

---

# **CAPITULO I.**

# **ANTECEDENTES**

---

---

## 1.1 ANTECEDENTES

Se sabe que el carbono se presenta en formas y colores diversos, los más comunes son sólidos negros (coque, grafito) pero también se puede presentar como el cristalino y duro diamante.

Además del carbón vegetal, en la naturaleza hay otras formas como la turba que es un material orgánico compacto, de color pardo oscuro y rico en carbono. Está formado por una masa esponjosa y ligera en la que aún se aprecian los componentes vegetales que la originaron. La formación de turba constituye la primera etapa del proceso mediante el cual la vegetación se transforma en carbón mineral. Se forma como resultado de la putrefacción y carbonificación parcial de la vegetación en el agua ácida de pantanos, marismas y humedales. La compresión de la turba produce el lignito que ya es un carbón mineral en forma de sustancia desmenuzable, en la que aún se pueden reconocer algunas estructuras vegetales. Es de color negro o pardo y frecuentemente presenta una textura similar a la de la madera de la cual procede. La compresión del lignito originó la hulla, principalmente en la Era Primaria, durante los períodos Carbonífero y Pérmico. Surgió como resultado de la descomposición de la materia vegetal de los bosques primitivos, proceso que ha requerido millones de años. La hulla es un tipo de carbón mineral que contiene entre un 80 y un 90% de carbono. Es dura y quebradiza, estratificada, de color negro y brillo mate o graso, estratificado y muy frágil.

El término grafeno se usó por primera vez en 1987 para describir láminas singulares de grafito usadas como constituyentes de los compuestos de intercalación de grafito (CIGs); conceptualmente un CIG es una sal cristalina de un intercalante y un grafeno. Como ya se ha señalado, el término también se usó en las descripciones iniciales de los nanotubos de carbono, así como para explicar el grafeno epitaxial, y los hidrocarburos aromáticos policíclicos. En principio no se podían producir moléculas o láminas mayores de grafeno (de modo que se pudieran considerar verdaderos cristales bidimensionales aislados).

Desde la década de 1970 se empezaron a crecer epitaxialmente mono capas de grafito

---

---

encima de otros materiales. Este “grafeno epitaxial” estaba constituido por una mono capa de átomos de carbono en una red hexagonal unida por enlaces  $sp^2$ , como en el grafeno libre. Sin embargo, hay una transferencia significativa de carga desde el grafeno epitaxial hacia el sustrato, y, en algunos casos, hibridación entre los orbitales de del sustrato y los orbitales del grafeno, la cual altera significativamente la estructura electrónica del grafeno epitaxial. Las mono capas de grafito también se observaron por TEM en materiales volumétricos, en particular en hollín obtenido por exfoliación química. También se hicieron muchos esfuerzos para lograr películas muy delgadas desde la década de 1990 hasta 2004, pero el mínimo espesor alcanzado fue de 50 capas. El avance clave en la tecnología del grafeno ocurrió cuando André Geim y Kostantyn Novoselov, en el Instituto de Materia Condensada de la Universidad de Mánchester, Inglaterra lograron extraer del grafito cristales con el espesor de una mono capa. Como le contó Novosolev a Dan Vergano: “Habíamos estado ensayando varios métodos en nuestro laboratorio y un investigador estaba preparando muestras volumétricas de grafito para las pruebas. La manera de limpiar el grafito es cubrirlo con cinta pegante, arrancar la cinta y botarla. De modo que alguna vez, recogí una cinta de esas de la basura y la analicé”, así se obtuvo el grafeno. Las capas de grafeno que se encontraron en la cinta las transfirieron sobre una oblea de sílice con una técnica llamada clivaje micromecánico o, simplemente, la técnica de la cinta pegante. La sílice aisló eléctricamente el grafeno, porque interactúa débilmente con él, de modo que se obtuvieron capas casi neutras eléctricamente. La sílice debajo del grafeno se puede usar como un electrodo de “puerta trasera” para variar, en un amplio intervalo, la densidad de la carga en la capa de grafeno.

## 1.2 ESTRUCTURAS DEL CARBONO

### 1.2.1 Grafito

El grafito es la forma alotrópica más estable del carbono. Está constituido por láminas planas de átomos de carbono que forman un sistema de anillos condensados. Las láminas están ordenadas en forma hexagonal y paralelas entre sí. Hay dos formas alotrópicas con diferentes secuencias de apilamiento: hexagonal y romboédrico. En cada lámina, cada átomo de carbono está unido a otros tres por medio de enlaces

---

covalentes formando una serie continua de hexágonos. En el grafito hexagonal, la distancia entre los planos es de 0.3354, más del doble de la distancia del enlace C-C en los planos basales. Esto indica que la interacción entre láminas aromáticas es débil. Se asume que las láminas están unidas mediante enlaces de van der Waals e interacciones p-p, formando una red cristalina tridimensional. Debido a esto, el grafito posee un alto grado de anisotropía, de modo que sus propiedades eléctricas, térmicas y mecánicas varían notablemente dependiendo de la dirección en la cual se haga la medida.

El grafito natural comenzó a explotarse hacia 1564 cuando se descubrió la primera mena de este material desconocido por aquel entonces, por lo cual fue denominado plumbagina, ya que presentaba un color gris parecido al del plomo y al igual que este dejaba marcas cuando se pasaba por una superficie. El grafito sintético es un material constituido por carbón grafitico. Fue preparado por primera vez a principios del siglo XX, lo que contribuyó notablemente a ampliar el campo de aplicaciones del grafito.

### **1.2.2 Los Fullerenos**

El buckminsterfullereno, de fórmula  $C_{60}$ , también llamado fullereno o buckybola, es una forma alotrópica del carbono. Descubierta por el británico Harold Kroto y los americanos Robert Curl y Richard Smalley (Premio Nobel de Química en 1996). Este compuesto da el nombre a toda una serie de compuestos: *los Fullerenos*.

El hallazgo casual del fullereno se produjo al irradiar un disco de grafito con un laser y mezclar el vapor de carbono resultante mediante una corriente de helio. Cuando se examinó el residuo cristalizado, se encontraron moléculas constituidas por 60 átomos de carbono.

