

Opinión

Las rotaciones en la escala nanométrica: el efecto Moiré en los materiales 2D

Rotations at the nanoscale: the Moiré effect in 2D materials

Resumen

Desde hace ya varios años los materiales nanométricos bidimensionales (2D) han orientado el interés de los investigadores hacia el estudio cada vez más minucioso de sus propiedades y la forma en que éstas se pueden aprovechar, todo con la finalidad de llevar a niveles increíbles de eficiencia nuestra vida mediante el desarrollo de aplicaciones tecnológicas cada vez más avanzadas. Sin embargo, muy poco se ha revelado sobre un efecto conocido como Moiré, que ha aparecido en materiales 2D, generando propiedades formidables que podrían ser útiles en la recuperación de energía, la eliminación de compuestos utilizando procesos fotocatalíticos o, incluso, en la industria de fotodetectores.

Palabras clave: Rotaciones; Nanoescala; Efecto Moiré; Materiales bidimensionales; Aplicaciones tecnológicas.

Abstract

For several years now, two-dimensional (2D) nanometric materials have directed researchers' interest toward the increasingly detailed study of their properties and how these can be used to make our lives incredibly efficient by developing increasingly advanced technological applications. However, very little has been revealed about an effect known as Moiré that, in 2D materials, has generated super properties that could be useful in the recovery of energy, the elimination of compounds by photocatalytic processes, or even in the photodetector industry.

Keywords: Rotations; Nanoscale; Moiré effect; Bidimensional materials; Technological applications.

De lo macro a lo nano

Hoy la ciencia ha avanzado lo suficiente para permitir la observación de la materia en las formas más pequeñas imaginables con la ayuda de herramientas y equipos que fueron desarrollándose con la única intención de conocer el mundo examinándolo en su esencia. Tales dimensiones sólo se habían manejado en el plano teórico hasta hace unos años, pero actualmente el desarrollo de la escala nanométrica está en auge debido a que muchos de los materiales que se producen en ella presentan propiedades superiores a las de los materiales macro. El prefijo nano proviene del griego “nanos” que significa enano; esta dimensión nanométrica contiene todo aquello que se encuentra entre uno y cien nanómetros (nm) y que, por esta característica, no puede ser observado por el ojo humano. Para tener una comparación clara, un cabello humano tiene un diámetro de cerca de 60.000 nanómetros, es decir, 60 micrómetros (μm), o micras, grosor que para algunos ya es bastante difícil de captar con los ojos. Los materiales nanométricos miden entre mil y diez mil veces menos. (**Figura 1**). En este artículo nos centraremos en los materiales bidimensionales, por ejemplo, el grafeno, material que, apilado en capas, forma el grafito que usamos en los lápices. Para darnos una idea de la delgadez del grafeno, un “edificio” de aproximadamente 600.000 pisos de grafeno mediría lo mismo que el diámetro de un cabello. Si construyéramos un edificio con ese número de pisos, su altura sería cercana a los 3 mil kilómetros, ¡similar al radio del planeta Marte! Estas comparaciones han originado una serie de inquietudes

