

Carbono magnético

El carbono sigue revelando secretos

Por Ricardo Faccio, Helena Pardo y Alvaro Mombrú*

En Uruguay se investigan las variedades de materiales que se pueden obtener a partir del carbono como los fullerenos, moléculas de carbono descubiertas hace 30 años, y del grafito, del que se puede obtener el grafeno, una lámina de carbono del grosor de un átomo. Se ha producido un material gráfitico con propiedades magnéticas y ahora se estudia el grafeno prediciendo las propiedades magnéticas de este al hacerle ciertas modificaciones.

Corría el año 1985 cuando Harry Kroto, de la Universidad de Sussex en Inglaterra, y Robert Curl y Richard Smalley, de Rice University en Texas, durante una investigación sobre la composición del polvo estelar, descubrieron los fullerenos, una nueva forma del carbono, o sea un alótropo, que se sumó a los ya conocidos grafito y diamante. (1)

Los investigadores reprodujeron experimentalmente en un laboratorio las condiciones en las que dicho polvo

se forma en el espacio exterior y se encontraron con un material inesperado, formado por 60 átomos de carbono, que no podían explicar.

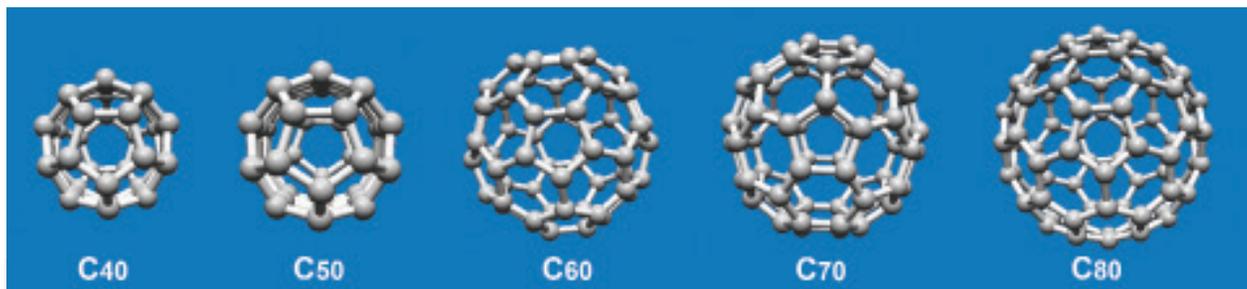
A diferencia del grafito y del diamante, que están hechos de redes infinitas de átomos de carbono unidos entre sí de formas particulares para cada alótropo, en este caso el número de átomos de carbono, que en forma consistente se reproducía en todos los experimentos, 60, los llevó a concluir que estaban frente a una forma molecular del carbono, es decir unidades cerradas constituidas por conjuntos de átomos de carbono, lo que constituía algo nunca visto.

En una clara impronta filosófica sobre la forma que podía adoptar el elemento de la vida, y a falta de mayor información adicional por la escasa cantidad de muestra producida, partieron de la suposición que un elemento tan fundamental en estado puro debía adoptar muy altas simetrías. (2)

Por ello comenzaron con el estudio de los sólidos platónicos -tetraedro, octaedro, cubo, icosaedro y dodecaedro-, a la búsqueda de candidatos que pudieran representar de la mejor manera a este nuevo alótropo molecular del carbono. Luego de descartar las demás formas, concluyeron que el icosaedro trunco (3), con sus 60 vértices, formados a partir de 30 hexágonos y 12 pentágonos, tenía todas las condiciones para reproducir al



Diego Forlán en sus tiempos del Manchester United junto a Harry Kroto (Foto gentileza de Gill Watson)



Fullerenos: Moléculas de C40, C50, C60 (la más abundante y la de mayor importancia, con forma de icosaedro trunco), C70 (la que le sigue en importancia y abundancia) y C80. Todas las moléculas se muestran enfocadas a lo largo de un eje de simetría. Se puede ver cómo los pentágonos que están en los polos quedan paralelos en las moléculas de C50 y C70, y cómo quedan antiparalelo en C40, C60 y C80, revelando aspectos que dirigen la construcción de las moléculas y cómo los mismos cambian de 10 en 10.

