

Grafeno y Siliceno: una nueva vida gracias a la sutileza de los materiales bidimensionales

María del Rayo Chávez-Castillo^{*,**}, Mario Alberto Rodríguez-Meza^{**} y Lilia Meza-Montes^{*}

Recepción: 14 de junio de 2012

Aceptación: 1 de marzo de 2013

* Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México.

** Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, México, D.F.

Correos electrónicos: mchavez@ifuap.buap.mx;

marioalberto.rodriguez@inin.gob.mx y

lilia@ifuap.buap.mx

Se agradecen los comentarios de los árbitros de la revista.

Resumen. A raíz del descubrimiento experimental del grafeno en el año 2004, el estudio de otros materiales bidimensionales ha ido en aumento. Debido a sus extraordinarias propiedades, el grafeno se ha convertido en el material con mayor potencial para reemplazar al silicio. Así, el interés por mantener a la bien establecida tecnología basada en silicio ha provocado que el grafeno ya tenga un fuerte competidor en la lucha por renovar la microelectrónica: el siliceno. Con la finalidad de dar a conocer al siliceno presentamos algunos datos y características relevantes que hasta el momento se han obtenido sobre estos nuevos materiales; también presentamos los resultados obtenidos acerca de las propiedades estructurales y termodinámicas del siliceno determinadas mediante simulaciones de dinámica molecular.

Palabras clave: materiales bidimensionales, grafeno, siliceno, microelectrónica.

Graphene and Silicene: a New Life Thanks to the Subtlety of Two-Dimensional Materials

Abstract. Following the experimental discovery of Graphene in 2004, the study of other two-dimensional materials has been increasing. Due to their outstanding properties, graphene has become the material with the greatest potential to replace silicon. Trying to preserve the well-established silicon-based technology, it has caused Graphene to have already a strong competitor in the race for renewal microelectronics: the Silicene. With the purpose to introduce Silicene, we present some relevant facts and features, which to date have been obtained about these new materials; we also present results on the structural and thermodynamic properties of Silicene determined by molecular dynamics simulations.

Key words: two-dimensional materials, graphene, silicene, microelectronics.

1. El grafeno y sus encantos

Los materiales derivados del carbono ofrecen una gran variedad de estructuras y de versatilidad. Pensar que hace unas décadas era inimaginable la existencia de un material tan delgado como el cabello y que al mismo tiempo ofreciera gran resistencia y flexibilidad... afortunadamente, esa ausencia fue abatida por el descubrimiento del grafeno, material compuesto por átomos de carbono ordenados de tal manera que presenta hexágonos en su estructura molecular y una característica singular: tiene sólo un átomo de espesor, como se muestra en la figura 1.

El grafeno, considerado el primer material bidimensional descubierto, presenta propiedades fascinantes: conduce el

calor 10 veces mejor que el cobre y la electricidad mejor que el silicio, resiste el calor mejor que el diamante, es 100 veces más resistente que el acero; es flexible, por lo que puede adoptar cualquier forma, es el material más delgado y también el más ligero, es transparente y a la vez tan denso que es impermeable a los gases, incluso al formado por helio, el segundo átomo más pequeño (Chávez Castillo, 2012; Katsnelson, 2012; Castro Neto *et al.*, 2009; Lee *et al.*, 2008).

Estas cualidades y otras más convierten al grafeno no sólo en el material más investigado alrededor del mundo, sino también en el material que dio origen a una nueva clase de materiales bidimensionales (como lo son el bisulfuro de molibdeno –MoS₂–, el nitruro de boro –NB–, el diselenuro

de niobio $-NbSe_2-$, y el bismuto calcio estroncio óxido de cobre $-Bi_2Sr_2CaCu_2O_x$ o BSCCO-) que, al combinarse entre sí, forman materiales que intentan satisfacer las necesidades de las diferentes industrias interesadas en el desarrollo e invención de mejores sistemas informáticos y de comunicación, entre otros (RSAS, 2010; Novoselov *et al.*, 2005).