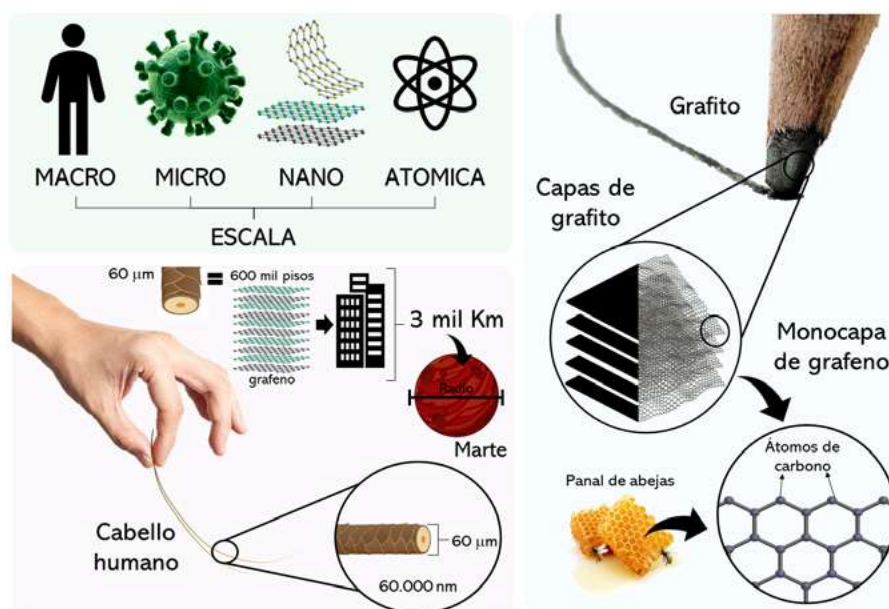


Figura 1. Ejemplos de las escalas macro, micro, nano y atómica. Comparación del tamaño de un cabello con el tamaño y la forma de las capas de grafeno presentes en el grafito.

en la comunidad científica, obligando a los investigadores a buscar respuestas sobre los materiales no sólo en la escala atómica, sino en la nanométrica, con miras a desarrollar nuevas y mejores aplicaciones.

Como se ha mencionado, el grafeno es un constituyente del grafito, material que usamos en los lápices, un pariente no muy lejano del carbón con el que preparamos ricas carnes asadas. Ambos están compuestos de átomos de carbono, arreglados de manera muy similar, aunque, estructuralmente hablando, el caso del grafeno es más que peculiar, pues en su espesor atómico está compuesto sólo por átomos de carbono densamente empaquetados de forma laminar que forman una red cristalina hexagonal similar a la de un panal de abejas. Este material se había estudiado teóricamente durante décadas, pero no fue sino hasta el 2004 cuando un equipo de investigadores en Manchester, Reino Unido, liderado por los doctores rusos Andre Geim y Konstantin Novoselov, logró aislar el grafeno hasta obtenerlo en su forma de una capa. Geim y Novoselov cuentan que un viernes en la tarde, cuando la universidad estaba prácticamente vacía y ellos seguían trabajando, lograron este hito: usando cinta adhesiva exfoliaron una monocapa de grafeno y comenzaron a medir sus propiedades electrónicas. El resto es historia. Se desencadenó una revolución en la ciencia de materiales que ha generado miles de combinaciones de compuestos bidimensionales con extraordinarias propiedades mecánicas, químicas, electrónicas, ópticas, etc., y tomaron por asalto miles de laboratorios alrededor del mundo donde se han hecho avances como los que comentaremos en este artículo. En el 2010, Geim y Novoselov fueron galardonados con el Premio Nobel de Física por sus experimentos innovadores relacionados con el material bidimensional grafeno (Brownson *et al.*, 2012).

Los materiales bidimensionales (2D)

El estudio de los materiales 2D se ha disparado en los últimos años debido a que se han podido sintetizar diversos compuestos con una o varias capas atómicas, que se conocen como materiales de capas monoatómicas o ultradelgados, cuyo espesor puede variar entre 0,1 y 1 nm si se encuentra entre una o varias capas de átomos. La unidad exacta para referirse a estos tamaños es una medida conocida como Ångström (Å), que normalmente se utiliza para indicar las distancias entre los átomos de una molécula. Los materiales

2D más ampliamente estudiados además del grafeno son los dicalcogenuros de metales de transición (*transition-metal dichalcogenide*, TMD), nombre que puede parecer un trabalenguas, pero que en realidad denota una serie de compuestos formados por átomos de dos elementos específicos con la forma MX_2 : primero, un M, que es un metal de transición (Mo, W, etc.) y, segundo, un X, que es un calcógeno (S, Se, o Te). Los metales de transición se encuentran en la parte central de la tabla periódica (por ejemplo, Mo y W en familia VI-B) y los calcógenos en la familia VI-A, justo debajo del oxígeno (Figura 2).