La simetría es de orden 5 en todas estas moléculas -es decir, repiten el mismo objeto si se gira 72° (360°/5). Todos los fullerenos están regidos por esa simetría, todos se construyen a partir de un pentágono ubicado en su polo, desde donde se genera toda la molécula. Al finalizar esta construcción, quedan 12 pentágonos en total, uno en cada polo y dos niveles de 5 pentágonos cada uno. Esta construcción y simetría es común incluso en los fullerenos muy voluminosos, en donde se verifican los 12 pentágonos, pero más separados por hexágonos. Los fullerenos se curvan en los pentágonos, por lo que estas figuras geométricas son responsables de la simetría de la molécula pero también de su forma cerrada: sin pentágonos no habría fullerenos moleculares, sino tubos.

C60, y lo bautizaron buckminsterfullereno, en homenaje al arquitecto Richard Buckminster Fuller, creador de los domos (o cúpulas arquitectónicas) icosaédricos que inspiraron este descubrimiento. A todas las demás moléculas que se pudieran formar, siempre con números pares de átomos de carbonos, las denominaron fullerenos.

Coincidentemente el icosaedro trunco es la forma más habitual de los balones de fútbol, como queda evidenciado en la foto en donde Harry Kroto posa con Diego Forlán.

El descubrimiento de los fullerenos abrió un mundo nuevo a investigar, con gran diversidad de materiales carbonosos posibles de ser construidos y con propiedades físicas de potencial interés tecnológico.

Desde entonces hasta la fecha se han registrado más de 23.000 publicaciones de artículos de investigación y 2.700 patentes relacionadas con fullerenos.

Curl, Kroto y Smalley recibieron el Premio Nobel de Química en 1996 por su descubrimiento.

Otro mojón de gran impacto en esta historia fue la preparación, en 1991, de nanotubos de carbono. Éstos despertaron gran interés y han sido objeto de intensa

investigación, publicándose 7 artículos científicos sobre ellos en el año 1992 y acumulando unos 85.000 artículos y más de 9.000 patentes desde entonces. (4)

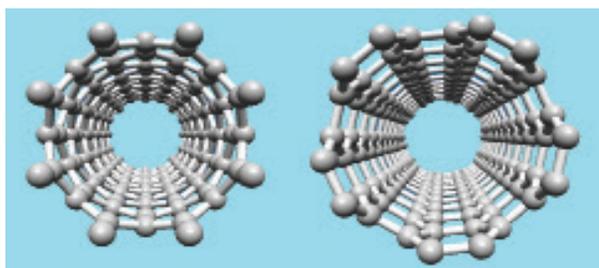
De hecho, no es equivocado asumir que los fullerenos marcaron el comienzo de la nanociencia y de la nanotecnología. En buena medida los productos nanotecnológicos tienen como centro el uso y aplicaciones de nanopartículas y nanotubos, y el interés en éstos se disparó en 1992 con la preparación de nanotubos inorgánicos, claramente inspirado en los fullerenos, por parte de Reshef Tenne del Instituto Weizmann en Rehovot, Israel.

Se trata de un ejemplo muy emblemático de un estudio de ciencia básica -estudio de composición de polvo interestelar- que termina abriendo una rama tecnológica con muy prometorias consecuencias tecnológicas e industriales. Esto constituye un ejemplo más que significativo de la importancia del desarrollo de las ciencias básicas.

Grafito y grafeno

El grafito es un material conocido por el hombre desde la antigüedad y consiste en un apilamiento alternado de láminas de átomos de carbono que se unen entre sí por interacciones débiles. En cada lámina los átomos se unen formando una estructura hexagonal. Si se aísla una lámina del mismo, se obtiene el grafeno, una lámina bidimensional de átomos de carbono con estructura hexagonal tipo "panal de abejas" y que tiene el espesor de un átomo. La obtención de este material ocurrió en 2004, constituyendo el tercer mojón de gran impacto en esta historia.