Pocas veces nos detenemos a pensar de qué material están hechas las pantallas de nuestros equipos de cómputo, celulares, televisores; nos limitamos a pensar que son simples plásticos, pero la realidad es otra, una que no resulta relevante, por ahora. Centrémonos en una de las aplicaciones del grafeno que más ha llamado la atención gracias a su flexibilidad y transparencia: la creación de una pantalla sumamente delgada y multifuncional, es decir, una pantalla que sirva como despertador, agenda, GPS, que sea capaz de desplegarse y convertirse en una computadora ultra plana y además, por si fuera poco, pueda convertirse nuevamente en un reloj de pulsera o un teléfono celular con pantalla. Así es, aplicaciones en prototipos de equipos todo-en-uno, han sido mostrados por algunas compañías y ya circulan por toda la red (Grafeno, 2012).

Ahora bien, el asunto con las aplicaciones del grafeno no termina aquí. Al ser un material con propiedades únicas –las cuales pueden ser ajustadas en un amplio rango de temperatura y tamaños, entre otros parámetros– las investigaciones actuales no sólo implican el diseño de mejores formas de comunicación, sino también de aplicaciones en medicina (figura 2), farmacéutica, energía, calzado, entre otras.

No nos sorprendamos demasiado cuando escuchemos hablar de la fabricación de zapatos sin olor, de chalecos antibalas, de ropa que registre constantes del cuerpo humano tales como temperatura, presión arterial, ritmo cardíaco o de la producción de sensores, celdas solares, baterías, cristales irrompibles e inrayables, detectores de explosivos, de células patógenas, y de aeronaves y automóviles más ligeros, porque es posible que en algunos años invadan nuestros mercados (Grafeno, 2012; Sattler, 2011; Hertel *et al.*, 2012; Sheka, 2011).

Hablemos ahora de la aplicación más importante del grafeno que se presenta en la industria de la electrónica. Al no calentarse, se convierte en el principal material para reemplazar al silicio en muchas de sus aplicaciones, lo cual sin duda alguna cambiaría a la industria actual. Las aplicaciones dentro de este campo de estudio parecen ser una realidad, pues ya se cuenta con chips que tienen además características singulares (figura 3). El lanzamiento posible de las primeras pantallas enrollables, táctiles y con circuitos de grafeno que la empresa Samsung en conjunto con la Universidad Sungkyunkwa (Corea del Sur) han desarrollado, parece estar próximo pues se especula que saldrán a la venta muy pronto.

Figura 1. Estructura hexagonal del grafeno.

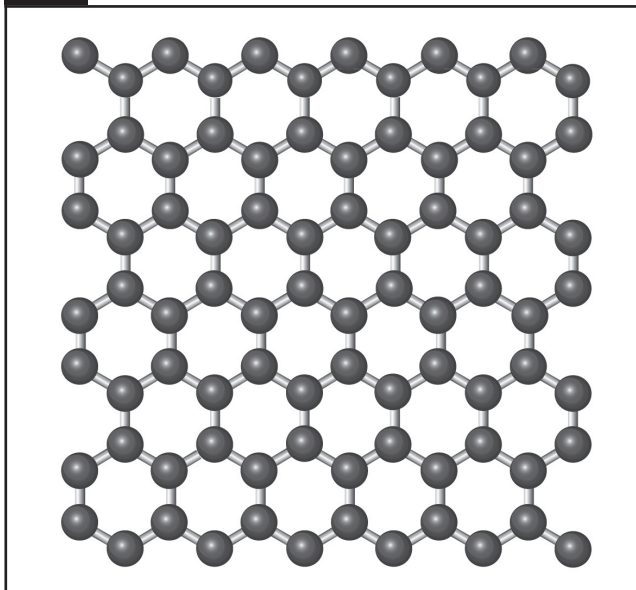
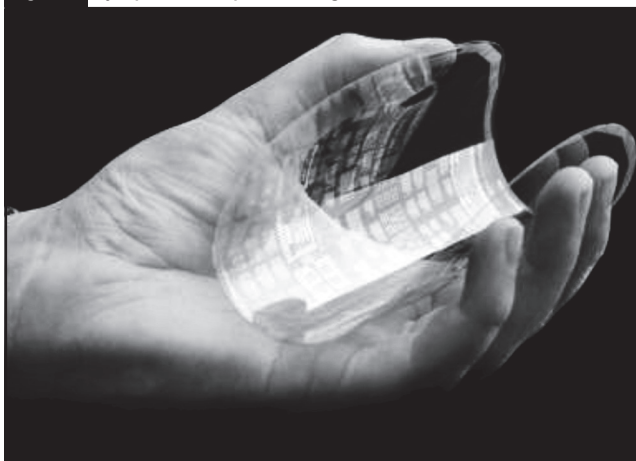


Figura 2. Sensor de grafeno.