Los TMD tienen una particular cristalinidad, es decir, están formados por patrones de átomos que, repitiéndose en dos dimensiones, pueden llenar grandes áreas sin dejar huecos, como es el caso ya mencionado de la estructura repetitiva hexagonal de un panal de abejas, o el piso de mosaicos de muchas cocinas o baños. El ejemplo más claro de un compuesto cristalino es la sal de mesa, o NaCl (Figura 2), la cual forma una estructura ordenada con posiciones muy específicas. Los sólidos cristalinos, específicamente, se forman con una estructura mínima conocida como celda unitaria que se repite a lo largo del espacio como si se tratara de armar un mosaico en una pared con pequeños azulejos similares y que, vistos desde cualquier dirección, tendrían la misma estructura. Estos materiales cristalinos, o muy ordenados, poseen diversas propiedades fisicoquímicas que los hacen interesantes para su estudio y aplicación. Algunas de estas propiedades son eléctricas, ópticas o magnéticas y dependen de las estructuras periódicas y los átomos que se usen para su formación, es decir, la estructura del material y la distribución de los electrones de los átomos que forman el cristal son de vital importancia para entender qué ocurre a nivel atómico y cómo se revelan las propiedades únicas a nivel macro.

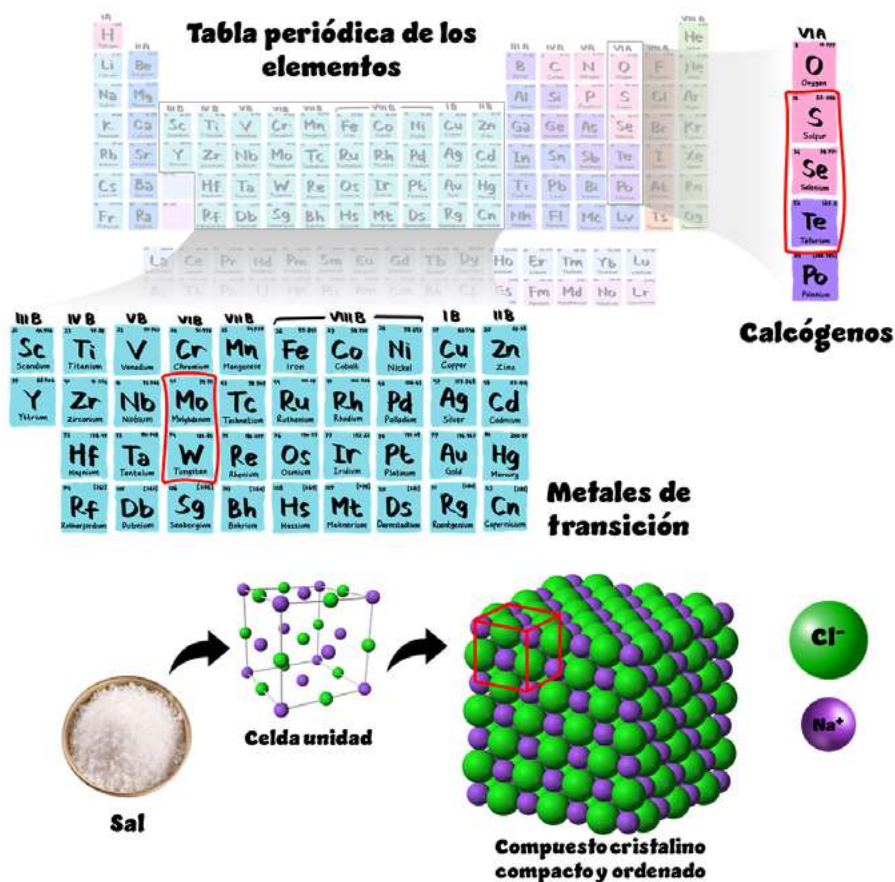


Figura 2. Tabla periódica de los elementos que muestra los metales de transición y calcógenos como elementos de estudio. Ejemplo de materiales cristalinos y sus patrones repetitivos