El grafeno presenta propiedades físicas muy interesantes tales como: alta conductividad eléctrica y térmica, buenas propiedades de elasticidad (deformable), alta



Nanotubos de carbono en configuraciones zigzag y sillón

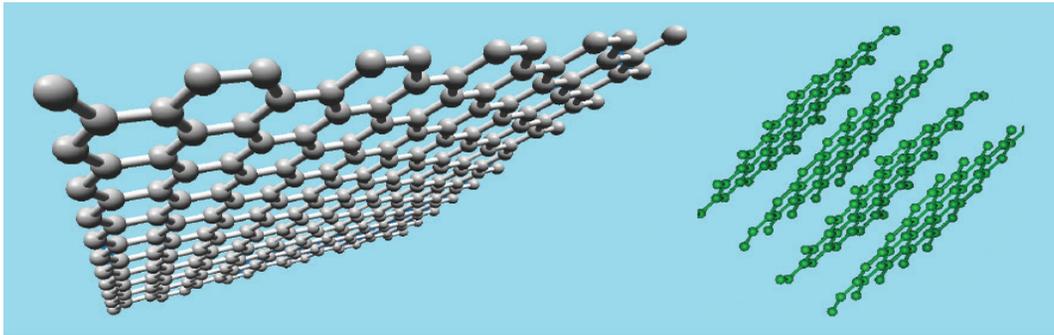


Lámina de grafeno (a la izquierda) e imagen de grafito (a la derecha) donde puede verse que es un apilamiento de láminas de grafeno

dureza (difícil de rayar), alta resistencia (más de 100 veces más resistente que el acero, pero mucho más ligero), mayor flexibilidad que una fibra de carbono -fibra sintética de carbono que se utiliza como agregado a otros materiales para otorgarles mayor resistencia, y que se usa en aeronáutica, transporte e incluso en deportes-, es transparente y muy selectivo a la hora de evaluar su permeabilidad a gases y agua. Como se observa, es un material orgánico pero que presenta propiedades comparables a las de un perfecto metal. Es muy liviano, y exhibe propiedades mecánicas comparables al acero o mejores.

En electrónica, podemos mencionar su uso en transistores de efecto campo o FET (por sus siglas del inglés: *Field-Effect Transistor*), utilizados en circuitos integrados, permitiendo tener procesadores que funcionen a mayor velocidad y con un consumo eléctrico inferior, mejorando así su eficiencia. En especial el grafeno, bajo ciertas circunstancias, permite que se tenga un control sobre el espín de sus electrones, haciendo que los circuitos de grafeno puedan ser conductores de electrones con un espín en particular (campo de la espintrónica) (5), con aplicaciones en informática para almacenamiento de información en computadoras de menor tamaño y más rápidas.

Por otra parte en el campo de la fotónica (campo relacionado con la óptica), su buena conductividad eléctrica junto a su transparencia óptica lo presenta como un

material muy interesante para celdas solares, ya que se trata de un conductor transparente que deja pasar y coleccionar la radiación solar al tiempo que conduce la corriente eléctrica del circuito.

Finalmente, el grafeno es impermeable a ciertos gases, pero permite pasar el agua, con una velocidad de evaporación similar a la obtenida en un recipiente abierto. Esto abre posibilidades en el tratamiento de efluentes, desalinización de aguas, etc.

