades electrónicas generales, también puede ser útil para realizar un “pre-cribado” para posteriormente calcular los sistemas con DFT. Además, por su formalismo cercano al de DFT, DFTB es una herramienta idónea para el desarrollo metodológico (p. ej., láminas periódicas en 2D con vacío, implementación de efectos de dispersión de Grimme D3, TD-DFTB), proporcionando una alternativa a DFT económica y al alcance de investigadores, docentes y estudiantes interesados que puedan efectuar estos cálculos en hardware menos especializado.

La disponibilidad de métodos computacionales eficientes ha acelerado significativamente la investigación en borofeno respecto de la transferibilidad y eficiencia, esto es (Grundkötter-Stock *et al.*, 2012):

- a) Efectiva transferibilidad entre sistemas moleculares y periódicos
- b) Precisión comparable a DFT para geometrías y vibraciones
- c) Eficiencia computacional superior para sistemas grandes

Por ejemplo, Grundkötter-Stock y colaboradores (2012) compararon un mismo conjunto de sistemas de boro —desde clústeres B_2H_6 y B_{12} hasta láminas y nanotubos periódicos— calculados con DFT/PBE y con SCC-DFTB. Los resultados mostraron desviaciones menores al 5 % en longitudes y ángulos de enlace y diferencias de energía de cohesión promedio cercanas a 1 eV por átomo, manteniendo las mismas tendencias estructurales y electrónicas. En el caso del boro romboédrico, el gap electrónico obtenido por DFTB (1.84 eV)

fue incluso más cercano al valor experimental (≈ 1.9 eV) que el predicho por DFT (1.45 eV). Estas coincidencias confirman que DFTB puede reproducir la descripción de DFT con un costo computacional notablemente menor, conservando la fidelidad estructural y la tendencia en propiedades electrónicas clave, lo que lo convierte en una alternativa robusta para el estudio teórico del borofeno y sus derivados.

Sin embargo, en otros trabajos se han reportado discrepancias significativas, especialmente en propiedades mecánicas. Por ejemplo, en un estudio sistemático de borofeno usando DFTB (Ukkola, 2020) se encontró que los radios de Poisson calculados con DFTB tenían un error del 150% respecto a DFT. Para el borofeno β_{12} los cálculos DFTB predijeron que $v_x=0.44$ y $v_y=0.40$ mientras que DFT dio como resultado que $v_x=0.15$ y $v_y=0.17$. Los módulos de Young fueron igualmente problemáticos ya que DFTB arrojó que $C_x=172$ N/m y $C_y=199$ N/m para β_{12} contra $C_x=189$ N/m y $C_y=210$ N/m predicho por DFT. Para el borofeno χ_3 las diferencias fueron aún mayores (DFTB: $C_x=127$ N/m, $C_y=131$ N/m; DFT: $C_x=196$ N/m, $C_y=208$ N/m). Aún más problemático es que DFTB predijo una resistencia a la flexión negativa para borofeno β_{12} lo que no es físicamente posible. Además, predijo que las nanocintas β_{12} son más estables cuando están flexionados lo cual contradice los resultados de DFT que muestran que son más estables en su forma plana.

Por otra parte, en un trabajo muy reciente, Kolosov y Glukhova generaron una nueva parametrización para boro 1D y 2D (Kolosov y Glukhova, 2025). A diferencia de las parametrizaciones generales *matsci* (Frenzel *et al.*, 2005) y *Borg* (Grundkötter-Stock *et al.*, 2012), la parametrización de Kolosov se enfocó en nanotubos y nanoláminas de boro. Los resultados mostraron una mejora dramática respecto a las parametrizaciones previas para las diferentes estructuras de borofeno. El caso más notable es el de borofeno χ_3 donde la nueva parametrización predice correctamente una estructura plana mientras que *matsci* y *borg* destruyen completamente la planaridad.

En general se encontró en los artículos revisados que, aunque DFTB reproduce correctamente las propiedades electrónicas como la estructura de bandas para las diferentes formas de boro, las propiedades mecánicas y estructurales son mucho más difíciles de reproducir.

