

FÍSICA BÁSICA DEL GRAFENO

Luis Salvador Valle García (1), Paulo César García Quijas (2)

1 Bachillerato general, Escuela de Nivel Medio Superior Centro Histórico León, Universidad de Guanajuato | Dirección de correo electrónico: chavao6211@hotmail.com

2 Colegio de Nivel Medio Superior, Escuela de Nivel Medio Superior Centro Histórico León, Universidad de Guanajuato | Dirección de correo electrónico: pgquijas@gmail.com

Resumen

El grafeno es una hoja de un solo átomo de grafito, un mineral abundante el cual es un alótropo del carbono que se compone de átomos de carbono unidos muy firmemente organizados en una red hexagonal. Lo que hace especial al grafeno es su hibridación sp^2 . Los nanotubos de carbono son básicamente tiras de grafeno enrolladas en una cierta dirección. Los nanotubos pueden ser conductores o semiconductores dependiendo de su quiralidad. Las nanocintas de grafeno son tiras delgadas de grafeno cuyas propiedades electrónicas dependen de su estructura de enlace; la quiralidad de las nanocintas está definida ligeramente diferente que la de los nanotubos. CNTbands es un software online que permite simular la estructura de bandas electrónicas para los nanotubos de carbono así como para las nanocintas de grafeno. En este trabajo utilizamos CNTbands para comparar las propiedades estructurales y energéticas de los nanotubos y las nanocintas.

Abstract

Graphene is, basically, a single atomic layer of graphite; an abundant mineral which is an allotrope of carbon that is made up of very tightly bonded carbon atoms organised into a hexagonal lattice. What makes graphene so special is its sp^2 hybridisation. Carbon Nanotubes (CNT) are basically Graphene sheets rolled up in a certain direction. CNT might be metallic or semiconducting, depending on its chirality. Graphene Nanoribbons (GNR) are thin strips of graphene, the electronic property of GNR largely depends on its edge structure; GNR's chirality is defined slightly different from that of CNT. CNTbands is online software to simulate electronic band structure for carbon Nanotubes, as well as Graphene Nanoribbons. In this paper we use CNTbands for comparison of structural and energetic properties of GNR and CNT.

Palabras Clave

Estructura de Bandas; Fermiones de Dirac; Quiralidad; Relación de Dispersión

INTRODUCCIÓN

¿Qué es el grafeno?

El grafeno es un alótropo del carbono constituido únicamente de átomos de carbono unidos por enlaces covalentes, los cuales forman una red hexagonal. Fue obtenido por primera vez en el año 2004 por André Geim y Konstantin Novoselov.

Tiene una hibridación sp^2 , esta hibridación tiene un ángulo de enlace de 120° . La distancia de enlace entre carbonos es aproximadamente de 1.42 \AA .

Propiedades eléctricas

El carbono cuenta con 6 electrones, dos de ellos están unidos fuertemente al núcleo del átomo y los otros 4 quedan disponibles para formar enlaces. En el grafeno, 3 de estos 4 electrones forman enlaces con los átomos de carbono vecinos, dejando un electrón disponible en la última capa. Este electrón se encuentra en un orbital p que es perpendicular al plano que forma el grafeno.

Teóricamente, en el grafeno, los electrones se comportan como cuasipartículas, o sea, como partículas cargadas eléctricamente pero con masa igual a cero. Estos cuasifermiones, conocidos como fermiones sin masa, o de Weyl-Dirac, son vitales en la Teoría Relativista. Estos fermiones de Weyl-Dirac se mueven a una velocidad constante de aproximadamente 10^6 m/s . A pesar de que el grafeno está hecho únicamente de átomos de carbono, un material no metálico, se comporta como conductor debido a su hibridación molecular [1].

Bandas de energía

Las bandas de energía se clasifican en dos tipos: banda de valencia y banda de conducción. En la banda de valencia se encuentran los electrones que están fuertemente unidos al núcleo y en la banda de conducción se encuentran los electrones libres que pueden producir una corriente. Entre estas bandas energéticas se encuentra una banda prohibida o GAP, el GAP es un nivel energético que impide que los electrones de la

banda de valencia pasen a la banda de conducción, este comportamiento define si un material es aislante, semiconductor o conductor.