Prueba de la importancia y potencialidad del grafeno son las más de 34.000 publicaciones acumuladas en esta última década y las más de 1.500 patentes solicitadas, de las cuales más de 600 se registraron en 2013. (4)

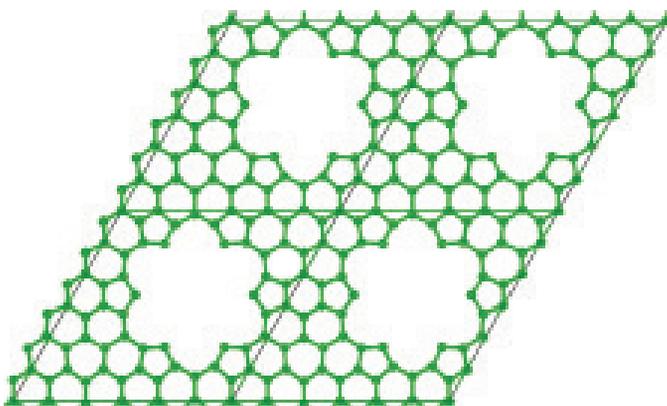
Andre Geim y Konstantin Novoselov, de la Universidad de Manchester, recibieron el Premio Nobel de Física de 2010 por “experimentos fundamentales respecto al material bidimensional grafeno”.

Creando Defectos

En Uruguay se ha venido desarrollando investigación en los materiales mencionados. Una de ellas fue llevada adelante entre 2001 y 2006 y condujo a la preparación de un material grafitico con propiedades magnéticas que hacen que sea atraído por un imán (6). Esta innovación produjo una patente que fue aprobada en Estados Unidos en diciembre de 2011 (7). El procedimiento consistió en la introducción de defectos en el grafito a nivel de su nanoestructura -fundamentalmente creación de vacancias, es decir, la remoción de átomos de carbono creando huecos-, los que condujeron a que este material tuviera un comportamiento magnético tan evidente que hasta es observable a temperatura ambiente.

Avanzando en la explicación teórica del magnetismo absolutamente inesperado que se observa en estos materiales de grafito, los mismos investigadores, autores de esta nota, han modelado matemáticamente la aparición de vacancias en grafito y en grafeno (8) -por modelado se entiende la simulación computacional que trata de reproducir a través de modelos fisicomatemáticos, las características estructurales y electrónicas reales de los materiales.

Cuando se remueve un átomo de carbono del grafito, se produce un desbalance en la densidad electrónica, lo que hace que el material genere un campo magnético (señal magnética) que puede medirse e incluso tener



Sistema grafénico con vacancias de orden 18 que le dan alta simetría y armonía. Se retiraron 18 átomos de carbono por hueco

respuesta ante un imán (ser atraído). Como el grafeno, por tratarse de una lámina única, es un material menos robusto que el grafito, que está compuesto por varias láminas interconectadas, al retirarle átomos para crear vacancias se provocan deformaciones de importancia. En aquellos casos en que se remueve un número considerable de átomos y si dicha extracción se realiza contemplando figuras de alta simetría, se producen noveles materiales de gran estética. Por ejemplo, al dibujarse un esquema de la capa de grafeno con vacancias puede verse que la deformación produce figuras en las que los pentágonos, que se forman al permitir la optimización del sistema, rigen la forma, en general formando estructuras de muy alta simetría y armonía, que mucho recuerdan el perfecto balance de pentágonos y hexágonos de los fullerenos.

Al igual que con el surgimiento de los fullerenos, el estudio de sistemas grafíticos o grafénicos con multivacancias abre las posibilidades a nuevos materiales carbonosos con propiedades novedosas e inexploradas, lo que podría redundar, por ejemplo, en materiales con potenciales usos en espintrónica (5), permitiendo la conducción de corrientes en un canal seleccionado. Por lo pronto los autores de esta nota han desarrollado reglas que permiten predecir la presencia o no de magnetismo en este tipo de materiales, de acuerdo con la configuración del segmento de carbono extraído, lo que permite tener una perspectiva más ágil para abordar el estudio de estos sistemas multivacantes. Asimismo se ha estudiado la estabilidad de estos sistemas de grafeno con vacancias, de acuerdo con la configuración de los huecos formados. Todo lo anterior es una contribución que se realiza desde Uruguay a la comprensión de un tema de gran impacto y actualidad.