Fuente: <http://grafeno.com/crean-sensores-basados-en-grafeno-que-se-tatuan-en-los-dientes-para-detectar-si-estamos-enfermos/>.

Figura 3. Ejemplo de un chip flexible de grafeno.



Fuente: <http://grafeno.com/investigadores-belgas-del-imec-crean-el-primer-procesador-de-plastico/>.

Sin embargo, las tintas conductoras basadas en grafeno y diseñadas por la empresa Vorbeck Materials para prevenir robos a comerciantes y propietarios de marcas parece que serán la primera aplicación en salir al mercado, ya que se encuentran en etapas finales de pruebas y se espera hagan su aparición este año en tiendas de Estados Unidos. Esta misma empresa ya se encuentra fabricando contactos eléctricos para pantallas flexibles (Grafeno, 2012).

2. ¡El silicio se defiende!

El posible reemplazo del silicio por el grafeno en la microelectrónica actual provoca la búsqueda de un nuevo material, con la misma estructura del grafeno pero proveniente del silicio. A este nuevo material lo nombran siliceno. Al pertenecer al mismo grupo, se espera que el siliceno presente no sólo las propiedades del grafeno, sino también propiedades completamente nuevas que abran nuevos campos de aplicación. Análogamente al grafeno, el siliceno se describe como un material compuesto por átomos de silicio en una red hexagonal; pero ¿en qué son diferentes estas dos redes? Veamos.

Los átomos de carbono –C– y de silicio –Si– pertenecen al grupo 4 de la tabla periódica. Así, con cuatro electrones de valencia, el carbono y el silicio son químicamente similares; sin embargo, presentan un comportamiento completamente diferente. La principal diferencia que existe, en la formación de sus correspondientes estructuras bidimensionales, se centra en las capacidades diferenciadas del carbono y del silicio para formar enlaces dobles que se extienden sobre un plano. Mientras que el carbono forma de manera natural estos enlaces, el silicio presenta una fuerte tendencia a establecer enlaces triples tetraédricos. Esta preferencia provoca que los átomos de silicio y por lo tanto sus enlaces, no se encuentren en el mismo plano dando origen a las corrugaciones presentes en el siliceno; aunado a esto, el mayor tamaño atómico del silicio da lugar a enlaces más largos y por lo tanto más débiles que los del carbono. Esto ayuda a entender por qué el grafeno es una estructura más estable y puede existir libremente mientras que el siliceno sólo se obtiene hasta el momento sobre superficies que le dan estabilidad (Chávez Castillo, 2012; Sattler, 2011; Hertel *et al.*, 2012; Teo y Sun, 2007; Jacobsmeyer, 2012; Powell, 2011; Wogan, 2012).

Por ello, la síntesis de siliceno es otra parte central de las investigaciones. Ya se ha logrado el crecimiento de hojas de siliceno mediante el depósito de átomos de silicio sobre superficies de plata –Ag– y de diboruro de circonio –ZrB₂–, las cuales sirven como soporte. Estas hojas o láminas muestran que la estabilidad del material se debe a las corrugaciones que presenta en su estructura. También sobre superficies de Ag se

logró la creación de finas cintas de silicio, las cuales reciben el nombre de nanocintas y presentan características que dependen de su ancho (Jacobsmeyer, 2012; Kar *et al.*, 2010; Vogt *et al.*, 2012; Aufray *et al.*, 2010; Kara *et al.*, 2012; Ince y Erkoç, 2011). La carrera por obtenerlo en forma libre continúa.

Si bien el descubrimiento del grafeno fue en su momento la innovación que rompió con los paradigmas establecidos, el siliceno es el material que comienza a marcar, en estos primeros años del siglo XXI, la pauta en tecnología electrónica; esto sencillamente a causa de que el grafeno. Por ejemplo no puede apagarse por completo en un transistor, lo cual hace que carezca de la función de encendido-apagado necesaria en este dispositivo, característica importante con la que sí cuentan no sólo los transistores actuales, sino también la tendrán los transistores de siliceno según predicen los estudios teóricos, factor que lo pone en ventaja sobre el grafeno (Kara *et al.*, 2012).

