

VIDA CIENTÍFICA

La serie dedicada a los *Nuevos Materiales* cuenta con una colaboración sobre nuevas formas del carbono, elemento que sigue sorprendiendo con el transcurso del tiempo. En la actualidad se ha conseguido aislar una capa de grafito, llamado grafeno, y sus propiedades electrónicas son tan asombrosas como precedían los trabajos teóricos realizados a partir de un cálculo de su estructura de bandas hace más de 50 años. El grafeno acapara la actualidad científica en el área de materia condensada. Esta colaboración de tres investigadores pertenecientes a la Unidad Asociada de la Universidad Carlos III de Madrid y el Instituto de Ciencia de Materiales del CSIC (UC3M-CSIC), Dres. López-Sancho, Guinea y Hernández-Vozmediano, muestra las propiedades electrónicas de este "nuevo" material que permitirán la construcción de nuevos dispositivos electrónicos.

En el apartado de *Colaboraciones* contamos con dos contribuciones relacionadas con la nueva titulación de Ciencias Ambientales. Una dedicada a la "Química verde", llamada así porque pretende minimizar los ataques al medio ambiente de una ciencia como la Química, que, por otra parte, ha permitido un desarrollo de la calidad de vida de los ciudadanos del siglo XXI. Sus autoras, profesoras del Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica, describen los doce principios en los que se basa la química verde como guía general de orientación de la investigación en Química para mejorar su eficiencia desde el punto de vista ecológico. La otra, está dedicada a la "desertificación", uno de los problemas más graves a los que se enfrenta el planeta Tierra y cuyo tratamiento se encuentra todavía en sus primeros estadios, debido a la carencia de criterios sólidos de diagnóstico. Su autor, el Dr. Puigdefabregas, de la Estación Experimental de Zonas Áridas del CSIC, nos explica los modelos para la interpretación y diagnóstico de los procesos de desertificación, la relación entre este acuciante fenómeno y la sostenibilidad económica y ecológica,

y expone la necesidad de avanzar en la consecución de un lenguaje común entre especialistas en ecología, agricultura y economía para lograr progresos significativos a nivel global.

En el área de Matemáticas contamos con una exposición de la estadística llamada bayesiana, que expresa en términos probabilísticos, a través del teorema de Bayes, la relación que existe entre unos datos observables y las posibles causas que los producen. Sus autores, los profesores Gómez Sánchez-Manzano y Maín Yaque, de la Universidad Complutense de Madrid, aplican dicha estadística a un caso concreto, la proporción de casas de una determinada ciudad que tiene conexión a internet, para su mejor entendimiento.

En el área de Química, recogemos la conferencia que el profesor Horta impartió con motivo de la celebración de San Alberto Magno en 2005 y que estuvo dedicada a los materiales plásticos realizados sin utilizar petróleo, que constituyen un reto, tanto para la investigación científica como para el desarrollo tecnológico, ya que en la actualidad no pueden competir ni por sus propiedades ni por su costo con los derivados del petróleo.

Continuamos con los apartados dedicados a *Novedades científicas*, *Semblanzas de los Premios Nobel de 2005* y *Efemérides*.

En este número, en el que las Matemáticas juegan un papel primordial, están recogidos los retos matemáticos para el siglo XXI, enunciados por la Asociación Internacional Congress of Mathematicians en el ICM2006, y ejemplos cotidianos en los que las Matemáticas están, sin darnos cuenta, presentes.

Y, por último, el apartado *Las mujeres y la Ciencia*, está dedicado a la mujeres matemáticas. Las profesoras Claramunt y Carreras han querido hacerlas un pequeño homenaje, poniendo de manifiesto sus aportaciones en el área científica de las matemáticas, tanto en investigación como en docencia.

NUEVOS MATERIALES: Parte X

Nuevas formas de carbono

INTRODUCCION

El carbono es uno de los elementos mas abundantes en la tierra y es fundamental para la vida tal y como la conocemos. El carbono presenta una gran versatilidad

cuando sus átomos se combinan para formar materiales, ya que el grafito, el diamante, el C_{60} o los nanotubos están formados únicamente por átomos de carbono y, sin embargo, cada uno tiene propiedades diferentes. Algunos de estos materiales han sido conocidos y utilizados desde la antigüedad. Durante el siglo pasado el carbono ha recibido la atención de los científicos en diferentes periodos: en los años cuarenta se estudiaron las propie-

dades del grafito desde un punto de vista académico, en los setenta la posibilidad de superconductividad en los intercalados metálicos del carbono revivió el interés. En los ochenta la aparición de los fullerenos, C_{60} , bautizados así porque su forma geométrica recuerda las cúpulas diseñadas por el arquitecto B. Fuller, atrajo de nuevo el interés científico hacia el carbono, interés que volvió a resurgir muy reforzado en los noventa con el descubrimiento de las asombrosas propiedades de los nanotubos de carbono.