Notas

1. Kroto H W, Heath J R, O'Brien S C, Curl R F and Smalley RE (1985), C60: Buckminsterfullerene, *Nature* 318 162

2. Por simetría alta se entiende una figura o cuerpo que permite varias operaciones de simetría. Por ejemplo, un triángulo equilátero es más simétrico que uno isósceles y éste, más que uno escaleno. En el primero, los tres vértices son idénticos, los tres lados también son indistinguibles, las tres alturas también, etc. En un triángulo isósceles, dos vértices son idénticos, pero el tercero no, dos lados son indistinguibles, pero el tercero no, etc. En el triángulo escaleno, no hay simetría y los tres vértices al igual que las tres aristas, son diferentes entre sí. Esta misma línea de razonamiento se extiende a cuerpos tridimensionales.

3. Un icosaedro trunco es un icosaedro (figura geométrica de 20 caras compuesto de triángulos equiláteros) al que se le cortan los vértices, aumentando el número de caras y cambiando la forma de estos a hexágonos y pentágonos.

4. Fuente SCOPUS, Portal Timbó. www.timbo.org.uy

5. La espintrónica es una nueva rama de la electrónica que utiliza una propiedad física de las partículas subatómicas; esta propiedad cuántica es una propiedad intrínseca de la partícula como lo es la masa o la carga eléctrica, se denomina spin y está vinculada a su respuesta frente a un campo magnético

6. Mombrú A W, Pardo H, Faccio R, de Lima O F, Leite E R, Zanelatto G, Lanfredi A J C, Cardoso C A and Araújo-Moreira F M (2005) Multilevel ferromagnetic behavior of stable room temperature bulk magnetic graphite, *Phys. Rev. B* 71 100404(R).

7. Araújo-Moreira, FM, Pardo H, Mombrú AW, US Patent and Trademark Office, Patente número 8075793, expedida el 13/12/2011

8. Faccio R, Mombrú A W (2012) Magnetism in multivacancies graphene systems, *J. Phys.:Condens. Matter* 24 375304.

* **Ricardo Faccio, Helena Pardo y Alvaro Mombrú** son docentes e investigadores de la Facultad de Química, Polo Tecnológico de Pando, Cátedra de Física, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA), Universidad de la República (Udelar) y del Centro Interdisciplinario en Nanotecnología y Química y Física de Materiales, Espacio Interdisciplinario, Udelar.

Filosofía de la Química

(Continúa de la página 25)

Utilidad

Dentro de una concepción utilitarista muchos se preguntarán para qué sirve filosofar sobre la ciencia o sobre la química en particular. En general, dado que el conocimiento de la realidad es una construcción social que se realiza a partir de lo que el ser humano percibe y cómo interpreta lo que percibe, analizar y comprender cómo se construye ese conocimiento, cuántas de las afirmaciones son correctas en sentido amplio o sólo en entornos limitados, cambia la forma de enseñar y de comunicar la ciencia por lo que este conocimiento es muy útil, en particular para los docentes y periodistas científicos o comunicadores de la ciencia, lo que a su vez puede reflejarse en cómo se producirá el conocimiento en el futuro.

Sobre cómo comunicar la ciencia al público general hizo una presentación otro uruguayo, Enrique Pandolfi.

Aprovechando la cercanía de la planta de pasta de celulosa, UPM, Pandolfi relató a los participantes del

simposio cómo se había dado el conflicto entre Argentina y Uruguay por la instalación de dicha planta y se refirió al debate sobre la no divulgación al público general de los resultados de los análisis realizados por la Comisión Administradora del Río Uruguay.

Para poder establecer una comunicación y un debate franco y claro con el público no científico sobre los temas de ciencia, Pandolfi opinó que debiera lograrse un cambio en las suposiciones, conceptos, valores y creencias que la sociedad acepta como verdaderas, en relación a los temas de ciencia y tecnología, las cuales moldean las respuestas y comportamientos de las personas. Dicho cambio debería llevar a que la industrialización deje de ser "el mal de la película", sin quitarle a la gente el derecho a buscar soluciones cuando realmente hay un problema.

***Patricia Linn** es Bachiller en Química por la Universidad de la República y Directora de la revista *Uruguay Ciencia*