Estas moléculas tenían una forma semejante a la cúpula geodésica construida con motivo de una Exposición Universal en Montreal en 1967 por el arquitecto Buckminster Fuller, se trata de un material obtenido por interacción de átomos de carbono  $C_{60}$  en fase gaseosa, logrando que los átomos de carbono se unieran en hexágonos y con dobles enlaces resonantes entre átomos de carbono vecinos, como si se tratara del

---

benceno.

Los científicos responsables del descubrimiento, por el que recibieron el Premio Nobel de Química en 1996, fueron los estadounidenses Robert F. Curl y Richard E. Smalley y el británico Harold W. Kroto. Los dos primeros, que trabajaban en la Universidad de Rice, lo hacían con una máquina de bombardeo y vaporización inventada por Smalley para conseguir racimos (*clusters*) de átomos metálicos. Usando rayos láser sobre barras de silicio las altas temperaturas obtenidas, de hasta diez mil grados, superiores a las existentes en las superficies de las estrellas, conseguían separar sus átomos convirtiéndolos en un plasma. Tras ello, en una cámara de vacío el plasma era sometido a una corriente de gas helio inerte y se obtenían unos racimos o agregados de átomos que eran estudiados mediante técnicas de espectrometría de masas.

El británico Harold Kroto, de la Universidad de Sussex era un astroquímico que investigaba el origen del universo y de la materia viva, e intentaba hallar una explicación al *polvo estelar*.

Concretamente trataba de conocer como se forman los agregados de carbono y nitrógeno (cianopolienos) que abundan en las atmósferas estelares. Kroto, conocedor de la máquina estadounidense, se trasladó a Houston y reemplazó el silicio por el carbono. Pronto comenzaron a acumularse resultados indicativos de que los átomos de carbono se disponían en una forma sorprendente y estable en agregados de 60 átomos de carbonos unidos entre sí. La unidad básica parecía ser una estructura de anillo hexagonal plano como el grafito, pero el aspecto global parecía ser esférico.

De hecho lo que se descubrió no fue simplemente una nueva molécula sino una clase casi infinita de nuevas moléculas. Cada fullereno –C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>, C<sub>84</sub>, etc. – poseía la característica esencial de ser una cajita de carbono puro, con cada átomo enlazado a otros tres, como el grafito, pero a diferencia de éste, cada fullereno tiene exactamente 12 caras pentagonales con una cantidad variable de caras hexagonales (la bola Bucky tiene 20).p Desde entonces se han sintetizado fullerenos que tienen tamaños entre 24 y 540 átomos de carbono, además de fullerenos de otros elementos. Las buckyballs de

---

elementos distintos al carbono se han estudiado en el silicio, el nitruro de boro, el bisulfuro de molibdeno, BiS<sub>2</sub>, el oro, etc.

En 1990 los físicos W. Krätschmer y D.R. Huffman por primera vez produjeron cantidades aislables de C<sub>60</sub> con un arco entre dos barras de grafito, en una atmósfera de helio y extrayendo el condensado de carbono que se formaba por medio de un solvente.

Desde que los fullerenos fueron producidos y purificados, han atraído el interés como un nuevo material promisorio con propiedades estructurales y electrónicas únicas. Tienen aplicaciones en nano electrónica porque sus propiedades electrónicas se pueden acondicionar con la adición de especies moleculares o elementales ya sea a la jaula del fullereno o dentro de ella. Un método importante de dopar es introducir átomos dentro de la jaula, produciendo un complejo exótico llamado fullereno endohédrico que varía las propiedades eléctricas y electrónicas, figura 8. El primero fue el La C<sub>82</sub>, sin embargo, entre los más estudiados están los fullerenos dopados con metales alcalinos.

Los fullerenos han desarrollado un campo completamente nuevo en la química y la física de los materiales, con consecuencias en áreas tan diversas como la astroquímica, la ingeniería de materiales y la electrónica. Se usan en catalizadores, lubricantes y superconductores, sin embargo, al final de esta sección luego de revisar los nanotubos, se dará una reseña de aplicaciones de los fullerenos y los nanotubos.

Finalmente debe anotarse que hay fullerenos naturales, pues se han encontrado pequeñas cantidades de moléculas C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>, C<sub>76</sub>, y C<sub>84</sub> en hollines formados por las descargas de los rayos en la atmósfera. Recientemente se encontraron fullerenos en una familia de minerales conocidos como shungitas en Carelia, Rusia.

### 1.2.3 Diamante

El diamante es uno de los alótropos del carbono, es decir, una de las estructuras cristalinas en la que puede encontrarse el carbono, después del grafito, sin embargo y tiene renombre específicamente como un material con características físicas superlativas, muchas de las cuales derivan del fuerte enlace covalente entre sus

---

átomos.

La estructura de cada uno de estos materiales es lo que determina sus propiedades. Así los enlaces tridimensionales del diamante dan lugar a una estructura más robusta y por tanto a cristales más duros que en el caso del grafito, en el cual el enlace se limita a las dos dimensiones de las capas, que pueden deslizarse fácilmente entre sí, lo cual da lugar a un material blando que se usa como lubricante sólido.

Todo esto se sabe desde hace ya muchos años y así hasta el decenio de 1980 se conocían seis formas cristalinas del carbono: dos clases de grafito (el grafito hexagonal, que es la forma termodinámicamente estable en la que la secuencia de apilamiento de las láminas es ABAB; y el grafito romboédrico, que es una forma termodinámicamente inestable, y mucho menos abundante, con una secuencia de apilamiento ABCABC), dos clases de diamante (el diamante cúbico que es la estructura más habitual y el diamante hexagonal o lonsdaleita, figura 6, que se encontró por primera vez en 1967), la caoita o carbón blanco y el carbono (VI) que es similar pero distinto a la caoita, estos dos últimos fueron descubiertos en 1968 y 1972 respectivamente.

#### **1.2.4 Nanotubos de carbono**

Los Nanotubos de Carbono fueron descubiertos en Japón por S. Iijima en 1991, publicado en la revista Nature 354, 56 (1991), durante los trabajos de investigación sobre fullerenos. El gran impacto de los materiales nanoestructurados es debido a que su gran superficie mejora sus propiedades y abre caminos a una amplia diversidad de nuevas aplicaciones. Por eso, han atraído y están atrayendo un considerable interés como constituyentes de nuevos materiales y dispositivos nanoscópicos.

