

# Hansel Argyll Gordillo Ruiz; hanselgordillo@ciencias.unam.mx Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México

Fecha de entrega: 08 de junio de 2018

#### Resumen

El grafeno es un material relativamente nuevo que está revolucionando distintas industrias por sus diversas propiedades. En un principio se creía era imposible obtener una cristal bidimensional debido a varios estudios teóricos sobre la inestabilidad de estos. Sin embargo, en 2004 Geim y Novoselov consiguieron aislar una monocapa de grafeno y después obtuvieron el premio nobel de física en 2010 por sus diversos estudios sobre este material. En este trabajo se analizan las distintas propiedades del grafeno y sus aplicaciones.

### I. Introducción.

La monocapa de átomos de carbón empaquetada en una red cristalina de estructura hexagonal de 2 dimensiones es conocido como grafeno (figura 1). Fue llamado así por Boehm, Setton y Stumpp en 1944. Es altamente conductivo en la dirección paralela a la capa de grafeno debido al comportamiento metálico en el plano, mientras que posee poca conductividad en la dirección perpendicular a las capas debido a la débil interacción de Van der Walls entre ellas.



Figura 1: Imagen cualitativa de la estructura hexagonal del grafeno.

El grafeno es el material más delgado conocido por el hombre con un átomo de espesor, y a su vez es extremadamente duro, cerca de 200 veces más resistente que una hipotética lámina de acero del mismo espesor. El grafeno es un excelente conductor de calor y electricidad y posee interesantes porpiedades de absorción. Es ciertamente un material con ilimitado potencial para la integración en casi cualquier industria.

Por muchas décadas, el ailsamiento de una monocapa de grafeno parecía imposible, teniendo en cuenta, entre otras cosas, estudios teóricos en la estabilidad termodinámica de los cristales bidimensionales. En 2004 se dió un paso importante por un grupo de investigación guiado por Geim y Novoselov, quienes reportaron un método para la creación de una sola capa de grafeno en un sustrato de óxido de silicio, 6 años después, Novoselov y Geim fueron galardonados con el premio nobel en física.

#### II. Propiedades.

### II.1. Propiedades electrónicas.

El grafeno es un semimetal que posee traslape nulo entre la banda de conducción y la banda de valencia, es decir, no existe un margen entre la banda de conducción y la de valencia, con una alta conductividad eléctrica. Los átomos de carbono poseen 6 electrones, 4 de ellos en la capa mas lejana, en el arreglo del grafeno, cada átomo de carbono está conectado con otros 3 átomos de carbono en el plano de 2 dimensiones (El enlace es de tipo covalente, a través de enlaces  $\sigma$  de orbitales  $Sp^2$ ), dejando un electrón libre disponible en la tercera dimensión para condución electrónica. Estos electrones con alta movilidad son llamados pi  $(\pi)$  y se encuentran localizados arriba y abajo de la placa de grafeno. Estos orbidales pi se superponen y ayudan a mejorar los enlaces de carbono en el grafeno. Las propiedades electrónicas del grafeno están determinadas por las propiedades ligantes o antiligantes de estos orbitales pi.

En el punto de Dirac en grafeno, los electrones y huecos poseen cero masa efectiva. La relación energía-momento es lineal para bajas energía cerca de las 6 esquinas individuales de la zona de Brillouin. Estos electrones y huecos son conocidos como fermiones de Dirac, o Graphinos, y las 6 esquinas de la zona de Brillouin se conocen como puntos de Dirac. Debido a la densidad de estados nula en los puntos de Dirac, la conductividad electrónica es algo baja. Sin embargo, el nivel de fermi puede ser cambiando mediante dopaje para crear un material que es mejor conduciendo electricidad que, por ejemplo, el cobre.

Los electrones del grafeno se mueven parecido a los fotones debido a la masa nula. Estos portadores de carga son capaces de viajar distancias sub-micrométricas sin dispersarse, este fenómeno es conocido como transporte balístico.

### II.2. Propiedades mecánicas.

Como mencionaba anteriormente, esl grafeno es un material extremadamente duro, debido a la fuerza de sus 0.142 nm de longitud en los enlaces de carbono. Posee un

tensión de rotura de 130 gigapascales, comparado a los 400 megapascales para el acero. A pesar de ser realmente duro, es también bastante ligero con 0.77 miligramos por metro cúbico (1 metro cúbico de papel es 1000 veces más pesado).

Lo que hace particularmente especial es quu el grafeno también posee propiedades elásticas. En 2007, fueron realizados tests de fuerza atómica microscópicas (AFM) en hojas de grafeno que fueron suspendidas sobre cavidades de dióxido de silicio. Se encontró que las hojas de grafeno (con un grosor de 2 a 8 Nm) tenían constante de resorte en la región de 1-5 N/m y un modulo de Young de 0.5 TPa.