Es un hecho que DFTB no es un método *ab initio* y su transferibilidad depende de la calidad de los parámetros; los parámetros electrostáticos tipo Hubbard-U y la “parte complicada” se encapsula en el potencial repulsivo (interacciones de corto alcance y las partes de intercambio-correlación efectivas) cuya obtención y ajuste constituyen la parte más laboriosa de la parametrización (Koskinen & Mäkinen, 2009). Por ello, aunque DFTB permite llevar a cabo cálculos con reproducibilidad y eficiencia superiores en sistemas considerados exigentes, es de gran importancia que las parametrizaciones sean validadas ya sea utilizando datos de DFT y/o experimentales (Tabla 1) (Grundkötter-Stock *et al.*, 2012; Koskinen & Mäkinen, 2009).

4.3 DFTB aplicado a borofeno

El borofeno, sus fases y derivados ($\beta 12$, $\chi 3$ y variantes hidrogenadas como el borofano) exhiben una física electrónica rica (p. ej., conos de Dirac anisotrópicos) y, a la vez, celdas unitarias compactas con distancias B–B cortas (~ 1.66 Å) y múltiples contribuciones de los orbitales p a las bandas de valencia y conducción (Ou *et al.*, 2021). En este contexto, los modelos de Hamiltoniano efectivos de baja energía y los ajustes tipo Slater–Koster (no ortogonales y hasta terceros vecinos) han sido particularmente útiles para capturar dispersiones y velocidades de Fermi, como se realizó para el borofano y diversas fases de borofeno (Grundkötter-Stock *et al.*, 2012; Nakhaee *et al.*, 2018).

Tabla 1. Comparación entre el método DFTB y DFT

Método	Ventajas	Limitaciones	Característica importante
DFTB	<ul style="list-style-type: none"> Bajo costo computacional. Buena precisión en materiales metálicos. Eficiente para sistemas grandes y simulaciones largas. Útil para pre-cribado. 	No es ab initio, depende de la calidad de los parámetros	Requiere validación y ajuste de parámetros (Hubbard-U, potencial repulsivo) usando datos DFT o experimentales
DFT	<ul style="list-style-type: none"> Alta precisión en geometrías y vibraciones. Más Confiable 	Costo computacional alto para sistemas grandes	Sirve como referencia para validar DFTB

La literatura de la aplicación de DFTB en el estudio del borofeno ha experimentado un crecimiento significativo, lo que ha permitido analizar con mayor precisión las bandas electrónicas, el transporte cuántico y las características mecánicas en sistemas 2D (Zhu & Zhang, 2018; Horri & Faez, 2019; Abbasi & Faez, 2023). El método DFTB recurre a matrices H y S generadas a partir de integrales direccionales ajustadas mediante referencias *ab initio*; además, incorpora un término repulsivo efectivo y electrostática autocohérente, lo que posibilita el cálculo exhaustivo de energías totales y fuerzas, más allá del análisis exclusivo de bandas electrónicas (Koskinen & Mäkinen, 2009).

La parametrización implica (1) definir pseudo-átomos confinados (controlados por el potencial V_{conf} y los radios de confinamiento r_0), (2) ajustar el parámetro atómico de Hubbard-U que se relaciona con la respuesta de carga, y (3) — el más importante — el potencial repulsivo de corto alcance $V_{\text{rep}}(\mathbf{R})$ mediante un ajuste robusto a fuerzas/energías de un conjunto de estructuras de referencia (no basta un diagrama de enlace de un dímero) tanto estructuras tipo clúster como estructuras periódica y con la finalidad de garantizar que las fuerzas tengan un comportamiento continuo se imponen radios de corte y suavizados (Koskinen & Mäkinen, 2009) para ajustar el potencial de repulsión.

El desarrollo de herramientas computacionales especializadas ha sido fundamental para entender las propiedades únicas del

boro y predecir nuevas estructuras. La parametrización del método SCC-DFTB (Self-Consistent Charge Density-Functional-based Tight-Binding) para sistemas de boro representa un avance significativo en este sentido se hace énfasis en las características y precisión (Grundkötter-Stock *et al.*, 2012).

El método DFTB para sistemas de boro ha demostrado una precisión sobresaliente en diversos aspectos tanto moleculares como periódicos. En el caso de las geometrías moleculares, el error cuadrático medio (RMS) es aproximadamente del 1% en comparación con resultados obtenidos mediante el funcional B3LYP y la base 6-31G(d), lo que evidencia un alto grado de confiabilidad en la descripción estructural. Respecto a las frecuencias vibracionales, el error RMS alcanza el 7.17%, superando en exactitud a los métodos semiempíricos tradicionales y acercándose a los estándares de referencia DFT. Para las estructuras periódicas, las desviaciones RMS en las longitudes de enlace oscilan entre el 1% y el 5% cuando se comparan con cálculos realizados con DFT, lo que refuerza la robustez y viabilidad de la parametrización para abordar sistemas extendidos (Grundkötter-Stock *et al.*, 2012).