En el nuevo siglo XXI el carbono ha vuelto a sorprendernos. A finales de 2004, en la Universidad de Manchester, se consiguió aislar una capa de grafito [1], llamado grafeno, y sus propiedades electrónicas son tan asombrosas como predecían los trabajos teóricos [2], confirmándose predicciones realizadas en 1947 en un cálculo de estructura de bandas. Desde entonces el grafeno acapara la actualidad científica en el área de materia condensada. Basta decir que el número de publicaciones sobre el grafeno en el archivo 'con-mat' de Los Álamos en los primeros seis meses de 2006 es superior a cien.

La importancia de este logro está aún más justificada si se considera que el grafeno bidimensional (2D) se puede considerar como el material base de estas otras formas del carbono: del C_{60} , que se comporta como de dimensión cero (0D), con su forma esférica obtenida cerrando, por la inclusión de pentágonos, la lámina de grafeno; de los nanotubos de carbono, que presentan un comportamiento propio de una dimensión (1D), se forman al enrollar un plano de grafeno, y el grafito, material tridimensional (3D), está formado por el apilamiento de planos de grafeno.

Por otro lado, la estabilidad de capas monoatómicas de grafito ha resultado una sorpresa, ya que siempre se pensó que aisladas serían inestables. Su bidimensionalidad y sus propiedades electrónicas han atraído a un gran número de investigadores, ya que ofrece la posibilidad de construir dispositivos electrónicos. Sin embargo, hay que resaltar que el grafito ha interesado siempre porque muchas de las propiedades que se le atribuyen no tienen explicación dentro del marco teórico convencional. En los últimos años se han sucedido publicaciones de medidas de correlaciones ferromagnéticas a temperatura am-

biente o de superconductividad con temperatura crítica relativamente alta en muestras de grafito y en nanotubos, pero se desconoce el origen de estas fases por lo que es necesario encontrar un modelo microscópico que explique la naturaleza de las interacciones que dan lugar a estas propiedades. El hecho de que el grafito sea un material abundante, barato y biocompatible lo hace aún más atractivo.

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DEL GRAFITO

La configuración atómica del carbono es C_6 : $1s^2 2s^2 2p^2$, con seis electrones situados en orbitales s o p . El tipo de enlace entre los átomos determina las propiedades de los materiales que se forman: número de coordinación, red, distancia interatómica, energía de enlace, etc. Cuando los átomos de carbono se combinan para formar un sólido, presentan dos tipos de enlace:

Enlace sp^3 : un orbital s se combina con tres orbitales p , formando cuatro híbridos iguales sp , cada uno con un contenido de $1/4$ de carácter s . Los átomos se ordenan formando tetraedros, cada átomo tiene cuatro primeros vecinos.

Enlace sp^2 : un orbital s se combina con dos orbitales p , formando tres híbridos sp idénticos, coplanares formando ángulos de 120° entre ellos, con ordenamiento trigonal. El tercer orbital p queda perpendicular al plano de los híbridos. Cada átomo tiene tres primeros vecinos. Se forma una red hexagonal en el plano, los orbitales σ dan rigidez a la red y el orbital π , perpendicular al plano de los σ , da los portadores.

Los átomos de carbono con enlace sp^3 forman el diamante, el material más duro que se conoce, transparente, abrasivo y un buen aislante. Cuando los átomos de carbono forman enlaces sp^2 el material resultante es el grafito, uno de los materiales más blandos, opaco, lubricante y conductor.

Tanto el diamante como el grafito aparecen en la naturaleza y son conocidos desde la antigüedad. En la Figura 1 se ha representado esquemáticamente el enlace sp^3 y la red del diamante, dos redes centradas en caras (fcc) interpenetradas, los átomos forman enlaces covalentes.

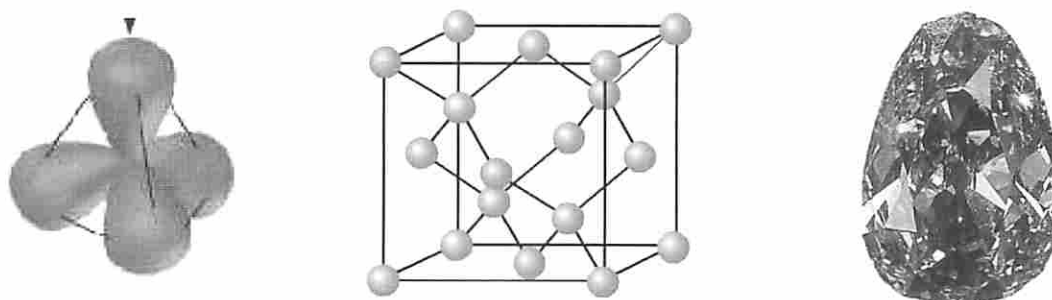


Figura 1. Representación esquemática del enlace sp^3 y de la red del diamante.

El grafito es un material laminar, con red hexagonal en los planos. En la Figura 2 se representa esquemáticamente el enlace sp^2 así como la correspondiente red cristalina.