En un aislante la banda de valencia está ocupada completamente, mientras que la banda de conducción está completamente vacía, la única forma de que un electrón pueda pasar de una banda a otra es pasando por el GAP. Sin embargo este intervalo de energía es muy grande y normalmente esa energía no está disponible. Un semiconductor también tiene su banda de valencia ocupada y la banda de conducción vacía, la diferencia es que el intervalo de energía entre estas bandas es relativamente pequeño y los electrones pueden pasar con más facilidad de una banda a otra. En un conductor hay electrones en la banda de conducción aun en el cero absoluto, estos electrones de la banda de conducción pueden ganar o perder energía muy fácilmente como respuesta a un campo eléctrico [2].

Confinamiento cuántico

Por confinamiento se entiende la acción que producen los potenciales de la estructura y/o externos a los cuales se encuentran sometidos los electrones en su dinámica, restringiendo estos a una determinada zona en el espacio directo o en el dual. La ecuación de Dirac como una versión relativista de la ecuación de Schrödinger para fermiones describe de manera precisa el espectro del átomo de hidrógeno y posee gran importancia en la teoría de campos cuánticos. Sin embargo, la solución de la ecuación de Dirac para un solo fermión predice dos extraños efectos, la paradoja de Klein y el efecto Zitterbewegung.

Estos efectos de confinamiento corresponden a casos en los cuales los fermiones de Dirac son confinados a regiones finitas. Dado que estos efectos de confinamiento relacionan la interacción con antipartículas de los fermiones, estos efectos de confinamiento no se presentan para casos de bosones. El motivo por el cual a esta escala espacial se observan comportamientos cuánticos es porque la zona de confinamiento es del orden de la longitud de Compton del electrón, 0.024 \AA [3].

Fermiones de Dirac

Los fermiones de Dirac son fermiones que no son sus propias antipartículas y que responden a la descripción de la ecuación de Dirac. Los fermiones de Dirac en este caso corresponden a estados de excitación del grafeno a bajas energías alrededor de los puntos de Dirac (de ahí su nombre), en donde su energía es linealmente dependiente de k , el vector de onda, y su masa efectiva es nula. La masa efectiva es un escalar para los fermiones ubicados cerca de un mínimo de energía, en este caso en los alrededores de los puntos de Dirac [3].

Quiralidad

La hoja de grafeno está constituida por estructuras hexagonales. Se pueden construir nanotubos al doblar la hoja de grafeno siguiendo los ejes horizontal o vertical, pero también se pueden enrollar en otras direcciones, en las cuales los átomos se van torciendo respecto al eje del tubo. Dependiendo de eso, los nanotubos pueden clasificarse en diferentes tipos: zigzag, armchair (descansabrazo) o quiral.

La quiralidad es una propiedad que caracteriza a una figura geométrica que coloca su imagen en espejo y ésta no puede ser superpuesta con ella misma. En el laboratorio, los investigadores han logrado crear nanotubos quirales al tomar, por ejemplo, un número n de estos hexágonos en una dirección, y posteriormente el otro número m de estructuras necesarias para formar el nanotubo en otra dirección.

De esta manera se establece el vector con el cual se definirá la dirección en la cual se enrolla la hoja hexagonal de grafeno. Esto define el diámetro, la dirección de la quiralidad del nanotubo.

Hamiltoniano del grafeno

Un hamiltoniano es un observable que representa la energía total del sistema. Una metodología comúnmente usada para construir el hamiltoniano de un sistema es la aproximación de amarre fuerte. La aproximación de amarre fuerte es una aproximación al cálculo de estructuras de bandas

usando un conjunto de funciones de onda base. La solución aproximada de la función de onda del sistema se expresa como la combinación lineal de las funciones base de átomos aislados. Esta aproximación nos lleva a la siguiente ecuación para la energía:

$$E = \pm 2t \sqrt{\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \frac{1}{4} + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_x a}{2}\right)}$$

En donde E es energía, t es la constante de salto, k_x y k_y son números de onda y a es la distancia entre átomos vecinos. Igualando a cero y declarando dos variables:

$$Y = \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \quad y \quad X = \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_x a}{2}\right)$$