## II.3. Propiedades ópticas.

El grafeno puede absorber 2.3% de luz blanca, esta es una cantidad grande considerando que posee únicamente un grosor de un átomo. Agregando otra capa de grafeno incrementa la cantidad de luz blanca absorbidad aproximadamente por el mismo valor 2.3%. El máximo de absorción, está en 268 nm (figura 2).

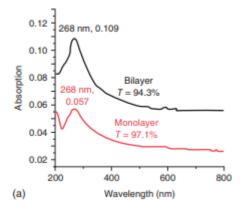


Figura 2: El espectro de absorción de una monocapa y bicapa de grafeno, la transmitancia es medida a 550 nm [5]

Las medidas del índice de refracción y del coeficiente de absorción para una longitud de onda de 670 nm son 3.135 y 0.897, respectivamente [3].

#### III. Aplicaciones del grafeno

El grafeno es un material que puede ser combinado con otros elementos (incluyendo gases y metales) para producir diferentes materiales con varias propiedades superiores. Investigadores de todo el mundo continuan constantemente investigando sobre el grafeno para describir sus diversas propiedades y posibles aplicaciones, las cuales incluyen:

■ Touchscreens (para pantallas LCD u OLED)

- Transistores
- Chips de computadora
- Baterías
- Supercapacitores
- Secuenciación de ADN
- Filtros de agua
- Antenas
- Celdas solares
- Spintronics (una nueva ciencia de computadoras y chips de memoria que están basados en el espín en lugar de la carga).

#### IV. ESTRUCTURA CRISTALINA.

Para obtener la base de vectores que conforman la red de Bravais, observamos la figura 3, donde los átomos A y B son iguales pero para el estudio de la red estudiaremos a los átomos A.

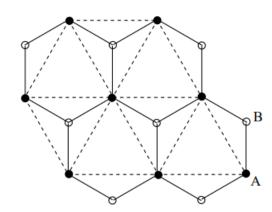


Figura 3: Las líneas sólidas indican la estructura cristalina del grafeno. La base contiene 2 átomos, compuestos por A y B. La distancia entre 2 átomos más cercanos es  $a=0.246~\mathrm{nm}$ 

La red de Bravais es la misma correspondiente a la red formada por todos los átomos A. Podemos obtener la distancia más corta entre 2 átomos A viendo que:

$$\sin(60^\circ) = \frac{d/2}{a} \tag{1}$$

Con d la distancia más corta entre los átomos A. Por lo que tenemos:

$$d = \sqrt{3}a\tag{2}$$

Siguiendo con la figura 1, obtenemos los vectores de la base:

$$\vec{a_1} = \sqrt{3}(1,0) \tag{3}$$

$$\vec{a_2} = a(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2})$$
 (4)

Y obtenemos los vectores de la base en el espacio recíproco:

$$\vec{b_1} = 2\pi \frac{\hat{z} \times a_2}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|} = \frac{2\pi}{3} \frac{1}{a} (\sqrt{3}, -1)$$
 (5)

$$\vec{b_2} = 2\pi \frac{\hat{z} \times a_1}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|} = \frac{4\pi}{3} \frac{1}{a} (0, 1)$$
 (6)

# V. Conclusiones.

Sin lugar a dudas, el grafeno es un material extraordinario, incluso desde su propia excistencia (debido a las inestabilidades que se habían predicho). Sus distintas propiedades lo hacen un material importante para cualquier industria, sin embargo, la primera monocapa fue obtenida en 2004, por lo que podrían descubrirse todavía nuevas propiedades que pueden ser de gran utilidad. En un futuro, se podrían encontrar más usos de los que se tienen actualmente, llegando a ser un material indispensable para diversos productos electrónicos.

## Referencias

- [1] Konstantinos Spyrou y Petra Rudolf, An introduction to graphene. Disponible en https://application.wiley-vch.de/books/sample/352733551X\_c01.pdf
- [2] Jesus de la Fuente, Graphene Applications and Uses. Disponible en https://www.graphenea.com/pages/graphene-properties#.WxsBfopKguU
- [3] Jussila, Henri; Yang, He; Granqvist, Niko; Sun, Zhipei (5 de febrero de 2016). "Surface plasmon resonance for characterization of large-area atomic-layer graphene film". Optica.
- [4] Página web graphene info, "What is graphene?", disponible en https://www.graphene-info.com/introduction
- [5] Sun, Z., Yan, Z., Yao, J., Beitler, E., Zhu, Y., and Tour, J.M. (2010) Nature, 468, 549–552
- [6] Página young physics. "Physics 231", http://young.physics.ucsc.edu/231/sols/graphene\_question.pdf