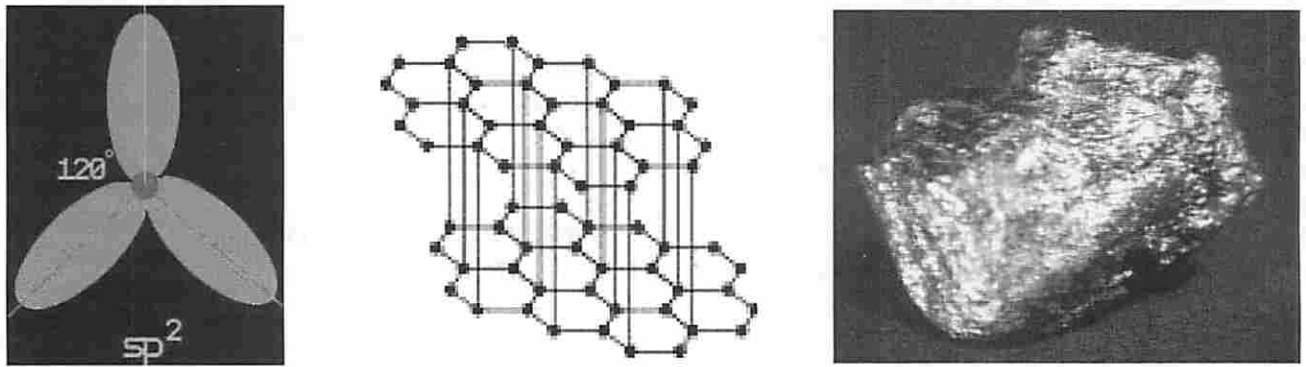


Figura 2. Representación esquemática del enlace sp^2 de estructura laminar del grafito; en los planos los átomos de carbono forman una red hexagonal.

El grafito presenta una gran anisotropía. Las distancias interatómicas en los planos son de 1,4 Å mientras que entre planos son de 3,5 Å. Los valores estimados para los parámetros, obtenidos por cálculos de teoría de bandas son $t_{ab} = 2,4$ eV entre átomos vecinos en los planos y $t_c = 0,3$ eV entre átomos situados en planos consecutivos. La gran diferencia entre estos dos valores parecía justificar la utilización de un modelo bidimensional para estudiar las propiedades electrónicas del grafito. En este modelo se desprecia la interacción entre las capas, por ser ésta mucho más pequeña que la que aparece en los planos, y se considera un único plano de

grafito, que es lo que ahora se ha denominado grafeno, aunque, como se ha indicado, siempre se pensó que no podría existir un plano aislado porque sería inestable. En este modelo bidimensional, los átomos de carbono se organizan formando una red hexagonal con dos átomos no equivalentes por celda unidad, por lo que se puede ver como dos subredes triangulares interpenetradas. Cada átomo perteneciente a un tipo o subred cuenta con tres primeros vecinos de la otra subred, como puede observarse en la Figura 3 donde se ha representado también la correspondiente zona de Brillouin que es un hexágono.

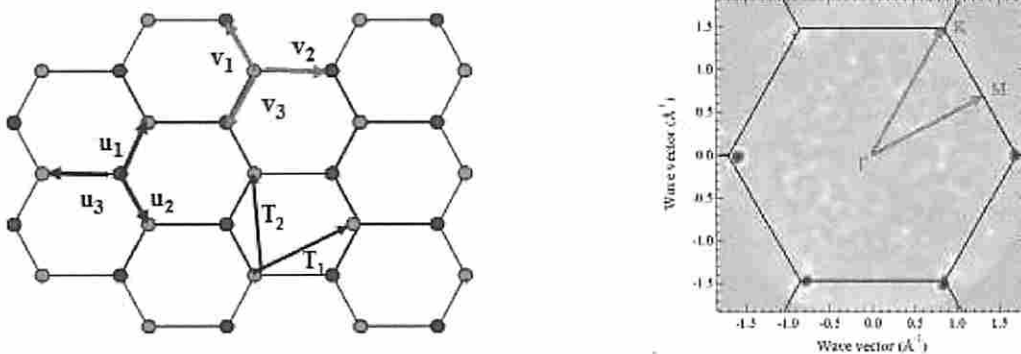


Figura 3. Red hexagonal con indicación de los dos átomos diferentes que dan lugar a las dos subredes. Zona de Brillouin de la red bidimensional.

Las propiedades del grafito se pueden calcular teniendo en cuenta únicamente los orbitales π que tienen energías cercanas a la energía de Fermi [2]. Por medio de un hamiltoniano de tipo ‘tight binding’ con interacciones a primeros vecinos:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^+ a_j,$$

con funciones de onda correspondientes a los dos átomos de la celda unidad:

$$\psi = \sum_{i_A} c_A e^{ikr_i} a_i^+ |0\rangle + \sum_{i_B} c_B e^{ikr_i} a_i^+ |0\rangle,$$

los coeficientes c_A y c_B deben ser soluciones de la ecuación:

$$\begin{pmatrix} 0 & -t \sum_j e^{iku_j} \\ -t \sum_j e^{ikv_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix}.$$