Esta transición entre el estado encendido y el estado apagado del siliceno se debe a su estructura, más ondulada que la del grafeno que permite a los átomos de silicio encontrarse a diferentes alturas. De este modo, variando su posición, los electrones pueden tener diferentes energías permitiendo con ello realizar esta transición entre encendido y apagado al aplicarse los voltajes eléctricos adecuados. En cambio, en el grafeno las energías no difieren notablemente de modo que voltajes pequeños activan el paso de corriente. No obstante, es interesante notar que a mediados de 2012 se ha anunciado ya la creación de un transistor con una proporción apagado-encendido de decenas de miles a bajas temperaturas, en el que el principal obstáculo, las conexiones han sido obtenidas con ayuda de átomos de hidrógeno que controlan la forma en que el grafeno interactúa con el sustrato de carburo de silicio (Castro Neto *et al.*, 2009; Grafeno, 2012; Hertel *et al.*, 2012). Digamos que, por su antigüedad, este material lleva gran ventaja; pero sin duda alguna, la industria actual, que ha desarrollado múltiples técnicas para la obtención y procesamiento del silicio, empujará fuertemente al siliceno.

En materiales bidimensionales las velocidades a las que se mueven los electrones son mayores a las que se encuentran en materiales volumétricos. Sin embargo, una desventaja del siliceno es que las velocidades electrónicas son menores a las del grafeno en detrimento de la rapidez de los dispositivos (Castro Neto *et al.*, 2009; Kar *et al.*, 2010).

En cuanto a las investigaciones teóricas acerca del siliceno, podemos mencionar el estudio de las propiedades estructurales de nanocintas de silicio, las cuales son muy estables a temperatura ambiente, y el estudio de nanotubos de silicio (Sattler, 2011; Vogt *et al.*, 2012; Aufray *et al.*, 2010; Kara *et al.*, 2012; Ince y Erkoç, 2011; Kumar, 2007; Zhang *et al.*, 2002).

Las propiedades estructurales y termodinámicas de hojas de siliceno (a diferentes temperaturas y densidades) han comenzado a estudiarse, mostrando que su estructura es muy estable a altas temperaturas. Las figuras 4a, 4b y 4c muestran el arreglo bidimensional de los átomos de silicio a temperatura ambiente (300 K) y diferentes densidades. Como puede observarse, el arreglo hexagonal de los átomos de Si se conserva aún a bajas densidades. En cuanto a las propiedades termodinámicas, se ha mostrado que éstas no cambian significativamente con el aumento de temperatura (Chávez Castillo, 2012).

El siguiente paso no sólo será continuar con el estudio teórico de sus propiedades, sino también realizar experimentos que –en combinación con los modelos matemáticos– permitan que las aplicaciones de este material comiencen a ser una realidad.

4. Pero...

Finalmente, hablemos un poco de realidades. Como se sabe, las investigaciones en las aplicaciones del grafeno son muchas y continúan en marcha gracias al interés de empresas como IBM, Samsung, Intel, Nokia, las cuales buscan el reemplazo de los dispositivos actuales. Sin embargo, como ya lo mencionamos, a pesar de que ya existen algunos prototipos de sus prometedoras aplicaciones, la producción de estos dispositivos (que prometen ser más rápidos, delgados, flexibles y esperamos que al alcance de nuestros bolsillos) sigue aún en desarrollo y, aunque algunos han prometido lanzarlos al mercado en el transcurso de este año, los optimistas esperan que entre los años 2015-2020 la transición a los dispositivos de grafeno sea una realidad. La historia del siliceno es completamente diferente, ya que las investigaciones para su obtención se encuentran todavía en una etapa muy temprana, así que hablar sobre su industrialización demorará algunos años más (Grafeno, 2012; Jacobsmeyer, 2012; Powell, 2011; Wogan, 2012; Silicene/Germanene, 2011).

La importancia que tiene el estudio de estos materiales y sus aplicaciones puede valorarse en las consideraciones de la Semiconductor Industry Association (SIA, por sus siglas en inglés) de Estados Unidos. De acuerdo con su página electrónica, la industria de semiconductores es, a pesar de la crisis económica, la número 1 en exportaciones del país con sus ventas estables –en los primeros ocho meses de 2012– de casi 190 mil millones de dólares y con los valores agregados que proporciona a las demás industrias,

además de las constantes mejoras de sus productos y disminución de sus costos (SIA, 2012). No es casual que enfaticen el objetivo de obtener dispositivos alternativos, pues el país que gane la carrera en nanoelectrónica será el líder en el futuro como lo ha sido Estados Unidos durante el último medio siglo (SRC, 2012).