Los dicalcogenuros de metales de transición

Los TMD tienen propiedades interesantes, por lo que se ha experimentado ampliamente con su fabricación y síntesis (imaginen lo difícil que es “armar” estas capas atómicas), para poder usarlos en diversas aplicaciones, como la conversión de energía y los sensores. Entre algunas de las propiedades más destacadas de los TMD mencionaremos tres:

1. Rápida y eficiente conversión de energía solar a eléctrica (**Ferrante *et al.*, 2022**), lo que los convierte en piezas fundamentales con aplicaciones potenciales en paneles fotovoltaicos; además, son súper delgados y transparentes, propiedades que también se buscan en dichos paneles.
2. Capacidad de cambiar o tunear su transparencia a la luz y a la forma de transmitir la electricidad, por lo que tienen un papel importante en la nueva óptica y la fotoelectrónica (**Ermolaev *et al.*, 2020**).
3. Propiedades mecánicas y tribológicas que les permiten funcionar como excelentes lubricantes sólidos, o en transistores o fototransistores aprovechando el tuneo de propiedades electrónicas cuando se estira o comprime el material (**Zhu *et al.*, 2013**).

Debido a estas características, los TMD se conocen por sus aplicaciones en electrónica, transistores, generación termoeléctrica, optoelectrónica, fotodetección, fotoluminiscencia, y un largo etcétera.

Las técnicas de obtención de materiales 2D

El primer método que se usó para obtener estos materiales es el que Geim y Novoselov utilizaron para obtener una capa de grafeno. La idea es realizar una exfoliación mecánica a partir de un cristal tridimensional, básicamente utilizando cinta adhesiva, repitiendo la separación hasta que se obtenga una monocapa. Mediante este método se obtienen capas de bajo rendimiento, que generalmente se producen como escamas de formas impredecibles y pocas micras de longitud. La dificultad de este método de obtención de monocapas por exfoliación se debe a que entre ellas hay una pequeña fuerza de atracción, muy pequeña, pero lo suficientemente intensa para mantener ensamblado el material en capas. Es similar a lo que se sucede cuando se intenta desprender un piso de piezas de LEGO apiladas utilizando una de ellas; con la exfoliación no es posible saber cuándo se ha de obtener una monocapa, lo que hace que el método sea lento si se compara con el depósito de vapores químicos (*Chemical Vapour Deposition*, CVD), una excelente alternativa que explicaremos a continuación.

En el caso del CVD, no partimos de un cristal que contenga inmersa la monocapa, sino que la idea es seleccionar compuestos químicos que sean reactivos y contengan metales de transición y calcógenos. La **figura 3** muestra un dispositivo clásico para la obtención de TMD mediante la técnica de CVD. Se pueden observar dos zonas de calentamiento, en la primera se lleva a cabo la evaporación del precursor 1 (calcógeno), de manera que éste interactúe con el precursor 2 (metal de transición) en la zona de calentamiento 2. Esta interacción es posible gracias al flujo de un gas inerte (como el argón) que desplaza los átomos acumulados en forma gaseosa a través del tubo de reacción y los deposita finalmente sobre los sustratos, que pueden ser de distinta naturaleza (vidrio, óxido de silicio, etc.). Pongamos el ejemplo del disulfuro de molibdeno (MoS_2), el cual se puede formar con unos 100 mg de azufre (precursor 1) y otros 5 mg de óxido de molibdeno (precursor 2). El precursor 1 sigue una rampa de calentamiento relacionada con su punto de fusión, mientras que el precursor 2 se mantiene en otra que permite tener los dos disponibles en las cantidades y momentos necesarios. Así, una vez que hayan reaccionado entre ellos, podrá transportarse el producto hasta los sustratos. Al modificar los parámetros de la fabricación o síntesis (flujo del gas, cantidad de precursores, temperaturas en las zonas de calentamiento y tiempo de reacción) se pueden generar crecimientos de monocapas, bicapas o multicapas de diversos TMD. Las capas se depositan a lo largo de áreas que pueden ser muy extensas y con formas geométricas y cristalinas controladas, permitiendo la formación de monocapas