Resolviendo la ecuación se obtiene la relación de dispersión:

$$E(k) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} ak_x \right) + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} ak_x \right) \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} ak_y \right)}$$

que se ha representado en la Figura 4; las bandas de valencia (la banda llena de energía más alta) y de conducción (banda vacía de energía más baja) tienen un punto en común (están degeneradas) en los vértices de la zona de Brillouin. A medio llenar, con un electrón por orbital, el nivel de Fermi está situado en el punto medio de las bandas de valencia y de conducción, por lo que en lugar de una superficie de Fermi propiamente dicha el grafeno

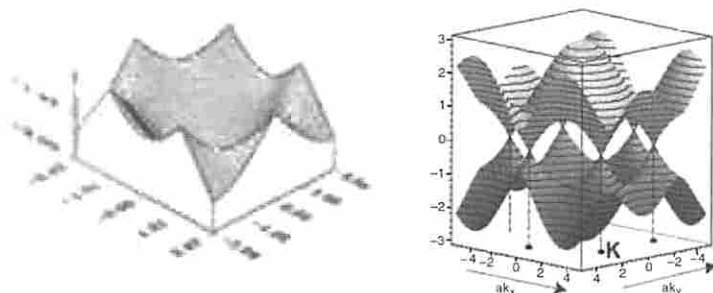


Figura 4. Relación de dispersión del grafeno, banda de valencia. En el esquema de la derecha se puede observar la degeneración de las bandas de valencia y de conducción en los seis vértices de la zona de Brillouin, que da lugar a los puntos de Fermi.

La relación de dispersión lineal juega un papel fundamental en las propiedades electrónicas del grafeno, que presenta una electrodinámica nada convencional.

En la proximidad de los puntos de Fermi, por medio de un desarrollo en serie de Taylor, se puede derivar un modelo efectivo de baja energía, determinado por la simetría de la red hexagonal,

$$\langle H \rangle = \frac{3}{2} t a \begin{pmatrix} 0 & \delta k_x + i \delta k_y \\ \delta k_x - i \delta k_y & 0 \end{pmatrix}$$

que resulta ser el hamiltoniano de Dirac:

$$H_{eff} = \hbar v_F (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y)$$

donde $\hbar v_F = (3/2) t a$ y σ son las matrices de Pauli. En la Figura 5 se puede observar la forma cónica que presenta la relación de dispersión en la proximidad de los puntos de Fermi; también se ha representado la densidad de estados correspondiente a estas bandas lineales, densidad que varía linealmente en función de la energía y se anula en el nivel de Fermi. La densidad de estados nula en

presenta seis puntos de Fermi, dos de los cuales, K y K', no son equivalentes.

En la proximidad de estos puntos de Fermi, la relación de dispersión es lineal en k ,

$$E(k) = \hbar v_F |k|$$

en lugar de presentar la dependencia cuadrática de los metales o de los semiconductores convencionales:

$$E(k) = \hbar^2 \frac{|k^2|}{2m^*}$$

cuya física se rige por la ecuación de Schrödinger.

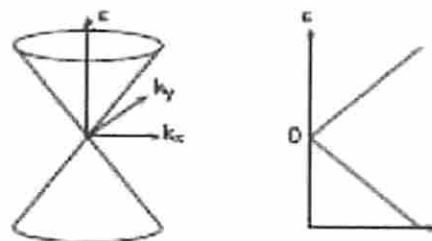


Figura 5. Relación de dispersión lineal en la vecindad de un punto de Fermi; la gráfica de la derecha representa la densidad de estados en función de la energía, correspondiente a las bandas lineales.

el nivel de Fermi implica que la interacción de Coulomb, que en los metales está apantallada, en el grafeno no se apantalla. El tiempo de vida de las cuasipartículas presenta una dependencia lineal en la energía, en el rango de energías bajas, en contraste con la dependencia cuadrática que presentan los metales convencionales, que se pueden estudiar según el modelo de Landau del líquido de Fermi.

Las partículas de Dirac, como hemos visto en el grafeno, forman bandas lineales en la proximidad de los puntos de Fermi y presentan una masa efectiva $m^* = 0$, (la masa efectiva es el parámetro que describe cómo responde un electrón a las fuerzas aplicadas); que la masa efectiva se anule indica que la velocidad de los electrones confinados en el grafeno se mantiene constante.

En el grafito tridimensional, formado por el apilamiento de capas y teniendo en cuenta la débil interacción entre planos del tipo de las fuerzas de van der Waals, las bandas solapan ligeramente, por lo que se forman 'pockets' de huecos y electrones y varía la relación de dispersión. La densidad de portadores en el grafito es más baja que en un metal, por eso se considera un semimetal.

