

Superpropiedades en 2D

Simulaciones sugieren la posibilidad de crear nuevos materiales nanoestructurados capaces de almacenar información

PUBLICADO EN AGOSTO DE 2016

Según estimaciones de un equipo de físicos teóricos que trabajan en São Paulo y Singapur, una lámina de óxido de estaño (SnO) de tan sólo un átomo de espesor podría adquirir propiedades mecánicas y magnéticas extraordinarias. Los materiales formados por una sola capa de átomos se denominan bidimensionales, porque puede medirse su ancho y su profundidad, pero su espesor es despreciable. En los últimos años, han despertado el interés de científicos teóricos y experimentales a causa de las propiedades eléctricas, magnéticas, mecánicas y ópticas que podrían presentar. El óxido de estaño, por ejemplo, cuya estructura atómica se encuentra representada a la izquierda, en esta página, podría convertirse en la vedete de la nanotecnología, en el caso que sus propiedades recientemente descubiertas puedan confirmarse en laboratorio. Una de esas posibilidades sería utilizarlo en la elaboración de dispositivos a escala nanométrica para almacenar información.

“Las propiedades mecánicas y magnéticas de la capa monoatómica de óxido de estaño dependen de la cantidad de carga eléctrica que recibe el material”, explica el físico Leandro Seixas, docente del Centro de Investigaciones Avanzadas en Grafeno, Nanomateriales y Nanotecnologías (MackGraphe), de la Universidad Presbiteriana Mackenzie, en São Paulo, que fue inaugurado oficialmente en el mes de marzo del corriente año. Seixas es el autor principal de un estudio teórico que se publicó en mayo, en la revista *Physical Review Letters*, demostrando que, al alterar el potencial eléctrico al que se somete a ese material, puede controlarse su organización atómica y el grado de magnetización. “Es la primera vez que

se prevé la existencia de un material bidimensional con este comportamiento”, comenta Seixas, quien desarrolló el trabajo en colaboración con Aleksandr Rodin, Alexandra Carvalho y Antônio Castro Neto, todos físicos del Centro para Materiales Avanzados 2D y del Centro de Investigación del Grafeno de la Universidad Nacional de Singapur (NUS). Además de dirigir esos centros, Castro Neto es el investigador responsable del proyecto “Grafeno: Fotónica y Optoelectrónica. Convenio UPM-NUS”, del programa São Paulo Excellence Chair (Spec) de la FAPESP, con sede en el MackGraphe.

Cuando se cortan en laboratorio lonjas cada vez más delgadas, a partir de bloques sólidos de ciertos materiales, hasta alcanzar el mínimo espesor posible, ocurre una gran transformación. Eso fue lo que descubrieron los físicos Andre Geim y Konstantin Novosolev, en 2004, cuando exfoliaron grafito –el mineral que constituye los lápices– hasta conseguir una lámina formada por una única capa de átomos de carbono, a la que se denominó grafeno. Si bien es flexible y liso como una hoja de papel, el grafeno es más resistente que el acero. También posee la capacidad de conducir la electricidad con una eficiencia miles de veces superior a la del silicio, la materia prima de toda la tecnología electrónica actual, aunque no es posible controlar muy bien el flujo de la corriente eléctrica. Esa característica dificulta la fabricación de un transistor de computadora empleando grafeno. No obstante, desde 2004 en adelante, se han identificado otros materiales que, bajo condiciones singulares, son capaces de superar tales limitaciones. También se están estudiando formas de

perfeccionar el ensamblaje de láminas de grafeno superpuestas a otras estructuras bidimensionales para, así, combinar las propiedades de estos materiales.

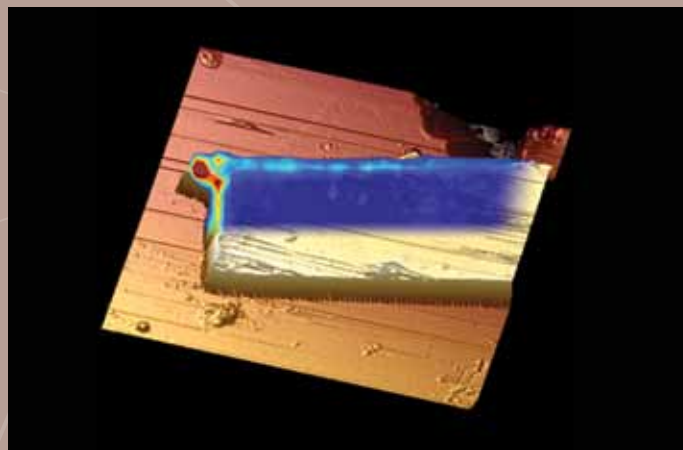
Una de las alternativas al grafeno que más se han estudiado son las capas de sulfato de molibdeno (MoS_2), con tres átomos de espesor, descubiertas en 2005. Recientemente, en 2014, los científicos descubrieron también que el fósforo negro, un material sintético compuesto únicamente por átomos de fósforo, puede exfoliarse hasta lograr una capa monoatómica, a la que se denominó fosforeno. Al igual que el MoS_2 , tanto el fosforeno como el fósforo negro constituido por pocas capas atómicas poseen algunas propiedades ópticas y electrónicas superiores a las del grafeno.

