

Avance y Perspectiva

Revista de divulgación del CINVESTAV

El diseño de materiales 2D empleando bloques de construcción

Karina Galache · Monday, April 11th, 2022

Categorías: [Ciencias Exactas](#), [Zona Abierta](#)

Así como los ladrillos son las piezas básicas para erigir una casa o los bloques de *Lego* se ensamblan para formar un paisaje, en la Ciencia de Materiales también hay elementos esenciales que se ensamblan para construir componentes tecnológicos complejos. De todas estas piezas destacan los materiales bidimensionales (2D), los cuales son capas extremadamente delgadas cuyo espesor es un millón de veces más fino que el papel, por lo que, junto con su baja dimensionalidad le confiere propiedades únicas.

Hoy existe una amplia gama de materiales 2D con diferentes geometrías y composiciones que han sido el objeto de numerosos estudios. Entre los más comunes se encuentran aquellos como el grafeno, cuyo arreglo hexagonal remite a un panal de abejas (Fig. 1), el material 2D más estudiado y delgado en la naturaleza descubierto en 2004 (Novoselov et al., 2004). Una década más tarde, Zhu y Tomanek predijeron teóricamente un nuevo miembro de esta familia, el fosforeno azul (Zhu & Tománek, 2014), donde por cada átomo de fósforo dirigido hacia arriba del plano, el átomo vecino se desplaza en sentido contrario, formando una red cristalina corrugada (Fig. 1c). Bastaron un par de años para que se sintetizara (Zhang et al., 2016) y descubriera que es un candidato ideal para aplicaciones optoelectrónicas debido a su capacidad como semiconductor.



Figura 1. (a) Panal de abejas y ejemplificación de las redes hexagonales de (b) grafeno y (c) fosforeno azul.

Los materiales 2D tienen la capacidad de ensamblarse y cambiar sus propiedades de acuerdo con el número de capas unidas y el traslape entre ellas. Ésta es una característica que permite “armar” y explorar diferentes arreglos con propiedades mecánicas, ópticas o electrónicas diversas. Por ejemplo, algunos sistemas pueden disminuir su rigidez conforme se unen las capas, mientras que otros tienen posibilidad de mejorar su capacidad como semiconductores, transformándolos en sistemas más aptos para aplicaciones electrónicas. Además del número de capas existe otro factor determinante en las propiedades de un material: la secuencia de apilamiento, es decir, las formas diferentes de acomodar las capas.

Los efectos de la secuencia de apilamiento en las propiedades de los materiales 2D se han estudiado tanto en el ámbito experimental como en el teórico. En particular, el grafeno se ha apilado para crear una estructura tipo rejilla que funciona como un sistema de filtración. Además, un grupo de científicos del Instituto Tecnológico de Massachusetts, tras probar diferentes configuraciones, descubrió que cuando las hojas de grafeno rotan ligeramente, el comportamiento de los electrones del material cambia drásticamente (Cao et al., 2018). En otras palabras, la configuración espacial de las capas produce un comportamiento completamente diferente.

En el caso del fosforeno azul, la literatura revela que hay cuatro distintas formas de apilar dos capas corrugadas (Pontes et al., 2018). Recientemente nuestro grupo identificó una quinta secuencia de apilamiento, y al hacerlo, quedó claro que no existe una metodología que determine todas las posibles formas de apilar dos, tres, cuatro, o N-capas de un material 2D. Por lo tanto, existe un número considerable de reportes que han excluido arreglos o configuraciones. Para el fosforeno azul, el corrugamiento añade un grado de libertad al problema y con ello incrementa el número de secuencias de apilamiento, es decir, aumenta el número de estructuras a armar. Por esta razón, se diseñó un esquema de clasificación gráfico, al que llamamos “diagramas de bloques”, utilizando conceptos geométricos y considerando el corrugamiento de las capas. Con este método, se estudian las diferentes maneras de orientar dos capas de fosforeno azul y se encontraron los cinco arreglos. Entre ellos, destaca una estructura estable no divulgada (Arcudia et al., 2020). Además, utilizando cálculos computacionales muy precisos se descubrió que el arreglo presenta propiedades metálicas, característica poco común en los materiales 2D. En otras palabras, el apilamiento induce una transición semiconductor-metal.



Nuestro trabajo ofrece estrategias para el diseño de materiales empleando un esquema de clasificación nuevo. También, la búsqueda de nuevas configuraciones de apilamiento de materiales 2D brinda oportunidades para mejorar la eficiencia de componentes electrónicos, pues las pérdidas de energía que sufren usualmente estos componentes deben reducirse al no existir una interfaz semiconductor-metal, como ocurre en el fosforeno azul en su paso de una a dos capas. Nuestro estudio ha propiciado que otros grupos se interesen en este fenómeno y se enfoquen en el estudio del origen de esta transición (Wang et al., 2022). Tenemos como objetivo continuar con la búsqueda de nuevos materiales estructurados por capas utilizando las herramientas topológico-matemáticas desarrolladas en el grupo, además de la química cuántica para el análisis de las propiedades.

Referencias

Arcudia, J., Kempt, R., Cifuentes-Quintal, M. E., Heine, T., & Merino, G. (2020). Blue phosphorene bilayer is a two-dimensional metal and an unambiguous classification scheme for buckled hexagonal bilayers. *Physical Review Letters*, 125(19), 196401.

Cao, Y., Fatemi, V., Fang, S., Watanabe, K., Taniguchi, T., Kaxiras, E., & Jarillo-Herrero, P. (2018). Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices. *Nature*, 556(7699), 43–50.

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.

Pontes, R. B., Miwa, R. H., da Silva, A. J. R., Fazzio, A., & Padilha, J. E. (2018). Layer-dependent band alignment of few layers of blue phosphorus and their van der Waals heterostructures with graphene. In *Physical Review B* (Vol. 97, Issue 23). <https://doi.org/10.1103/physrevb.97.235419>

Wang, D.-D., Gong, X.-G., & Yang, J.-H. (2022). Semiconductor-to-metal transition from monolayer to bilayer blue phosphorous induced by extremely strong interlayer coupling: a first-principles study. *Nanoscale*. <https://doi.org/10.1039/d1nr08387b>

Zhang, J. L., Zhao, S., Han, C., Wang, Z., Zhong, S., Sun, S., Guo, R., Zhou, X., Gu, C. D., Yuan, K. D., Li, Z., & Chen, W. (2016). Epitaxial Growth of Single Layer Blue Phosphorus: A New Phase of Two-Dimensional Phosphorus. *Nano Letters*, 16(8), 4903–4908.

Zhu, Z., & Tománek, D. (2014). Semiconducting Layered Blue Phosphorus: A Computational Study. *Physical Review Letters*, 112(17), 176802.

This entry was posted on Monday, April 11th, 2022 at 7:12 pm and is filed under [Ciencias Exactas](#), [Zona Abierta](#)

You can follow any responses to this entry through the [Comments \(RSS\)](#) feed. Both comments and pings are currently closed.