GRAFENO

En 2004, un equipo de la Universidad de Manchester consiguió, por medio de exfoliación de muestras de grafito pirolítico altamente orientado (HOPG), aislar diferentes películas de grafito, con grosores del orden de distancias atómicas, entre las que encontraron algunas formadas por un único plano, con un espesor de 1 Å. Las películas se depositaron en un sustrato de SiO₂ y se estudiaron sus características controlando sus propiedades eléctricas por medio de la aplicación de voltaje externo [1]. Encontraron que estas películas eran semimetales bidimensionales. El comportamiento de la resistividad ρ y de la conductividad σ , así como del coeficiente Hall R_H que observaron, se puede explicar con un modelo de metal bidimensional con un pequeño solape entre las bandas de valencia y de conducción. Aplicando campos magnéticos midieron el efecto Hall cuántico en grafeno, que presenta factores de llenado semi-enteros de acuerdo con las predicciones teóricas.

En 2005, un equipo de la Universidad de Columbia consiguió también aislar planos de grafeno por exfoliación micromecánica de una muestra de grafito tipo Kish, confirmando los resultados anteriores [3]. La conductividad del grafeno nunca cae por debajo de un valor aunque la concentración de portadores tienda a cero, este valor mínimo resulta ser el *cuanto de conductancia*. Estas propiedades coinciden con las de un gas bidimensional de partículas descritas por la ecuación de Dirac.

Se confirma así la existencia del grafeno, que es termodinámicamente estable, químicamente inerte y cristalino en condiciones normales. Los fuertes enlaces covalentes entre sus átomos explican su rigidez y sus propiedades electrónicas, consecuencia de la topología de la red hexagonal, son diferentes de las de los sistemas bidimensionales convencionales.

Estos resultados han abierto la posibilidad de fabricar dispositivos magnetoelectrónicos basados en carbono, más factible quizás que la que ofrecen los nanotubos de carbono. Las propiedades electrónicas de los nanotubos son también asombrosas: se ha medido transporte balístico incluso a temperatura ambiente, con alta longitud de coherencia; presentan carácter metálico o semiconductor dependiendo únicamente de su geometría (del ángulo que forman los hexágonos con el eje del nanotubo); pero por su carácter unidimensional presentan dificultades de manipulación y la realización de los contactos es especialmente delicada. Sin embargo, en el grafeno, una lámina bidimensional, los contactos parecen menos problemáticos.

La posibilidad de sustituir la microelectrónica actual, con dispositivos basados en heteroestructuras de semiconductores fabricadas por la técnica de crecimiento epitaxial por haces moleculares, por una nueva microelectrónica basada en carbono es muy prometedora. El procesado de las muestras de grafeno es mucho más

sencillo y barato y presenta unas propiedades de transporte (alta conductividad y larga trayectoria libre media) que se pueden controlar aplicando un voltaje externo, que lo hacen ideal para la fabricación de dispositivos electrónicos.

También se ha conseguido controlar y medir las propiedades electrónicas y de transporte de una bicapa de grafeno, lo que ha permitido confirmar las predicciones teóricas para este sistema.

Muy recientemente, midiendo con la técnica de fotoemisión con resolución angular (ARPES), que analiza la energía y el momento de los electrones arrancados de la muestra por los fotones incidentes, en una muestra de grafito monocristalino se ha confirmado la existencia de partículas de Dirac, con una relación de dispersión lineal, que en el grafito conviven con otras que presentan la dispersión parabólica [4].

EFFECTOS DE LOS BORDES DE LA RED

Una de las características peculiares de la red hexagonal es la influencia que tienen en las propiedades electrónicas las formas de los bordes. Los bordes de una lámina de grafito se pueden describir como una combinación de dos tipos de terminación: la conocida como 'zig-zag', en la que sólo aparecen átomos de una de las subredes, y la denominada 'armchair', en la que los átomos pertenecientes a las dos subredes alternan. En la Figura 6 se pueden observar estos dos tipos de borde.

La influencia de estos dos tipos de terminación en las propiedades electrónicas se ha analizado calculando las propiedades electrónicas de cintas (ribbons) de la red del grafeno con distintas anchuras. Las cintas con bordes de tipo 'armchair', a parte de la esperada dependencia de las propiedades con la anchura, no presentan diferencias con la estructura electrónica de una lámina de grafito bidimensional. Sin embargo, en cintas terminadas en 'zig-zag' la banda de valencia y la de conducción están degeneradas en $K = \pi$ y las correspondientes funciones de onda están localizadas en los sitios (átomos) de los bordes. Estos estados localizados están en la energía de Fermi y no aparecen en el volumen. Éste es un efecto debido a la topología de la red hexagonal de electrones de tipo π con bordes 'zig-zag'. Se puede comprobar que únicamente tres o cuatro sitios zig-zag por secuencia son suficientes para obtener un estado localizado en el borde.