5. Conclusión

El borofeno, destaca por su alta movilidad de carga y conductividad anisotrópica, así como su estructura con vacancias y crestas, además destaca por su baja densidad y gran área superficial, esto le otorga el potencial de consolidarse como un material de gran importancia dentro de la ciencia de materiales bidimensionales. Estas propiedades se podrían aprovechar debido a su notable capacidad de interacción con iones y moléculas, lo que se traduce en su posibilidad de impactar en áreas como en almacenamiento y conversión de energía, catálisis, detección química y aplicaciones biomédicas avanzadas.

Sabemos que hacen falta investigaciones interdisciplinarias, que combinen los avances, en síntesis, caracterización, modelado y aplicaciones tecnológicas, para transformar las promesas del borofeno en soluciones concretas. Se sabe que combinar sinérgicamente enfoques experimentales y teóricos impulsa el progreso en la investigación así se podría maximizar el aprovechamiento de los usos potenciales tanto del borofeno como de nuevos materiales.

En este contexto, el desarrollo de herramientas computacionales especializadas y eficientes, como la parametrización DFTB para sistemas basados en boro, ha desempeñado un papel fundamental al acelerar la investigación en este campo. No obstante, aún es necesario intensificar los esfuerzos dirigidos a optimizar dichas parametrizaciones, con el fin de alcanzar resultados comparables al nivel de teoría DFT. Esto resulta especialmente relevante, ya que metodologías como DFTB han comenzado a superar diversas limitaciones técnicas asociadas a métodos más robustos, como la propia DFT, al ofrecer una excelente relación entre precisión y costo computacional. Si se logran parametrizaciones DFTB con la robustez suficiente, sería posible diseñar nuevas estructuras y aplicaciones sin depender de equipos de cómputo de alto rendimiento, manteniendo al mismo tiempo una base

teórica sólida para comprender las propiedades distintivas del borofeno y anticipar nuevas oportunidades en su aprovechamiento científico y tecnológico.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo por el apoyo institucional y las facilidades proporcionadas para la realización de este trabajo.

Los autores agradecen a la SECIHTI por el apoyo brindado a través del proyecto CBF-2025-G-568 para el desarrollo de la investigación.

Los autores agradecen el apoyo otorgado a la SECIHTI a través del programa social SNII.