Los nanotubos de carbono (CNTs) están constituidos por redes hexagonales de carbono curvadas y cerradas, formando tubos de carbono nanométricos con una serie de propiedades fascinantes que fundamentan el interés que han despertado en numerosas aplicaciones tecnológicas. Son sistemas ligeros, huecos y porosos que tienen alta resistencia mecánica, y por tanto, interesantes para el reforzamiento estructural de materiales y formación de composites de bajo peso, alta resistencia a la

---

tracción y enorme elasticidad.

Electrónicamente, se ha comprobado que los nanotubos se comportan como hilos cuánticos ideales monodimensionales con comportamiento aislante, semiconductor o metálico dependiendo de los parámetros geométricos de los tubos. Otra más de sus interesantes propiedades es su alta capacidad de emisión de electrones. En este campo, su interés radica en que sean capaces de emitir electrones a 0.11 eV de energía mientras que los mejores emisores de electrones utilizados en la actualidad emiten en un rango entre 0.6 y 0.3 eV. Además del estrecho rango de emisión de energía, los CNTs presentan otras ventajas respecto a los cristales líquidos utilizados en las pantallas planas como: amplio ángulo de visión, capacidad de trabajar en condiciones extremas de temperatura y brillo suficiente para poder ver las imágenes a la luz del sol.



---

# **CAPITULO II. GRAFENO**

## **2.1 DEFINICIÓN**

---

---

El grafeno es un al tropo del carbono, un teselado hexagonal plano (como panal de abeja) formado por átomos de carbono y enlaces covalentes que se generan a partir de la superposición de los híbridos  $sp^2$  de los carbonos enlazados.

El término grafeno se usó por primera vez en 1987 para describir l áminas singulares de grafito usadas como constituyentes de los compuestos de intercalaci ón de grafito (CIGs); conceptualmente un CIG es una sal cristalina de un intercalante y un grafeno, Mediante la hibridaci ón  $sp^2$  se explican mejor los ángulos de enlace, a  $120^\circ$ , de la estructura hexagonal del grafeno. Como cada uno de los carbonos contiene cuatro electrones de valencia en el estado hibridado, tres de esos electrones se alojan en los híbridos  $sp^2$ , y forman el esqueleto de enlaces covalentes simples de la estructura.

El electrón sobrante se aloja en un orbital atómico de tipo «p» perpendicular al plano de los híbridos. El solapamiento lateral de dichos orbitales da lugar a formación de orbitales de tipo . Algunas de estas combinaciones propician un gigantesco orbital molecular deslocalizado entre todos los átomos de carbono que constituyen la capa de grafeno.

El nombre proviene de intercambio –en el vocablo grafito– de sufijos: «ito» por «eno»: propio de los carbonos con enlaces dobles. En realidad, la estructura del grafito puede considerarse una pila de gran cantidad de láminas de grafeno superpuestas.

## 2.2 CARACTERÍSTICAS

Las caracter ísticas que presenta la estructura del grafeno son diversas gracias a las distintas propiedades que presenta dicho elemento, y, dentro de las cuales se dice que:

- a) El grafeno es una molécula plana de gran superficie.
- b) Gracias a su conductividad, superior a la del la sílice, no desprende tanto calor ante el desplazamiento de los electrones por su superficie, lo cual puede ser un gran beneficio para la construcción de algunos dispositivos electrónicos.
- c) Este material posee una densidad alt ísima de aproximadamente 2500 millones de átomos de carbono por centímetro cuadrado.
- d) Pese a su extrema dureza y densidad es un material de una flexibilidad

---

---

extraordinaria.

- e) Es un cristal con una finura de grosor de un átomo con un peso apenas perceptible.
- f) Es denominado un material alotrópico puesto que se dice que no es más que la manifestación diferente de la estructura química del carbono.
- g) Tiene un comportamiento eléctrico que combina algunos aspectos de los semiconductores y de los metales, por eso se dice que es un muy buen conductor eléctrico.
- h) Tiene la posibilidad de expandirse mucho más que cualquier otro material cristalino.
- i) Es el material más bidimensional que existe.
- j) Posee una rigidez excepcional, además de que es muy flexible y transparente.
- k) Su fabricación es extremadamente barata y su obtención es hecha a base de diferentes métodos, principalmente se usa el método de exfoliación.
- l) Es un material casi indestructible gracias a su alta resistencia 100 veces mayor a la del acero.
- m) Está formado por una red cristalina de hexágonos en cuyos vértices se encuentran los átomos de carbono.
- n) Genera eficiencia y economía en el consumo de energía.

### **2.3. PROPIEDADES**

Entre las principales y más llamativas propiedades del grafeno, nos encontramos las siguientes:

Puede llegarse a láminas de solo un átomo de espesor.

Tiene unos enlaces extraordinariamente rígidos. El hecho de que solo posea un elemento, evita la aparición de defectos estructurales como grietas que en otros materiales, son la causa de su rotura.

---

---

El grafeno es metálico, pudiéndose inducir electrones, teniendo movilidades electrónicas extraordinariamente altas en comparación con los conductores convencionales. Se ha alcanzado una movilidad de electrones de  $10^8$  elevado a 8 electrones por  $\text{cm}^2$ .

Es impermeable a todos los elementos, incluso al helio.

El grafeno es elástico, es un material bidimensional. Cuando se deforma la lamina de grafeno, las trayectorias de los electrones se mueven, generando el mismo efecto que un campo magnético ficticio sobre los electrones del grafeno. El hecho de poder cambiar de trayectoria a los electrones a partir de las tensiones aplicadas, puede ser utilizado para generar dispositivos electrónicos desconocidos hasta la fecha, e imposibles de construir con cualquier otro tipo de material.

Puede ser estirado de forma reversible hasta un 20% sin sufrir ningún tipo de deformación.

Tiene el record de conductividad térmica.

Al ser un material puro, los electrones pueden circular libremente sin riesgo de colisión con impurezas, pudiendo dar lugar a la construcción de dispositivos impensables hasta la fecha.