Se obtiene una ecuación cuadrática, que al resolver genera dos curvas en el plano complejo, pero solo interesan las soluciones reales, así que los valores para X y para Y son los siguientes:

$$X = \{-1, 1\} \quad y \quad Y = \pm \frac{1}{2}$$

Tomando los valores máximo y mínimo que puede tomar X y resolviendo para k_x se tiene que:

$$k_{x,\text{máx}} = n(2\pi + 1) \frac{2}{\sqrt{3}a}; \quad k_{x,\text{mín}} = 2\pi n \frac{2}{\sqrt{3}a}$$

Haciendo lo mismo para k_y resulta:

$$k_{y,\text{máx}} = \pi \left(2m + \frac{2}{3}\right) \frac{2}{a}; \quad k_{y,\text{mín}} = \pi \left(2m + \frac{1}{3}\right) \frac{2}{a}$$

Donde m y n son números enteros [4].

En este trabajo hacemos una comparación de las propiedades estructurales y energéticas de dos alótropos de carbono, los cuales son nanocintas de grafeno y nanotubos de carbono.

MATERIALES Y MÉTODOS

El modelo desarrollado anteriormente explica la relación entre dos números enteros (m y n), el vector de onda k y la energía E . Utilizamos el simulador CNTbands para comparar las propiedades estructurales y energéticas de

nanotubos de carbono (CNT, Carbon Nanotubes) y nanocintas de grafeno (GNR, Graphene Nanoribbons) para diferentes configuraciones. CNTbands es un simulador en línea gratuito soportado por diferentes universidades y se puede acceder a él a través de la página <https://nanohub.org/> [5].

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En el simulador se pueden variar diferentes parámetros, los más importantes y que afectan directamente la conductividad de la molécula son m y n , que representan la quiralidad de la misma. Estos valores tienen ciertas restricciones: n debe ser igual o mayor a 2, m puede variar desde 0 hasta infinito en los CNT y en GNR solo puede tomar valores de $m=0$ y $m=n$.

El simulador muestra la estructura de la molécula y una gráfica del vector de onda en un eje contra la energía. Analizando diferentes parámetros tenemos:

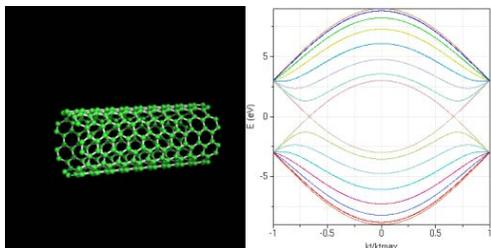


IMAGEN 1: Estructura y gráfica de energía vs vector de onda para una molécula de CNT de $m=7$ y $n=7$

Esta es la estructura y la gráfica de vector de onda vs energía para una molécula de $m=7$ y $n=7$; se muestra una estructura uniforme y su gráfica representa los niveles de energía, en el nivel más bajo ($E=0$) se cruzan dos líneas (sub-bandas más bajas), esto indica que esta molécula es conductora.

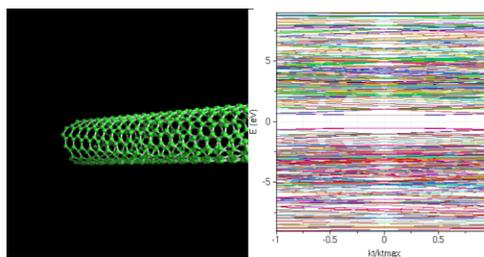


IMAGEN 2: Estructura y gráfica de energía vs vector de onda para una molécula de CNT de $m=5$ y $n=7$

En esta simulación se hizo una variación de m ($m=5$) y n se mantuvo constante; se ve que la estructura se comporta en forma de espiral y su diagrama de energía muestra una gran variedad de líneas (niveles). En $E=0$ no se cruza ninguna línea, esto representa que la molécula se comporta como un semiconductor.

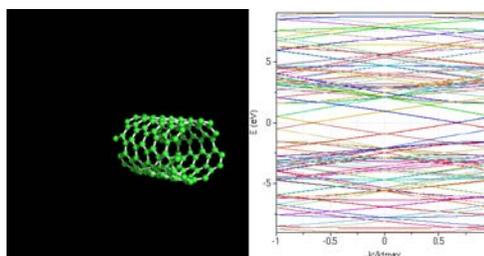


IMAGEN 3: Estructura y gráfica de energía vs vector de onda para una molécula de CNT de $m=4$ y $n=7$

En este caso tomamos $m=4$ y n se mantuvo en 7; la estructura sigue comportándose en forma de espiral pero más acortada que en el caso anterior. Su diagrama muestra una menor variedad de niveles de energía comparado con el diagrama anterior y se presentan varios cruces de líneas en $E=0$. Esto indica que esta molécula muestra propiedades de conductividad similares al caso de la molécula $m=7$, $n=7$.