PROPIEDADES MAGNÉTICAS

La aparición de señales magnéticas en muestras de compuestos orgánicos y en grafito ha sido otra de las asombrosas propiedades de este material. Aunque hace más de veinte años que se publican resultados de este tema, son difíciles de reproducir porque dependen de

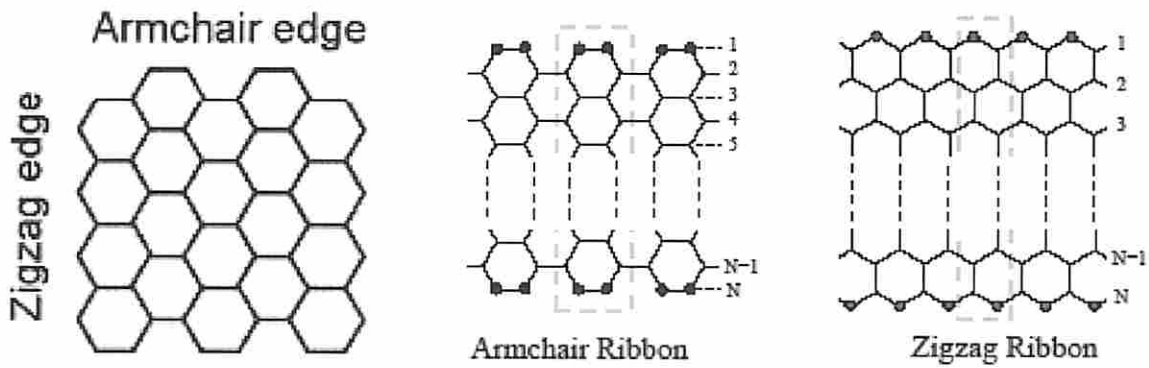


Figura 6. Tipos de terminación de la red hexagonal: 'zig-zag' con átomos de una subred y 'armchair' con átomos de las dos subredes alternando. Se representan esquemáticamente dos cintas con los bordes 'armchair' y 'zigzag'.

las condiciones ambientales. Por otro lado, los materiales que exhiben ferromagnetismo, ordenamiento microscópico de los momentos magnéticos atómicos, tienen una interacción de canje de origen electrostático entre los momentos magnéticos localizados de átomos vecinos o un canje efectivo de los electrones itinerantes desapareados, conceptos que están asociados a materiales con electrones de tipo $3d$ o $4f$, y el carbono, como se ha dicho, sólo tiene electrones de tipo s y p para los que no existe una teoría del magnetismo. Debido a todo esto, la existencia de correlaciones magnéticas en grafito, es un tema muy polémico. Pero la posibilidad de fabricar imanes orgánicos es un reto importante ya que sus aplicaciones son múltiples y presentan muchas ventajas, porque serían biocompatibles, limpios y baratos.

Aunque no existe un consenso, sí se han publicado algunas predicciones teóricas del magnetismo en sustancias orgánicas, como el modelo de McConell que predice canje ferromagnético en cadenas cuasi-unidimensionales, donde radicales (cationes) de donantes D^+ alternan con radicales aniones de aceptores A .

Otra teoría es la de Ovchinikov, que propuso un modelo de polímeros π -conjugados donde podría darse un acoplamiento ferromagnético entre espines. La mezcla de átomos con coordinación sp^2 y sp^3 que juegan el papel de elementos con valencias diferentes parece favorecer el ferromagnetismo. Este mismo canje aparecería en estructuras de carbono con elementos trivalentes del tipo del nitrógeno, fósforo o boro.

También se han medido señales ferromagnéticas en muestras de nanografito, nanodiamante y en fullerenos.

En 1996 se habla de una magnetización espontánea del carbono a temperatura ambiente. Siguió muchos experimentos en que se medía magnetismo a temperatura ambiente en muestras orgánicas sin impurezas metálicas, pero no se puede descartar totalmente que este ferromagnetismo tenga un carácter extrínseco ya que la contaminación con hierro parece inevitable y, aunque sea mínima, su distribución en la muestra puede ser crítica. Aunque las dependencias de las propie-

dades magnéticas medidas sólo se explican por propiedades intrínsecas de los materiales, el ferromagnetismo depende fuertemente de las condiciones de preparación, tiempo de reacción, temperatura, atmósfera y el material inicial. El contenido en hidrógeno de las muestras parece favorecer la aparición del magnetismo.

En el año 2000 se midió un ciclo de histéresis ferromagnético en HOPG con un campo magnético aplicado en la dirección paralela a los planos, $H_{||}$, el momento magnético medido es proporcional al volumen de la muestra, lo que indica que este ferromagnetismo es una propiedad del volumen. Después de recocer a 800 K la muestra, en atmósfera de He se comprobó que la señal magnética estaba reforzada. No se encontró correlación entre la magnetización de saturación (ni remanente) y la fuerza coercitiva con la concentración de impurezas de hierro. Todo esto parece indicar que la señal ferromagnética tiene una naturaleza intrínseca. El análisis de la muestra por la técnica de microscopía de fuerzas atómicas (AFM) sugiere que los defectos topológicos pueden estar relacionados con las correlaciones ferromagnéticas observadas.

Otros trabajos han presentado medidas de ferromagnetismo en muestras de HOPG irradiadas con protones. Se observó una relación entre la saturación del momento magnético y la carga total irradiada. La magnetización a saturación alcanza el 1% de la de la magnetita, es estable a temperatura ambiente y la concentración de impurezas de hierro de la muestra es despreciable, por lo que no puede producir esta señal.