Puede existir un magnetismo intrínseco al grafeno, aunque aún se está investigando.

Goza de una alta conductividad eléctrica, comportándose tan eficaz como el cobre, Cu. Es decir, necesitaría menos energía eléctrica para realizar la misma tarea que el silicio, Si. Y generaría un menor efecto Joule, ya que se calentaría menos.

Este material es extraordinariamente conductor tanto eléctrico (sus electrones se mueven cien veces más rápido que en el silicio) como térmico, es muy transparente, resulta más resistente que el diamante y doscientas veces más que el acero, muy flexible, tan denso, que ni siquiera el gas helio lo puede atravesar, muy sensible a

---

---

cualquier molécula que se deposite en su superficie.

Otra propiedad interesante, es que es un multiplicador de frecuencias , por lo que permite trabajar a frecuencias de reloj mucho más altas de las actuales.

A nivel cuántico, el Grafeno presenta nuevas propiedades que hacen que el electrón se comporte como una partícula sin masa (como los fotones y los fermiones), con una velocidad cuatrocientas veces menor que la de la luz pero mucho mayor que la de los electrones en los metales, permitiendo realizar en un pequeño trozo de Grafeno muchos experimentos que hasta ahora solo se podían hacer en aceleradores de partículas como el CERN.

El efecto Hall cuántico (fig.2.3 , anexos) , por el que la conductividad en dirección perpendicular a la corriente, toma siempre valores discretos o cuantizados. El efecto localización de Anderson, asociado a la total movilidad de los electrones del grafeno por toda la lámina.

Entre las propiedades químicas destaca el hecho que pueda reaccionar con otras sustancias para formar nuevos compuestos químicos con diferentes y novedosas propiedades. Una reactividad que dota a este material de un gran potencial de desarrollo.

## **2.4 APLICACIONES**

Las asombrosas propiedades de transporte del grafeno ya mencionadas han hecho pensar que el grafeno puede, eventualmente, suplantar al silicio en los chips de computador, con la perspectiva de aparatos ultrarrápidos operando a velocidades de Terahertz. Sin embargo, de acuerdo con los expertos, los microprocesadores de grafenium se demoran por lo menos 20 años. Entre tanto se espera que maduren otras muchas aplicaciones del grafeno.

El uso más inmediato puede ser en materiales compuestos pues se ha demostrado que el polvo de grafeno se puede producir en masa, lo que permitiría desarrollar plásticos conductores con rellenos de menos de 1 % en volumen.

---

---

Otra posibilidad atractiva es el uso de polvo de grafeno en las baterías eléctricas que son en la actualidad el principal mercado para el grafito. Una mejor relación superficie/volumen y la elevada conductividad pueden mejorar la eficiencia de las pilas reemplazando las nanofibras de carbono que se usan en las baterías modernas.

Las aplicaciones más nuevas del grafeno se relacionan con su transparencia y su alta conductividad para su uso para electrodos en pantallas planas y celdas solares. Actualmente, por su transparencia, el óxido de indio es el material usado en tales electrodos, pero presenta el problema de que es muy escaso en el planeta, por tanto las investigaciones buscan nuevos materiales con excelentes propiedades conductoras y que puedan ser aplicados en optoelectrónica.

Precisamente, investigadores del instituto Max Planck en Mainz, Alemania han demostrado que las películas delgadas de grafeno son una buena opción para ser usados como electrodos pues tienen alta conductividad, buena transparencia en ambas regiones de infrarrojo y visible, una superficie ultrasuave y es química y térmicamente estable. Además el equipo preparó celdas solares orgánicas con una película delgada de grafeno con cuarzo como ánodo. Las hojas de grafeno trabajan de forma óptima, aunque existe la posibilidad de mejorar las propiedades del mismo al incrementar la conductividad de la película de grafeno.

Los investigadores creen que los electrodos transparentes de grafeno se pueden aplicar en diodos emisores de luz orgánicos, en pantallas planas y otros dispositivos optoelectrónicos.

Finalmente, no puede dejar de mencionarse el almacenamiento de hidrógeno, que ha sido un tema muy activo y controvertido con los nanotubos. Se ha sugerido que el grafeno es capaz de absorber una gran cantidad de hidrógeno y se esperan muchos esfuerzos experimentales en esta dirección.

Debido a su especial flexibilidad estructural y electrónica el grafeno se puede moldear

---

---

química y estructuralmente de diferentes maneras: deposición de átomos o moléculas encima; intercalación como en los compuestos de intercalación en grafito; incorporación de nitrógeno y boro en su estructura, en analogía con lo que se ha hecho con los nanotubos y usando diferentes sustancias que modifican la estructura electrónica.

El control de las propiedades del grafeno se puede extender en nuevas direcciones permitiendo la creación de sistemas basados en él con propiedades magnéticas y superconductoras, que son únicas en dos dimensiones.

Todas estas propiedades hacen que el grafeno sea una alternativa como conductor transparente, de los que ahora se utilizan en todas partes, desde los monitores de computadores y pantallas de televisión hasta las pantallas táctiles y las celdas solares. Pero el material ha sido difícil de fabricar en tamaños superiores a unos cuantos centímetros cuadrados. Ahora los investigadores han creado láminas de grafeno rectangulares de 76 cm de diagonal y las han usado para crear pantallas táctiles que funcionan.

Un grupo de la Universidad de Texas, en Austin, liderado por Rodney Ruoff, creció cuadrados de grafeno, de 1 cm, sobre láminas flexibles de cobre.

Luego los investigadores Jong-Hyun Ahn y Byung Hee Hong de la Universidad Sungkyunkwan, en Corea del sur, escalaron el trabajo de los texanos e hicieron láminas lo suficientemente grandes como para hacer pantallas. Para ello utilizaron CVD y depositaron grafeno sobre grandes láminas de cobre. Luego añadieron un adhesivo sobre el grafeno y disolvieron el cobre. Al despegar el adhesivo obtuvieron una monocapa de grafeno, (figura 2.4, anexos); para fortalecerla apilaron cuatro monocapas y las trataron químicamente con ácido nítrico para mejorar su conductividad eléctrica.