Referencias

- Abbasi, R., & Faez, R. (2023). DFT-Based Tight-binding model of vdW bilayer χ_3 and β_{12} borophene. *Materials Chemistry and Physics*, 307, 128136. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2023.128136>
- Adekoya, G. J., Adekoya, O. C., Muloiwa, M., Sadiku, E. R., Kupolati, W. K., & Hamam, Y. (2024). Advances in borophene: synthesis, tunable properties, and energy storage applications. *Small*, 20(40), 2403656. <https://doi.org/10.1002/sml.202403656>
- Anju, R. S., & Shiju, N. R. (2025). On the 10th anniversary of borophene: Birth, growth and status quo. *Materials Today*, (Vol. 88). <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2025.03.028>
- Aswathi, K. P., & Baskaran, N. (2023). First-principles study of beryllium substituted borophene as an anode material for Li/Na-ion batteries. *Computational Condensed Matter*, 37, e00845. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2023.e00845>
- Casanova-Chafer, J., & Bittencourt, C. (2025). Straightforward Synthesis of Borophene Nanolayers for Enhanced NO₂ Detection in Humid Environments. *ACS Applied Electronic Materials*, 7(6), 2305–2312. <https://doi.org/10.1021/acsaem.4c02003>
- Chowdhury, S., Majumdar, A., & Jana, D. (2019). Electronic and optical properties of the supercell of 8-Pmmn borophene modified on doping by H, Li, Be, and C: a DFT approach. *Applied Physics A*, 125(5). <https://doi.org/10.1007/s00339-019-2649-y>
- Chung, J.-Y., Yuan, Y., Mishra, T. P., Joseph, C., Canepa, P., Ranjan, P., Sadki, E. H. S., Gradečak, S., & Garaj, S. (2024). Structure and exfoliation mechanism of two-dimensional boron nanosheets. *Nature Communications*, 15(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-024-49974-8>
- Feng, B., Zhang, J., Zhong, Q., Li, W., Li, S., Li, H., Cheng, P., Meng, S., Chen, L., & Wu, K. (2016). Experimental realization of two-dimensional boron sheets. *Nature Chemistry*, 8(6), 563–568. <https://doi.org/10.1038/nchem.2491>
- Frenzel, J., Oliveira, A. F., Duarte, H. A., Heine, T., & Seifert, G. (2005). Structural and Electronic Properties of Bulk Gibbsite and Gibbsite Surfaces. *Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie*, 631(6–7), 1267–1271. <https://doi.org/10.1002/zaac.200500051>
- Goto, T., Ito, S., Shinde, S. L., Ishibiki, R., Hikita, Y., Matsuda, I., Hamada, I., Hosono, H., & Kondo, T. (2022). Carbon dioxide adsorption and conversion to methane and ethane on hydrogen boride sheets. *Communications Chemistry*, 5(1). <https://doi.org/10.1038/s42004-022-00739-8>
- Grundkötter-Stock, B., Bezugly, V., Kunstmann, J., Cuniberti, G., Frauenheim, T., & Niehaus, T. A. (2012). SCC-DFTB parametrization for boron and boranes. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 8(3), 1153–1163. <https://doi.org/10.1021/ct200722n>
- Han, J.-W., Bian, W.-Y., Zhang, Y.-Y., & Zhang, M. (2022). Fe@ χ_3 -borophene as a promising catalyst for CO oxidation reaction: A first-principles study. *Frontiers in Chemistry*, 10. <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.1008332>
- Horri, A., & Faez, R. (2019). Tight-binding model for the electronic properties of buckled triangular borophene. *Micro & Nano Letters*, 14(9), 992–994. <https://doi.org/10.1049/mnl.2019.0023>
- Hou, C., Tai, G., Hao, J., Sheng, L., Liu, B., & Wu, Z. (2020). Ultrastable Crystalline Semiconducting Hydrogenated Borophene. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(27), 10819–10825. <https://doi.org/10.1002/anie.202001045>
- Humphrey, W., Dalke, A., & Schulten, K. (1996). VMD: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, 14(1), 33–38. [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5)
- Jiang, H. R., Shyy, W., Liu, M., Ren, Y. X., & Zhao, T. S. (2018). Borophene and defective borophene as potential anchoring materials for lithium–sulfur batteries: a first-principles study. *Journal of Materials Chemistry A*, 6(5), 2107–2114. <https://doi.org/10.1039/c7ta09244j>
- Kolosov, D. A., & Glukhova, O. E. (2025). Single-walled and multi-walled boron nanotubes: Novel DFTB parameterization and electrical conductivity calculations. *Solid State Communications*, 403, 115984. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2025.115984>
- Koskinen, P., & Mäkinen, V. (2009). Density-functional tight-binding for beginners. *Computational Materials Science*, 47(1), 237–253. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2009.07.013>
- Koskinen, P., Häkkinen, H., Seifert, G., Sanna, S., Frauenheim, T., & Moseler, M. (2006). Density-functional based tight-binding study of small gold clusters. *New Journal of Physics*, 8, 9–9. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/8/1/009>
- Kumar, P., Singh, G., Bahadur, R., Li, Z., Zhang, X., Sathish, C. I., Benzigar, M. R., Kim Anh Tran, T., Padmanabhan, N. T., Radhakrishnan, S., Janardhanan, J. C., Ann Biji, C., Jini Mathews, A., John, H., Tavakkoli, E., Murugavel, R., Roy, S., Ajayan, P. M., & Vinu, A. (2024). The rise of borophene. *Progress in Materials Science*, 146, 101331. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2024.101331>
- Liu, C., Dai, Z., Zhang, J., Jin, Y., Li, D., & Sun, C. (2018). Two-Dimensional Boron Sheets as Metal-Free Catalysts for Hydrogen Evolution Reaction. *The Journal of Physical Chemistry C*, 122(33), 19051–19055. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05859>
- 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. (2015). Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs. *Science*, 350(6267), 1513–1516. <https://doi.org/10.1126/science.aad1080>
- Momma, K. and Izumi, F. (2008). VESTA: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis. *J. Appl. Cryst.*, 41: 653–658. <https://doi.org/10.1107/S0021889808012016>
- Nakhaee, M., Ketabi, S. A., & Peeters, F. M. (2018). Tight-binding model for borophene and borophane. *Physical Review B*, 97(12). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.125424>
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., & Firsov, A. A. (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306(5696), 666–669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- Ou, M., Wang, X., Yu, L., Liu, C., Tao, W., Ji, X., & Mei, L. (2021). The emergence and evolution of borophene. *Advanced Science*, 8(12), 2001801. <https://doi.org/10.1002/adv.202001801>
- Pal, P., & Nandi, M. (2024). Recent Advances in Syntheses and Emerging Applications of 2D Borophene based Nanomaterials with a Focus on Supercapacitors. *Dalton Transactions*. <https://doi.org/10.1039/D4DT02573C>
- Piazza, Z. A., Hu, H.-S., Li, W.-L., Zhao, Y.-F., Li, J., & Wang, L.-S. (2014). Planar hexagonal B36 as a potential basis for extended single-atom layer boron sheets. *Nature Communications*, 5(1). <https://doi.org/10.1038/ncomms4113>
- Saad, A., Liu, D., Wu, Y., Song, Z., Li, Y., Najam, T., Zong, K., Tsiakaras, P., & Cai, X. (2021). Ag nanoparticles modified crumpled borophene supported Co3O4 catalyst showing superior oxygen evolution reaction (OER) performance. *Applied Catalysis B: Environmental*, 298, 120529. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2021.120529>
- Shang, J., Ma, Y., Gu, Y., & Kou, L. (2018). Two dimensional boron nanosheets: synthesis, properties and applications. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20(46), 28964–28978. <https://doi.org/10.1039/c8cp04850a>
- Tai, G., Hu, T., Zhou, Y., Wang, X., Kong, J., Zeng, T., You, Y., & Wang, Q. (2015). Synthesis of Atomically Thin Boron Films on Copper Foils. *Angewandte Chemie*, 127(51), 15693–15697. <https://doi.org/10.1002/ange.201509285>
- Tai, G., Xu, M., Hou, C., Liu, R., Liang, X., & Wu, Z. (2021). Borophene Nanosheets as High-Efficiency Catalysts for the Hydrogen Evolution Reaction. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 13(51), 60987–60994. <https://doi.org/10.1021/acsami.1c15953>
- Tang, H., & Ismail-Beigi, S. (2007). Novel Precursors for Boron Nanotubes: The Competition of Two-Center and Three-Center Bonding in Boron Sheets. *Physical review letters*, 99(11), 115501. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.115501>