También se han publicado medidas de SQUID (Superconducting Quantum Interferometer Device) y de MFM (Microscopía de Fuerzas Magnéticas) que confirman que el orden magnético aparece después de la irradiación de la muestra. Parece que la irradiación con iones de helio produce señales magnéticas significativamente menores que la radiación con hidrógeno. Esto sugiere que el hidrógeno juega un papel en la aparición de ferromagnetismo en grafito, aunque el origen de estas correlaciones se desconoce por el momento. Por com-

paración de imágenes tomadas con microscopio de fuerzas atómicas (AFM), que indican la topografía de la superficie, con las medidas por microscopía de fuerzas magnéticas (MFM), que describen el comportamiento magnético, se ha encontrado una relación entre los defectos topográficos y las propiedades magnéticas de muestras de grafito, que presentan un ferromagnetismo débil pero que persiste hasta temperaturas por encima de los 300 K [5].

Como hemos visto, la forma de los bordes de las muestras con red hexagonal tiene efectos en sus propiedades electrónicas. Estos efectos son especialmente importantes en muestras de pequeño tamaño como el nanografito o el nanodiamante.

Ante la aparición de estados localizados debidos a los bordes de tipo 'zig-zag' y la relación que las medidas experimentales sugieren entre defectos, desorden y correlaciones magnéticas, parece razonable analizar los efectos que tendrían, en las propiedades electrónicas, vacantes y defectos extendidos con bordes 'zig-zag', grandes rotos como el representado esquemáticamente en la Figura 7. Estos rotos son el tipo de defecto que se puede producir en las muestras bombardeadas por protones. En el roto representado en la Figura 7, los áto-

mos del borde de arriba pertenecen a una subred son de tipo A, mientras que los de abajo pertenecen a la otra, son del tipo B. Estos rotos, al igual que la vacante representada a la izquierda, dan lugar a estados localizados en el nivel de Fermi. En un plano neutro de grafito, modelizado por un 'cluster', estos estados están a medio llenar. La inclusión de una interacción de Coulomb, por pequeña que sea ($U \approx 0,5 t$, $t \approx 1,4 eV$) produce una polarización de los estados localizados. Estos mismos resultados se obtienen considerando un número arbitrario de vacantes en la red. La polarización total del cluster es proporcional al exceso de átomos de una subred con respecto a la otra en el borde [6]. Sólo los estados que están próximos a los defectos contribuyen a la formación de momentos locales. Estos momentos locales interactúan con los estados extendidos que intervienen con una interacción de tipo Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) entre los momentos locales de defectos vecinos. La interacción RKKY en un metal convencional presenta oscilaciones de periodo $2K_F$ debido a la presencia de una superficie de Fermi completa.

En una lámina de grafito, como se ha visto anteriormente, no existe una verdadera superficie de Fermi sino

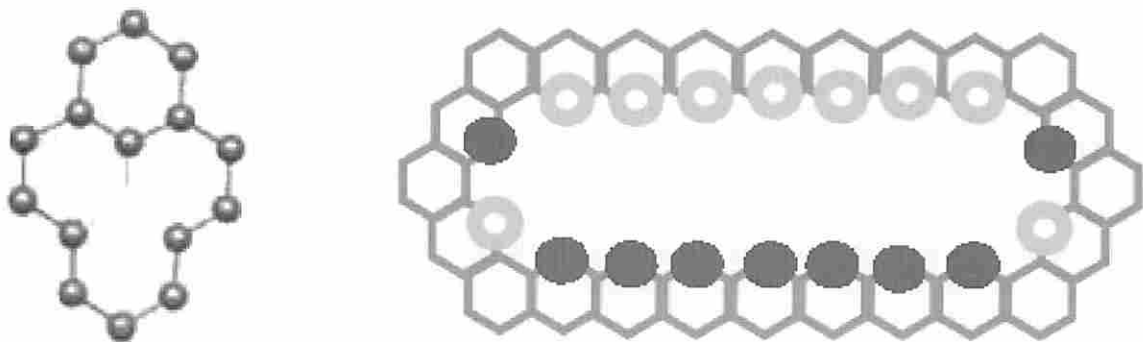


Figura 7. Representación esquemática de una vacante y de un defecto extendido en la red hexagonal. En el defecto los bordes son de tipo 'zigzag'.

dos puntos de Fermi. Debido a esta ausencia de superficie de Fermi, la RKKY en grafito neutro no presenta oscilaciones y el acoplamiento en los momentos magnéticos resulta ser ferromagnético. Estas correlaciones ferromagnéticas que se obtienen en el cálculo presentan una temperatura de Curie mucho más baja que la obtenida en las medidas experimentales en muestras de grafito, que en algunos casos llega a temperatura ambiente. La inclusión del desorden en este modelo incrementa la temperatura de Curie.