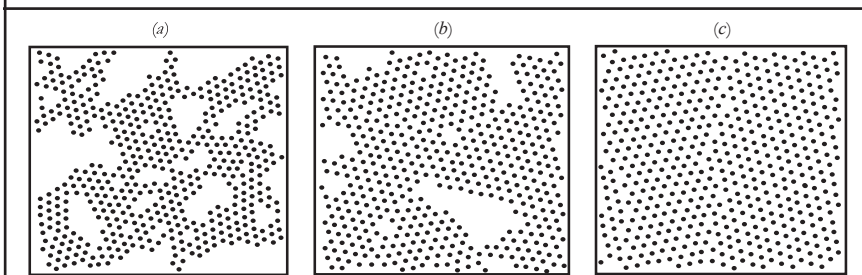
Las asociaciones de la industria de semiconductores de Europa, Japón, Taiwán, Corea y la SIA formulan sus estrategias constantemente de acuerdo con los últimos adelantos de la ciencia y, en el último reporte de 2011, el grafeno aparece como un material emergente que podría ser utilizado como canal de transporte, interconectores, dispositivos para metrología o en transistores. Aunque, de acuerdo con sus proyecciones, se espera que se obtengan logros entre 2019-2026. El siliceno no aparece aún en estas estrategias, pero sin duda muy pronto lo hará (ITRS, 2011).

Muchos otros retos han de ser superados: la integración de millones de estos dispositivos para que realicen las funciones de los actuales circuitos integrados; la optimización de estos materiales de modo que resistan los procesos de deterioro ocasionados por las altas temperaturas y la corrosión; el desarrollo de modelos teóricos del funcionamiento de estos dispositivos; creación de métodos que permitan la producción a nivel industrial en forma sustentable y sin efectos negativos para la ecología; en fin, un largo camino por recorrer con gran velocidad, el cual requiere de considerable inversión y de personal preparado para estas tareas (ITRS, 2011).

Conclusiones

Gracias a la complejidad que el grafeno presenta en su estructura y propiedades, junto con el siliceno y otro conjunto de materiales bidimensionales que surgieron a partir del descubrimiento del primero, se ha abierto un sinnúmero de áreas de investigación que han cambiado la manera de estudiar y de ver a los materiales a causa de que presentan un comportamiento completamente distinto

Figura 4. Arreglo bidimensional de átomos de silicio para el estado sólido a condiciones normales de temperatura y a diferentes densidades.



Fuente: Chávez Castillo, 2012.

al conocido en los materiales tridimensionales. De este modo, seguir estudiando las propiedades de los materiales bidimensionales es una tarea necesaria no sólo porque le darán un giro de 180 grados a la industria de la microelectrónica, sino también porque, en la medida en que se tenga una mejor comprensión sobre su comportamiento, seremos capaces de extender aún más sus aplicaciones de tal manera que podamos seguir renovando y mejorando el mundo que nos rodea.

Ya sea grafeno o siliceno, el reto a vencer será la obtención y producción a un bajo costo de estos materiales, procesos que traerán consigo nuevos retos y paradigmas a desafiar.

De este modo, el grafeno y el siliceno han llegado para decirnos que el futuro de la ciencia de los materiales se encuentra en los materiales bidimensionales por lo que habrá que esperar con ansiedad su introducción en nuestra vida diaria.