La película permite el paso del 90% de la luz y tiene una resistencia eléctrica menor que la del conductor corriente que es de óxido de indio y estaño. Los miembros del grupo también revelaron que el grafeno funcionó mejor que el óxido en una pantalla, el cual además es frágil, mientras que la pantalla de grafeno soporta el doble de deformación

---

---

que los aparatos convencionales basados en el óxido.

#### **2.4.1 Papel de óxido de grafeno**

Por último es conveniente añadir que el papel de óxido de grafeno u óxido de papel de grafito es un material compuesto fabricado con óxido de grafito. El material tiene rigidez y resistencia excepcionales, debido a la resistencia intrínseca de la red de grafeno y su estructura bidimensional que distribuye las cargas. El material de inicio son escamas de óxido de grafeno dispersadas en agua, las cuales se pueden unir químicamente para desarrollar un material nuevo.

El papel de óxido de grafeno es aislante eléctrico, pero sus propiedades se pueden modular para hacerlo conductor o semiconductor sin perder propiedades mecánicas.

Se pensaba que este material es hidrofóbico, pero los estudios han mostrado que tiene regiones hidrofóbicas o sea que el material en general es anfifílico.

Todas estas propiedades hacen que el papel de óxido de grafeno se pueda aplicar en memorias de computador, aparatos optoelectrónicos, baterías, supercondensadores, membranas porosas y para fabricar materiales compuestos con polímeros, cerámicas y metales.



---

# **CAPITULO III: ESTRUCTURAS DEL GRAFENO**

## **3.1 ESTRUCTURA CRISTALINA**

---

---

El grafeno contiene la estructura cristalina (figura 3.1, anexos) bidimensional más delgada de la naturaleza. Su espesor (de un átomo) hace que no se pueda definir su anchura de una forma inequívoca (se considera de 3 angstroms).

El grafeno presenta la posibilidad de expandirse mucho más que cualquier otro material cristalino. Se ha demostrado que la red de grafeno puede estirarse hasta un 10%.

### 3.2 ESTRUCTURA ATÓMICA

El grafeno es una sustancia que presenta una estructura atómica (figura 3.2, anexos) laminar plana de un átomo de grosor, formada por átomos de carbono que forman una red cristalina en forma de panel de abeja mediante enlaces covalentes.

La hibridación de los orbitales atómicos tipo  $sp^2$  (figura 3.2.1, anexos) explica los ángulos de enlace ( $120^\circ$ ) de la estructura hexagonal (cada átomo de carbono enlaza con otros tres átomos de carbono con una estructura trigonal plana). Cada uno de los carbonos posee cuatro electrones en su capa de valencia en el estado hibridado. Tres de esos electrones se alojarán en los híbridos  $sp^2$ , formando una estructura de enlaces covalentes simples (enlaces de tipo sigma, o de superposición frontal, con los orbitales híbridos  $sp^2$  de los otros átomos de carbono) y el electrón sobrante se alojará en un orbital atómico de tipo p puro (no hibridado) perpendicular al plano de los orbitales híbridos.

El grafeno es el componente estructural básico de muchos compuestos de carbono (los denominados "grafíticos"), como el grafito, los nanotubos de carbono y los fullerenos. De hecho, la estructura El grafeno es el componente estructural básico de muchos compuestos de carbono (los denominados "grafíticos"), como el grafito, los nanotubos de carbono y los fullerenos. De hecho, la estructura del grafito consiste en una pila de un gran número de láminas de grafeno superpuestas. Los enlaces entre las distintas capas de grafeno se deben a las fuerzas Van der Waals y a los enlaces entre los orbitales de tipo p no hibridados.

### 3.3 ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

---

---

Como se había mencionado anteriormente el grafeno es una red hexagonal en forma de panal de abeja donde los átomos de carbono presentan una hibridación  $sp^2$ . Tres de los orbitales resultantes están en el plano de los átomos y participan en el enlace covalente entre cada átomo de carbono y tres vecinos. El cuarto electrón se encuentra distribuido por encima y por debajo del plano del grafeno. Estos últimos electrones son los responsables de la peculiar estructura electrónica del grafeno (figura 3.3, anexos). En general los electrones en un sólido cristalino se comportan como si su masa fuese distinta a la masa en reposo. Esto es debido a la interacción de los electrones con la periodicidad atómica del cristal.

La estructura electrónica de grafeno era conocida por los físicos teóricos desde hace aproximadamente 60 años. No obstante, el hecho de que los mismos físicos teóricos estuviesen de acuerdo en que no existe orden de largo alcance en dos dimensiones (y el grafeno es un cristal estrictamente bidimensional) hacía que sus fascinantes propiedades electrónicas no pasaran de ser una mera curiosidad académica.

---

# **CAPITULO IV. GRAFENO CONTRA SILICIO**

A continuación se muestra un cuadro comparativo del grafeno y el silicio.

	GRAFENO	SILICIO
<b>4.1 DEFINICIÓN</b>	<p>El grafeno es una estructura bidimensional plana, de un átomo de carbono de grosor, densamente empaquetados en una red cristalina de configuración hexagonal, o sea, en forma de panal de abeja.</p> <p>Desde el punto de vista químico los átomos de carbono están unidos por enlaces covalentes formados a partir de la superposición de los orbitales híbridos <math>sp^2</math> de los carbonos enlazados.</p>	<p>El silicio es el elemento electropositivo más abundante de la corteza terrestre. Es un metaloide con marcado lustre metálico y sumamente quebradizo. Por lo regular, es tetravalente en sus compuestos, aunque algunas veces es divalente, y es netamente electropositivo en su comportamiento químico. Además, se conocen compuestos de silicio pentacoordinados y hexacoordinados.</p>
<b>4.2 PROPIEDADES</b>	<p>Entre las sorprendentes propiedades físicas más destacadas de este carbono en configuración plana se encuentran:</p> <p>1.- Una alta conductividad térmica, que supera a la de cualquier otro material conocido.</p> <p>2.- Gran resistencia, del orden de unas 200 veces</p>	<p>Propiedades del silicio</p> <p>El silicio forma parte de los elementos denominados metaloides o semimetales. Este tipo de elementos tienen propiedades intermedias entre metales y no metales. En cuanto a su conductividad eléctrica, este tipo de materiales al que pertenece el silicio, son semiconductores.</p> <p>El estado del silicio en su forma</p>