CONCLUSIONES

Los materiales basados en carbono ofrecen un campo de estudio muy interesante desde el punto de vista conceptual. El grafito, los fullerenos como el C_{60} , los nano-

tubos y, ahora, el grafito presentan propiedades físicas que no se pueden explicar en el marco de la física convencional y, además, ofrecen posibilidades para ser la base del desarrollo de una nueva nanoelectrónica basada en carbono. No es un reto fácil ya que la manipulación y control de estas muestras entraña grandes dificultades, pero en los últimos tiempos se ha conseguido un gran avance en las técnicas experimentales y en los procesos de síntesis y preparación de muestras.

El reciente aislamiento de una monocapa atómica de grafito de 1 \AA de espesor ha marcado un hito en el campo de la materia condensada, ya que constituye un sistema bidimensional en el que los portadores de carga no se pueden describir con la ecuación de Schrödinger no relativista, como estamos acostumbrados. En el grafito, un semimetal o un semiconductor de gap cero, el transporte de carga se rige por la ecuación

ción de Dirac (relativista), los portadores de carga se comportan como partículas relativistas con masa efectiva, en reposo, cero y velocidad de aproximadamente 10^6 m s^{-1} (unas 300 veces menor que la velocidad de la luz). La movilidad de los portadores, $\mu = \sigma/ne$, alcanza valores muy altos de $15.000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, que son independientes de la temperatura en el rango de 10 K a 100 K. La conductividad del grafeno nunca baja de un valor mínimo, el cuanto de conductancia, incluso cuando la concentración de portadores tiende a cero. La observación de un efecto Hall cuántico en grafeno¹ que, de acuerdo con las predicciones teóricas [7], presenta los 'plateaux' de cuantización con una secuencia $(n + 1/2)$ en lugar de n , es inusual y propio únicamente del grafeno, es decir, de una capa atómica de grafito, ya que en muestras con dos capas la secuencia de los 'plateaux' va como n [8]. Todas estas características hacen del grafeno un sistema de materia condensada donde se pueden estudiar fenómenos de teoría cuántica de campos. Además, como se ha indicado, sus asombrosas propiedades electrónicas hacen suponer que en los próximos años se pueda utilizar en la construcción de dispositivos electrónicos.

Las correlaciones ferromagnéticas medidas en muestras de grafito son objeto de mucha atención, ya que la posibilidad de fabricar imanes orgánicos es sumamente interesante. El carbono es abundante en la naturaleza, barato, biocompatible, por lo que no es contaminante ni pernicioso para el medioambiente y, además, podría te-

ner grandes aplicaciones en medicina para pruebas de diagnóstico.

Se da así la paradoja de poder incluir en la denominación de nuevos materiales a uno de los materiales más antiguos: el carbono.

REFERENCIAS

1. K.S. Novoselov *et al.* Science, **306**, 666 (2004); Nature, **438**, 197 (2005).
2. P.R. Wallace. Phys. Rev., **71**, 622 (1947).
3. Y. Zhang *et al.* Nature, **438**, 201 (2005).
4. S.Y. Zhou *et al.* Nature Physics, **2**, 595 (2006).
5. P. Esquinazi *et al.*, en *Carbon based materials magnetism*, Elsevier Science, T. Makarova y F. Palacio (editores), Capítulo 19, 437 (2006).
6. F. Guinea, M.P. López-Sancho, and M.A. Hernández-Vozmediano, en *Carbon based materials magnetism*, Elsevier Science, T. Makarova y F. Palacio (editores), Capítulo 15, 353 (2006); Phys. Rev. B, **72**, 155121 (2005).
7. N.M. Peres, F. Guinea, and A.H. Castro Neto. Phys. Rev. B, **73**, 125411 (2006).
8. K.S. Novoselov *et al.* Nature, **438**, 197 (2005).

M.P. López Sancho, F. Guinea

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid-CSIC

y M.A. Hernández Vozmediano

Universidad Carlos III de Madrid

(forman parte de la Unidad Asociada UC3M-CSIC)

¹ Cuando se aplica un campo magnético alto a muy baja temperatura a un gas bidimensional de electrones, la resistividad Hall se cuantiza tomando valores discretos h/ne^2 siendo n un número entero positivo, este fenómeno se conoce como efecto Hall cuántico.

COLABORACIONES

Ciencias de la Naturaleza

La Química Verde

La Química es una de las ciencias que más contribuye a la mejora de la calidad y al bienestar de la humanidad; sin embargo, los beneficios que produce no pueden realizarse a expensas del medio ambiente.

La denominada *Química Verde* o *Química Sostenible* surge con el fin de minimizar la contaminación y desarrollar nuevos métodos menos

agresivos con el medio ambiente. Ambos términos se usan indistintamente, siendo el primero el más utilizado por su evocación a la naturaleza, aunque la *International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC) acepta el uso de ambos términos como sinónimos.

La consolidación de la Química Verde se produce en la década de los noventa y P.T. Anastas y J.C. Warner la definen como sigue: "*La Química Verde consiste en la utili-*

zación de una serie de principios encaminados a reducir o eliminar el uso y generación de sustancias peligrosas en el diseño, fabricación y aplicación de los productos químicos."

LOS DOCE PRINCIPIOS DE LA QUÍMICA VERDE

El diseño de productos y procesos medioambientalmente benignos