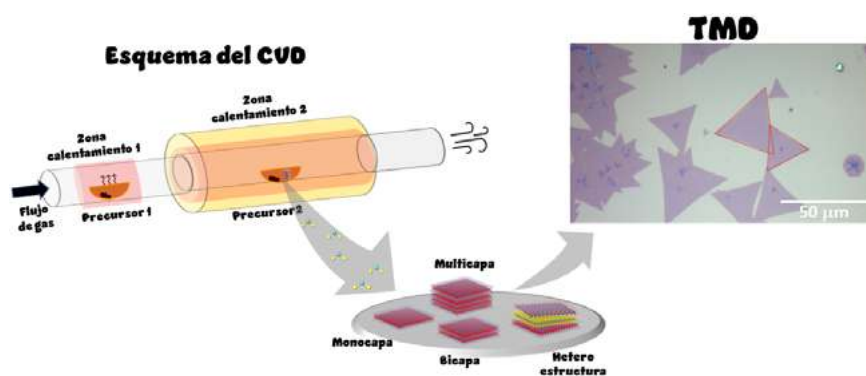


Figura 3. Esquema de la técnica de depósito de vapor químico (CVD) para la obtención de dicalcogenuros de metales de transición (TMD)

triangulares, romboédricas o hasta con forma de estrellas. En la parte derecha de la **figura 3** se observan triángulos monocapa de MoS_2 , que fueron generados por CVD a partir de este y azufre y evaporados a 750°C y 220°C , respectivamente, y luego depositados en un material parecido al vidrio. En la foto tomada con un microscopio óptico simple, se observan los MoS_2 en morado y el sustrato de fondo en amarillo.

Quizás es contraintuitivo que estas estructuras, con apenas algunos átomos de grosor, puedan observarse con un microscopio óptico. En la foto de la imagen, el triángulo central tiene un área similar a la del corte transversal de un cabello humano. Estas monocapas cristalinas pueden verse con una lupa o, en algunos casos, incluso a simple vista. Sin embargo, lo que vemos realmente es el contraste que tienen con el sustrato, pero si lo que se quiere es conocer su grosor o estudiar su composición y estructura cristalina a escala nanométrica, hay que ir más allá de lo observable por el ojo humano. La búsqueda de herramientas que faciliten estas observaciones ha llevado a los investigadores a explorar y desarrollar técnicas cada vez más fáciles de usar. Así, se utilizan microscopios que pueden ver más allá de los equipos convencionales y permiten descubrir si el material sintetizado es el correcto. Debido a que estas técnicas son más extensas y de manejo más complejo, se recomiendan algunas lecturas para facilitar su uso, aunque pueden mencionarse algunos como el microscopio electrónico de barrido (SEM), el microscopio de fuerza atómica (AFM), y el microscopio electrónico de transmisión (TEM). Estos son los más comunes, pero hay otros que permiten observar diversas propiedades y defectos de los materiales, y que no abordaremos en el presente artículo.

Materiales 2D transformados en heteroestructuras

Aunque los TMD ya tienen muchas aplicaciones, los científicos han querido ir un paso más allá, apilando capas de diferentes materiales 2D para estudiar sus características, con el fin de conseguir un supermaterial. Sin embargo, una vez que el material 2D en monocapa ha sido sintetizado, es muy complicado moverlo desde la superficie donde creció. Esto se debe a que, aunque el material tiene un área superior en "x/y" en el rango de las micras, el espesor o área en "z" es de unos escasos nanómetros, como ya se explicó. Esto conlleva un problema muy difícil de solucionar, puesto que cualquier movimiento brusco desprendería el material de la superficie y lo dejaría vulnerable al daño. Así como con el grafeno, la forma más conocida de exfoliar una capa de este material es usando un plástico especial, similar a la cinta adhesiva, que permite desprender una sola capa del material mediante un procedimiento muy delicado. Este método es muy parecido a los tatuajes temporales con los que los niños juegan usando un papel adhesivo como una estampa que transfiere el tatuaje al lugar escogido de su cuerpo. De la misma forma en que se colocan los tatuajes temporales en zonas particulares, la transferencia de monocapas de compuestos cristalinos se hace para adherirlos a la superficie deseada y, así, crear un nuevo dispositivo electrónico

o un sensor óptico. Asimismo, se pueden ir apilando arbitrariamente diversos materiales 2D hasta formar heteroestructuras más complejas, que darán pie a nuevas propiedades, directamente relacionadas con las características de las capas, y a un sinfín de rutas de análisis para corroborar el supermaterial que se está sintetizando.