- Ukkola, E. (2020). Modeling of borophene with density-functional tight-binding, Master's Thesis, University of Jyväskylä., <https://jyx.jyu.fi/bitstreams/f408a7b5-66d5-4ead-9b75-8d5e3e7a0cb2/download>
- Wang, L.-S. (2016). Photoelectron spectroscopy of size-selected boron clusters: from planar structures to borophenes and borospherenes. *International Reviews in Physical Chemistry*, 35(1), 69–142. <https://doi.org/10.1080/0144235x.2016.1147816>
- Wang, Z. M. (2014). *MoS₂: Materials, physics, and devices*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-02850-7>
- Wang, Z. Q., Lü, T. Y., Wang, H. Q., Feng, Y. P., & Zheng, J. C. (2019). Review of borophene and its potential applications. *Frontiers of Physics*, 14(3), 33403. <https://doi.org/10.1007/s11467-019-0884-5>
- Zhai, H.-J., Kiran, B., Li, J., & Wang, L.-S. (2003). Hydrocarbon analogues of boron clusters — planarity, aromaticity and antiaromaticity. *Nature Materials*, 2(12), 827–833. <https://doi.org/10.1038/nmat1012>
- Zhan, C., Zhang, P., Dai, S., & Jiang, D. (2016). Boron Supercapacitors. *ACS Energy Letters*, 1(6), 1241–1246. <https://doi.org/10.1021/acsenenergylett.6b00483>
- Zhang, F., She, L., Jia, C., He, X., Li, Q., Sun, J., Lei, Z., & Liu, Z.-H. (2020). Few-layer and large flake size borophene: preparation with solvothermal-assisted liquid phase exfoliation. *RSC Advances*, 10(46), 27532–27537. <https://doi.org/10.1039/d0ra03492d>
- Zhu, L., & Zhang, T. (2018). Optimized tight binding parameters for single layer honeycomb borophene. *Solid State Communications*, 282, 50–54. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2018.08.003>