	<p>mayor que la del acero.</p> <p>3.- Más flexible que la fibra de carbono.</p> <p>4.- Goza de una alta conductividad eléctrica, comportándose tan eficaz como el cobre, Cu (s) . Es decir, necesitaría menos energía eléctrica para realizar la misma tarea que el silicio, Si (s) . Y generaría un menor efecto Joule , ya que se calentaría menos al conducir los electrones.</p> <p>5.- Alta elasticidad y dureza.</p> <p>6.- Gran capacidad para soportar la radiación ionizante.</p> <p>7.- Es casi completamente transparente y tan denso que ni siquiera el helio, He (g) , el átomo de gas más pequeño, puede atravesarlo.</p>	<p>natural es sólido (no magnético). El silicio es un elemento químico de aspecto gris oscuro azulado y pertenece al grupo de los metaloides. El número atómico del silicio es 14. El símbolo químico del silicio es Si. El punto de fusión del silicio es de 16,7 grados Kelvin o de 1413,85 grados celsius o grados centígrados. El punto de ebullición del silicio es de 31,3 grados Kelvin o de 2899,85 grados celsius o grados centígrados.</p> <p>La configuración electrónica del silicio es <math>[Ne] 3s^2 3p^2</math>. La configuración electrónica de los elementos, determina la forma en la cual los electrones están estructurados en los átomos de un elemento. El radio medio del silicio es de 1,0 pm, su radio atómico o radio de Bohr es de 1,1 pm, su radio covalente es de 1,1 pm y su radio de Van der Waals es de 2,0 pm. El silicio tiene un total de 14 electrones cuya distribución es la siguiente: En la primera capa tiene 2 electrones, en la segunda tiene 8 electrones y en su tercera capa tiene 4</p>
--	---	---

		electrones.
<p style="text-align: center;"><b>4.3</b> <b>CARACTERISTICAS</b></p>	<p>.Entre las principales y más llamativas características del grafeno, nos encontramos las siguientes:</p> <p>Puede llegarse a láminas de solo un átomo de espesor.</p> <p>Tiene unos enlaces extraordinariamente rígidos. El hecho de que solo posea un elemento, evita la aparición de defectos estructurales como grietas que en otros materiales, son la causa de su rotura.</p> <p>El grafeno es metálico, pudiéndose inducir electrones, teniendo movilidades electrónicas extraordinariamente altas en comparación con los conductores convencionales. Además independientemente de la temperatura, la movilidad electrónica se mantiene. Se ha alcanzado una movilidad de electrones de <math>10^8</math> electrones por <math>\text{cm}^2</math>.</p>	<p>Principales características del silicio:</p> <p>Se prepara en forma de polvo amarillo pardo o de cristales negros-grisáceos. Se obtiene calentando sílice, o dióxido de silicio (<math>\text{SiO}_2</math>), con un agente reductor, como carbono o magnesio, en un horno eléctrico. El silicio cristalino tiene una dureza de 7, suficiente para rayar el vidrio, de dureza de 5 a 7. El silicio tiene un punto de fusión de <math>1.411^\circ\text{C}</math>, un punto de ebullición de <math>2.355^\circ\text{C}</math> y una densidad relativa de 2,33(g/ml). Su masa atómica es 28,086 u(unidad de masa atómica).</p> <p>El silicio constituye un 28% de la corteza terrestre. No existe en estado libre, sino que se encuentra en forma de dióxido de silicio y de silicatos complejos. Los minerales que contienen silicio constituyen cerca del 40% de todos los minerales comunes, incluyendo más del 90% de los minerales que forman rocas volcánicas. El</p>

	<p>Es impermeable a todos los elementos, incluso al helio.</p> <p>El grafeno es el ástico, es un material bidimensional. ¿Y qué le ocurren a los átomos cuando se deforma la lámina?. Al producirse estas deformaciones, generan el mismo efecto que un campo magnético ficticio sobre los electrones del grafeno.</p> <p>Es decir, mueven las trayectorias de los electrones. Los reflectan de la misma forma que lo haría un campo magnético ficticio. Un efecto muy exótico, que ha sido comprobado experimentalmente. El hecho de poder cambiar de trayectoria a los electrones a partir de las tensiones aplicadas, puede ser utilizado para generar dispositivos electrónicos desconocidos hasta la fecha, e imposibles de construir con cualquier</p>	<p>mineral cuarzo, sus variedades (cornalina, crisoprasa, ónice, pedernal y jaspe) y los minerales cristobalita y tridimita son las formas cristalinas del silicio existentes en la naturaleza. El dióxido de silicio es el componente principal de la arena.</p>
--	--	---



	<p>otro tipo de material.</p> <p>Puede ser estirado de forma reversible hasta un 20% sin sufrir ning ún tipo de deformación.</p> <p>Al ser un material puro, los electrones pueden circular libremente sin riesgo de colisión con impurezas.</p>	
<p><b>4.4 APLICACIONES</b></p>	<p>Las aplicaciones del grafeno van muy enfocadas en el campo de la electr ónica, por las caracter ísticas y propiedades que posee.</p> <p>Otras de las aplicaciones son en medicina, aviación, aeronáutica, etc.</p>	<p>Estas son algunas de las aplicaciones del silicio y sus derivados:</p> <p>Utilizado para producir chips para ordenadores.</p> <p>Las c élulas fotovoltaicas para conversión directa de energ ía solar en eléctrica utilizan obleas cortadas de cristales simples de silicio de grado electrónico.</p> <p>El silicio hiper puro puede doparse con boro, galio, f ósforo o ars énico, aumentando su conductividad; se emplea para la fabricaci ón de transistores, rectificadores y otros dispositivos de estado s ólido ampliamente empleados en electrónica.</p> <p>Se utiliza como integrante de aleaciones para dar mayor</p>

		<p>resistencia a aluminio, magnesio, cobre y otros metales.</p> <p>La arena y arcilla (silicatos) se usan para fabricar ladrillos y hormigón; son un material refractario que permite trabajar a altas temperaturas.</p> <p>Al acidificar el ortosilicato de silicio se obtiene un precipitado gelatinoso de sílice (sílica gel) que se emplea como agente desecante, soporte para catalizadores, cromatografía y aislante térmico.</p> <p>La sílice (arena) es el principal ingrediente del vidrio, uno de los materiales más baratos con excelentes propiedades mecánicas, ópticas, térmicas y eléctricas.</p> <p>Las siliconas son derivados poliméricos del silicio. Se utilizan para juguetes, lubricantes, películas impermeables, etc.</p> <p>El carburo de silicio se utiliza como abrasivo importante, para componentes refractarios.</p>
--	--	--



---

# **CAPITULO V. APLICACIONES DEL GRAFENO EN LA ELECTRONICA**

## **5.1 EL SILICIO EN LA ELECTRONICA**

El silicio es el semiconductor por excelencia usado en electrónica.