Bibliografía

- Aufray, B.; A. Kara; S. Vizzini; H. Oughaddou; C. Léandri; B. Ealet y G. Le Lay (2010). "Graphene-Like Silicene Nanoribbons on Ag(110): A possible Formation of Silicene", *Appl. Phys. Lett.* Vol. 96: 183102.
- Castro Neto, A. H.; F. Guinea; N. M. R. Peres; K. S. Novoselov y A. K. Geim (2009). "The Electronic Properties of Graphene", *Rev. Mod. Phys.* Vol. 81: 109-162.
- Chávez Castillo, M. R. (2012). *Propiedades estructurales y termodinámicas del siliceno*. Tesis de Maestría. Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas". Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.
- Grafeno (2012). *Grafeno: el material del futuro*. <<http://grafeno.com>> (15 de abril de 2012).
- Hertel, S.; D. Waldmann; J. Jobst; A. Albert; M. Albrecht; S. Reshanov; A. Shöner; M. Krieger y H. B. Weber (2012). "Tailoring the Graphene/Silicon Carbide Interface for Monolithic Wafer-Scale Electronics", *Natu Commun.* Vol. 3: 957.
- Ince, A. y S. Erkoç (2011). "Silicene Nanoribbons: Molecular-Dynamics Simulations", *Comp. Mater. Sci.* Vol. 50, Núm. 3: 865-870.
- ITRS (International Technology Roadmap for Semiconductor) (2011). *Edition: Executive Summary*. ITRS. <<http://www.itrs.net/Links/2011ITRS/2011Chapters/2011ExecSum.pdf>> (4 de octubre del 2012).
- Jacobsmeier, B. (2012). "Multiple Groups Claim to Create First Atom-Thick Silicon Sheets", *Inside science*. 29 de marzo de 2012. <<http://www.insidescience.org/news-service/1-2586>> (7 de mayo de 2012).
- Kara, A.; H. Enriquez; A. P. Seitsonen; L. C. Lew Yan Voon; S. Vizzini; B. Aufray y H. Oughaddou (2012). "A Review on Silicene: New Candidate for Electronics", *Surf. Sci. Rep.* Vol. 67, Núm. 1: 1-18.
- Kar, S.; M. Houssa; S. Van Elshocht; D. Landheer; D. Misra y K. Kita (2010). *Physics and Technology of High-k Materials 8: ECS Transaction*. Vol. 33, Issue 3. The Electrochemical Society, USA.
- Katsnelson, M. I. (2012). *Graphene. Carbon in Two Dimensions*. Cambridge University Press. New York.
- Kumar, V. (2007). *Nanosilicon*. Elsevier, UK.
- Lee C.; X. Wei; J. W. Kysar y J. Hone (2008). "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene", *Science*. Vol. 321: 385-388.
- Novoselov, K. S.; D. Jiang; F. Schedin; T. J. Booth; V. V. Khotkevich; S. V. Morozov y A. K. Gei (2005). "Two-Dimensional Atomic Crystals", *Proc. Natl Acad. Sci. USA*. Vol. 102: 10451-10453.
- Powell, D. (2011). "Silicene: it Could be the New Graphene", *Science News* [on line]. Vol. 179, Núm. 9: 14. <http://www.sciencenews.org/view/generic/id/71705/description/Silicene_It_could_be_the_new_graphene> (13 de julio de 2012).
- RSAS (The Royal Swedish Academy of Science). (2010). *Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2010: GRAPHENE*. <http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2010/advanced-physicsprize2010.pdf> (13 de julio de 2011).
- Sattler, K. D. (2011). *Handbook of Nanophysics. Clusters and Fullerenes*. CRC Press Taylor & Francis Group, USA.
- Sheka, E. (2011). *Fullerenes: Nanochemistry, Nanomagnetism, Nanomedicine, Nanophotonics*. CRC Press Taylor & Francis Group, USA.
- SIA (Semiconductor Industry Association) (2012). <<http://www.sia-online.org/>> (5 de octubre de 2012).
- Silicene/Germanene (2011). *Base de datos sobre artículos publicados acerca de siliceno*. <<http://www.augos.com/temp/Temp-Silicene.html>> (30 de mayo de 2011).
- SRC (Semiconductor Research Corporation) (2012). <<http://www.src.org/program/nri/>> (5 de octubre de 2012).
- Teo, B. K. y X. H. Sun (2007). "Silicon-Based Low-Dimensional Nanomaterials and Nanodevices", *Chem. Rev.* Vol. 107: 1454-1532.
- Vogt, P.; P. de Padova; C. Quaresima; J. Avila; E. Frantzeskakis; M. C. Asensio; A. Resta; B. Ealet y G. Le Lay (2012). "Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon", *Phys. Rev. Lett.* Vol. 108: 155501.
- Wogan, T. (2012). "Silicene Pops Out of the Plane", *Physics world* [on line]. 20 de junio de 2012. <<http://www.physicsworld.com>> (2 de julio de 2012).
- Zhang, R. Q.; S. T. Lee; Chi-Kin Law; Wai-Kee Li y B. K. Teo (2002). "Silicon Nanotubes: Why Not?", *Chem. Phys. Lett.* Vol. 364, Núm. 3-4: 251-258.