Las diferencias entre el fósforo negro y el grafeno aún no han sido determinadas por completo. En experimentos que se realizaron este año en el MackGrappe, bajo la conducción del grupo del físico Christiano de Matos, en colaboración con investigadores del Instituto de Física Teórica de la Universidade Estadual Paulista (Unesp), del Departamento de Física de la Universidad Federal de Minas Gerais (UFMG) y del Centro para Materiales Avanzados 2D de la NUS, se reveló que los átomos de los bordes de las capas de fósforo negro podían vibrar de manera bastante diferente a la de los átomos de similar condición del grafeno. Esas vibraciones de borde, descritas en un artículo que fue publicado en julio, en la revista *Nature Communications*, pueden incidir en la manera en que el fósforo negro disipa calor y propaga la luz. Aún es pronto para determinar si las alteraciones en la vibración podrían propiciar o suponer un impedimento para el diseño de un dispositivo nanotecnológico, tal como un transistor o un sensor lumínico. “Lo que queda claro”, dice Matos, “es que cualquier proyecto de dispositivo deberá tener en cuenta esas vibraciones de borde”.

MEMORIAS BIDIMENSIONALES

Físicos experimentales han obtenido en laboratorio láminas cada vez más delgadas de SnO , demostrando que el material, dependiendo de su espesor, podría ser un excelente semiconductor o un aislante eléctrico. “Se espera que este año algún grupo experimental obtenga una capa monoatómica de SnO para, así, poder verificar nuestras previsiones”, contempla Seixas.

Cristal de fósforo negro: los colores e el borde superior indican la intensidad de vibración (mayor en las áreas en rojo)



El óxido de estaño adquiere propiedades magnéticas cuando se lo exfolia hasta llegar a un espesor atómico

Las simulaciones del comportamiento de los átomos en supercomputadoras, revelaron que, dependiendo de la cantidad de carga eléctrica presente en una capa monoatómica de SnO , el material se transformaría en un imán cuyos polos podrían controlarse. En caso de que tal control fuera viable en los experimentos, tal vez sea posible utilizar dicho magnetismo para almacenar información en una superficie de óxido de estaño, en forma similar a lo que ocurre en el disco rígido de las computadoras actuales. Seixas y sus colegas incluso demostraron que esa propiedad no sería algo exclusivo del SnO . Los investigadores contemplan que otros materiales, tales como el sulfato de galio (GaS) y el selenato de galio (GaSe), también podrían magnetizarse en forma similar en caso de disponérselos bajo la forma de capas bidimensionales.

“La magnetización de materiales bidimensionales es algo infrecuente”, comenta Seixas. El físico explica que, si bien hay materiales puros, como en los

casos del fósforo negro y el grafeno, en los cuales pueden magnetizarse los átomos de los bordes de sus capas, bajo circunstancias especiales, el centro de esas mismas capas sólo puede magnetizarse mediante la adición de impurezas, tales como átomos de cobalto.

Los cálculos del equipo de Seixas también sugieren que, dependiendo de la cantidad de carga eléctrica circulante por el material bidimensional, el ordenamiento atómico de la capa de SnO podría sufrir una deformación espontánea, que también podría conducir a alguna aplicación tecnológica. Los cuadrados que se forman por el ordenamiento de los átomos de estaño y oxígeno pueden estirarse, formando rectángulos. “Como en el caso de la magnetización, esas deformaciones podrían controlarse a través de la densidad de la carga eléctrica en el material”, explica. “Pero a diferencia de lo que ocurre con la magnetización, todavía no podemos explicar el origen de tales deformaciones ni si las mismas aparecerían en otros materiales”. ■ Igor Zolnerkevic

Proyectos

1. Grafeno: Fotónica y Optoelectrónica. Convenio UPM-NUS (nº 2012/ 50259-8); Modalidad Apoyo a la Investigación – Programa SPEC; Investigador responsable Antonio Helio de Castro Neto (Universidad Presbiteriana Mackenzie); Inversión R\$ 13.110.474,99 (para la totalidad del proyecto).
2. Efectos plasmónicos y no lineales en grafeno acoplado a guías ópticas de onda (nº 2015/ 11779-4); Modalidad Apoyo a la Investigación – Proyecto Temático; Investigador responsable Christiano José Santiago de Matos (Universidad Presbiteriana Mackenzie); Inversión R\$ 832.300,86.
3. ICTP Instituto Sudamericano de Investigación Fundamental: Un centro regional para la física teórica (nº 2011/ 11973-4); Modalidad Apoyo a la Investigación – Proyecto Temático; Investigador responsable Nathan Jacob Berkovits (Unesp); Inversión R\$ 5.393.992.

Artículos científicos

SEIXAS, L. et al. Multiferroic Two-Dimensional Materials. *Physical Review Letters*, v. 116, p. 206803, 20 may. 2016.
RIBEIRO, H. B. et al. Edge phonons in black phosphorus. *Nature Communications*, 14 jul. 2016.