El silicio es un elemento químico metaloide, número atómico 14 y situado en el grupo 14 de la tabla periódica de los elementos formando parte de la familia de los carbonoides de símbolo Si. Es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre después del oxígeno

---

Sus propiedades son intermedias entre las del carbono y el germanio. En forma cristalina es muy duro y poco soluble y presenta un brillo metálico y color grisáceo. Aunque es un elemento relativamente inerte y resiste la acción de la mayoría de los ácidos, reacciona con los halógenos y álcalis diluidos. El silicio transmite más del 95% de las longitudes de onda de la radiación infrarroja.

Debido a que es un material semiconductor muy abundante, tiene un interés especial en la industria electrónica y microelectrónica como material básico para la creación de obleas o chips que se pueden implantar en transistores, pilas solares y una gran variedad de circuitos electrónicos. El silicio es un semiconductor; su resistividad a la corriente eléctrica a temperatura ambiente varía entre la de los metales y la de los aislantes. La conductividad del silicio se puede controlar añadiendo pequeñas cantidades de impurezas llamadas dopantes. La capacidad de controlar las propiedades eléctricas del silicio y su abundancia en la naturaleza han posibilitado el desarrollo y aplicación de los transistores y circuitos integrados que se utilizan en la industria electrónica.

En la actualidad el elemento más utilizado para fabricar semiconductores para el uso de la industria electrónica es el cristal de silicio (Si) por ser un componente relativamente barato de obtener. La materia prima empleada para fabricar cristales semiconductores de silicio es la arena, uno de los materiales más abundantes en la naturaleza. En su forma industrial primaria el cristal de silicio tiene la forma de una oblea de muy poco grosor (entre 0,20 y 0,25 mm aproximadamente), pulida como un espejo (fig.5.1, anexos).

El silicio monocristalino puro es usado para producir obleas de silicio usadas en la industria de semiconductor, en la electrónica y en un poco de alta eficacia y costosa fotovoltaic aplicaciones. En términos de conducción del precio, el silicio puro es un semiconductor intrínseco el que significa que a diferencia de metales conduce agujeros de electrones y electrones que pueden ser soltados de átomos dentro del cristal por el calor, y así aumentar conductance eléctrico del silicio con temperaturas más altas. El silicio puro tiene conductance demasiado bajo para usarse como un elemento del recorrido en la electrónica sin drogarse con pequeñas concentraciones de ciertos otros

---

---

elementos. Este proceso enormemente aumenta su conductividad y ajusta su respuesta eléctrica controlando el número y precio (positivo o negativo) de transportistas activados. Tal control es necesario para transistores, células solares, detectores de semiconductor y otros dispositivos de semiconductor, que se usan en el sector informático y otras aplicaciones técnicas.

En circuitos integrados comunes, una oblea de silicio monocristalino sirve de un apoyo mecánico al recorrido, que se crea drogando y aislado el uno del otro por capas delgadas de óxido de silicio, un aislante que fácilmente se produce exponiendo el elemento al oxígeno en las condiciones apropiadas. El silicio se ha hecho el material más popular para construir tanto semiconductores de alta potencia como circuitos integrados, debido a que puede resistir los poderes más altos y temperaturas sin hacerse disfuncional debido a la avería del alud, un proceso en el cual un alud de electrones es creado por un proceso del efecto de dominó donde el calor produce electrones libres y agujeros, que por su parte producen más corriente que produce más calor.

El silicio monocristalino es caro para producir y sólo por lo general se justifica en la producción de circuitos integrados, donde las imperfecciones de cristal diminutas pueden interferir con caminos del recorrido diminutos. Para otros usos, otros tipos de silicio puro que no existen como cristales solos se pueden emplear. Éstos incluyen el silicio amorfo hydrogenated y el silicio del grado metalúrgico mejorado (UMG-Si) que se usan en la producción de económico, electrónica del área grande en aplicaciones como Pantallas de cristal líquido, y del área grande, lámina delgada, económica células solares. Tales calidades de semiconductor de silicio que son ligeramente menos puras que los usados en circuitos integrados, o que se producen en la forma policristalina más bien que monocristalina, arreglan la cantidad aproximadamente similar de silicio como se producen para la industria de semiconductor de silicio monocristalina, o 75,000 a 150,000 toneladas métricas por año. Sin embargo, la producción de tales materiales crece más rápidamente que el silicio para el mercado del circuito integrado. Hacia 2013 la producción de silicio policristalina, usada generalmente en células solares, se proyecta para alcanzar 200,000 toneladas métricas por año, mientras la producción de

---

---

silicio de semiconductor monocristalina (usado en microchips del ordenador) permanece debajo de 50,000 toneladas/año.

## 5.2 GRAFENO COMO SUSTITUTO DEL SILICIO

El grafeno se ha convertido en un elemento clave en la electrónica del futuro. Se trata de un material conductor, transparente y opaco a la vez, que se utilizará para aparatos tanto electrónicos como ópticos, sobre todo en pantallas táctiles. Ya ha sido utilizado para fabricar chips que funcionarán hasta mil veces más rápido que los convencionales.

Por este motivo, se puede convertir en el sustituto del silicio en la electrónica. Algunas aplicaciones podrían llegar pronto, ya que el coste es bastante barato y la eficacia será mayor.