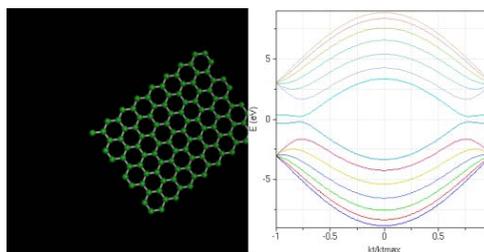


IMAGEN 4: Estructura y gráfica de energía vs vector de onda para una molécula de GNR de $m=7$ y $n=7$

En el siguiente caso se simuló una molécula de GNR utilizando los parámetros del primer CNT ($n=7$ y $m=7$); su diagrama de energía muestra que las sub-bandas de energía más bajas nunca son alcanzadas en referencia al nivel de energía $E=0$, por lo que esta molécula tiene las características de un semiconductor.

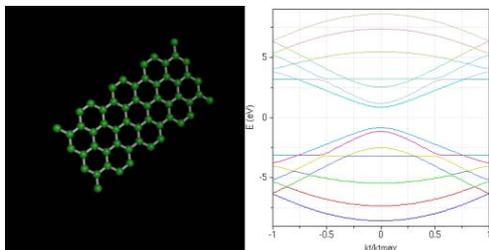


IMAGEN 5: Estructura y gráfica de energía vs vector de onda para una molécula de GNR de $m=0$ y $n=7$

Finalmente consideramos una molécula de GNR, ahora con $m=0$ y $n=7$ (los dos posibles casos que se pueden tomar en el simulador, $m=n$ y $m=0$). Esta estructura es mucho más reducida a comparación de los casos anteriores, debido a su quiralidad. Su diagrama de dispersión muestra una ligera cercanía al nivel de energía mínimo $E=0$ pero sin haber cruces en las sub-bandas. Esta molécula presenta también las características de un semiconductor.

CONCLUSIONES

En las gráficas de la relación de dispersión del grafeno, a partir de la aproximación de amarre fuerte, se puede observar que alrededor de ciertos puntos, en los cuales la energía es igual a cero, la relación de dispersión puede aproximarse a una relación lineal. Estos puntos son los llamados puntos de Dirac.

Cada línea continua describe un nivel de energía para los portadores, o sub-banda. Los diagramas presentados describen la estructura de bandas de los materiales estudiados.

AGRADECIMIENTOS

Le agradezco a la Universidad de Guanajuato y los organizadores del programa Veranos UG por darme la oportunidad de participar en el 3er. Verano de la Investigación Científica para estudiantes del Nivel Medio Superior. A mi asesor, el Dr. Paulo César García Quijas, por aceptarme en el proyecto y a las autoridades de la ENMSCHL por las atenciones prestadas. A todos los que me apoyaron durante la estancia y a quienes me animaron a participar.

REFERENCIAS

- [1] Gómez-Arias W.A, (2013). Fonones Flexurales: Ecuación de Dirac generalizada en grafeno curvo (Tesis), Cd. México: UNAM, Facultad de Ciencias.
- [2] Young H. D, Freedman R.A (2013). Moléculas y materia condensada (13ª ed), Física Universitaria (pp 1416-1418), México: Ed. Pearson.
- [3] Rodríguez-González C, Vasilievna O, (2008), Propiedades y Aplicaciones del Grafeno, Ingenierías XI(38) 17-23.
- [4] Villegas E, (2011) Modelización y Simulación Numérica de Efectos de Confinamiento en el Grafeno (Tesis), Medellín. Colombia: Universidad EAFIT, Departamento de Ciencias Básicas.
- [5] Seol G., Yoon Y., Fodor J.K., Guo J., Matsudarira A., Kienle D., Liang G., Klimeck G., Lundstrom M., Saeed A. I., (2014), CNTbands. <https://nanohub.org/resources/cntbands-ext>, (DOI: 10.4231/D3GB1XH9J)