Con una conductividad eléctrica 100 veces mayor que la del silicio y una conductividad térmica extraordinaria que hace que no desprenda calor, el grafeno podría cambiar la industria de la electrónica. Los circuitos de los ordenadores personales hechos en grafeno podrían alojar un número de transistores órdenes de magnitud mayor que hoy día en el mismo espacio. Además, gracias a la habilidad de disipar calor, los procesadores de grafeno serían de un tamaño menor que el de los actuales chips de silicio. De hecho, IBM está ya fabricando prototipos de transistores de grafeno (fig.5.2, anexos). Se ha comprobado que estos dispositivos trabajan a una frecuencia de 100 GHz, esto es, 10 veces superior a la de los transistores actuales. Esto convierte al grafeno en el candidato idóneo para remplazar al silicio.

A lo largo de los años, los transistores de silicio han ido reduciendo su tamaño hasta los 45 nanómetros (nm), permitido que cada 2 años, el número de transistores en un circuito integrado se haya podido duplicar. Sin embargo, la utilización de transistores de silicio tiene el límite máximo en 10 (nm), tamaño a partir del cual el material deja de comportarse de forma estable.

Los nuevos transistores de grafeno trabajarán a temperatura ambiente, condición imprescindible para poder formar parte de los dispositivos electrónicos modernos. La tecnología podrá aplicarse a transistores ultrarápidos, dispositivos micromecánicos y sensores de tamaño microscópico. Los transistores construidos con grafeno podrán ser

---

---

sustancialmente más rápidos y eficaces que los actuales de silicio, y con ellos se podrán fabricar ordenadores más eficaces. Además, debido a su flexibilidad y de ser un material casi transparente se ha abierto la posibilidad de fabricar circuitos flexibles y transparentes (fig.5.3, anexos).

### **5.2.1 Características que permiten al grafeno ser utilizado en la electrónica**

La característica más interesante del grafeno tiene que ver con la conductividad eléctrica. De acuerdo con esta propiedad los materiales se clasifican en: aislantes, conductores y semiconductores. El grafeno no es ninguna de las 3, sino que comparte características entre los conductores y los semiconductores (fig.5.4, anexos).

La energía de Fermi ( $E_F$ ) es el nivel de energía máximo hasta el que llegan los electrones de un sólido. Las curvas parabólicas que se ven en las imágenes se conocen como bandas de energía. La inferior es la banda de valencia y la superior es la banda de conducción. Si el nivel de Fermi está en la banda de conducción nos encontramos ante un metal ya que los electrones circulan libremente por esta banda. En el caso de los semiconductores y los aislantes el nivel de Fermi está entre ambas bandas de conducción, y únicamente se diferencian en la anchura de la brecha, llamada *gap* o banda prohibida. En el caso del grafeno tenemos unas bandas con forma de cono, en lugar de paraboloides, y el nivel de Fermi está justo en la unión entre ambas capas. Esto implica que no hay *gap* y los electrones pueden saltar sin problema de la capa de valencia a la capa de conducción y facilitar en gran medida la conducción eléctrica. La velocidad a la que se mueven los electrones en el grafeno es alrededor de 1000 km/s, 300 veces inferior a la velocidad de la luz en el vacío.

Por estos motivos el grafeno es un material muy interesante para aplicarlo a la electrónica; pero, a pesar de esto es muy complicado utilizarlo ya que aún no se conocen sus propiedades a la perfección.

## **5.3 VENTAJAS Y DESVENTAJAS DEL USO DEL GRAFENO EN LA ELECTRÓNICA**

Debido a sus diversas propiedades, el grafeno ha sido considerado por muchos investigadores y científicos, como el sustituto ideal del silicio por sus ventajas que presenta sobre este elemento. Pero a pesar de las magníficas características que



---

---

presenta el denominado “material del futuro”, recientes investigaciones han demostrado que el grafeno no sustituirá por completo al silicio dentro del campo de la electrónica por diversas características que lo ponen en desventaja contra el silicio. Entre las ventajas que se obtienen al utilizar al grafeno en el campo de la electrónica están:

Los dispositivos electrónicos ya no serán rígidos, como sucede con los actuales, sino elásticos, lo cual les permitirá cambiar de configuración (de forma) y de funciones según las necesidades de cada momento.

Presenta mayor posibilidad de miniaturización, mayor potencia y velocidad, mucho menor consumo, integración de los circuitos electrónicos en las mismas pantallas de visualización y mayor resistencia mecánica, en comparación con el silicio.

La flexibilidad del grafeno abre la vía a crear productos electrónicos que se puedan doblar, desde teléfonos móviles hasta pantallas de televisor.

Permitirá eliminar de la industria electrónica materiales más caros y muy contaminantes, como el óxido de titanio o el óxido de estaño indio que ahora se utilizan en la mayor parte de las aplicaciones electrónicas transparentes.

Su *conductividad eléctrica* es  $0.96 \cdot 10^6 \text{ (}\Omega \cdot \text{m)}^{-1}$ . La conductividad del cobre es  $0.60 \cdot 10^6 \text{ (}\Omega \cdot \text{m)}^{-1}$  y la del silicio es  $100 \cdot 10^6 \text{ (}\Omega \cdot \text{m)}^{-1}$ . Por tanto, el grafeno conduce la electricidad mejor que el cobre y, asombrosamente, 100 veces mejor que el silicio.

Se ha hablado de que el grafeno podría sustituir al silicio en un futuro no muy lejano, pero hasta ahora no se ha comprobado por completo esta teoría, y según algunos estudios realizados esto nunca llegará a suceder, porque el silicio es el elemento usado en la electrónica por excelencia. Lo que han propuesto algunos investigadores es que se pueden combinar el silicio con el grafeno para mejorar la calidad de funcionamiento de los dispositivos electrónicos.

Puede ser que la gran cantidad de aparatos elaborados con este material provoque

---

en desmedida su producción ocasionando contaminación, no por el material sino por el aparato en conjunto que puede estar elaborado con otros materiales. Además, entre las propiedades químicas destaca el hecho que pueda reaccionar con otras sustancias para formar nuevos compuestos químicos con diferentes y novedosas propiedades, que pueden resultar desconocidas y que tienen altas posibilidades de ser dañinas al medio ambiente.