Heteroestructuras y efecto Moiré

Cuando las monocapas de los TMD son apiladas una encima de otra para formar heteroestructuras, un interesante efecto llamado patrón o efecto Moiré, puede emerger de ese posicionamiento. Como se observa en la **figura 4**, cuando dos patrones periódicos se superponen y se rotan en diferentes ángulos, es posible observar un nuevo patrón, más complejo y con mayor consistencia gráfica. Si se traslada este fenómeno a las monocapas de materiales 2D, se pueden encontrar aplicaciones extremadamente prometedoras para estudiar fenómenos electrónicos, ópticos o de recuperación de energía. Para poder observar estos fenómenos, algunos investigadores “mueven” las capas en diferentes ángulos, llamados ángulos mágicos, y luego, a temperatura ambiente, los iluminan con una luz (por lo general infrarroja) que tiene un tamaño nanométrico. Cuando la luz toca los átomos y estos se excitan, se comprueba que se comportan de forma muy diferente a los habituales. Ello se debe a una desviación íntimamente relacionada con un movimiento peculiar de los electrones dentro de la superred de Moiré que se forma en la heteroestructura. Para explicarlo de manera esquematizada, en la **figura 4** se muestran dos capas superpuestas cuyo centro genera un patrón completamente diferente, o de Moiré, que posee características únicas y distintas a los patrones originales. Si bien este efecto parece ser uno completamente óptico a escala macrométrica, actualmente diversos estudios han demostrado que las rotaciones en sistemas nanométricos producirían cambios en las estructuras de los materiales, como ha sucedido con el grafeno y en materiales 2D como el MoS_2 , WSe_2 y otros (Najafidehaghani *et al.*, 2021).

Aplicaciones en la vida diaria

Actualmente existe una demanda gigantesca por la producción de nuevos materiales con potencial para usarse en dispositivos electrónicos (por ejemplo, celulares) y optoelectrónicos (por ejemplo, sensores). Dichos materiales han exigido muchas especificaciones, a manera de una síntesis escalable, que exigen que las capas de TMD sean uniformes y de alta calidad, asociada ésta a su elevada cristalinidad, es decir, a la pureza de la formación; que tengan un gran tamaño de dominio, o sea, de la relación superficial del crecimiento; que estén libre de defectos y, que, además, los márgenes de grano sean limitados, en otras palabras, un que tengan ordenamiento empacado. Para las nuevas generaciones de científicos, el interés en los TMD ha florecido irremediablemente debido a las numerosas y posibles aplicaciones de dichos materiales en moduladores, detectores ópticos, absorbentes de metamateriales y

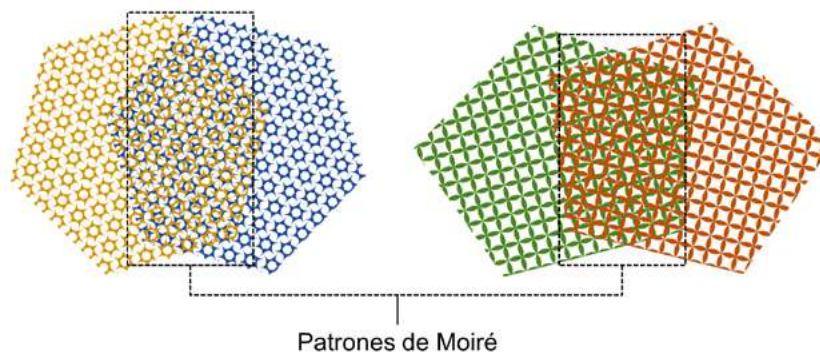


Figura 4. Representación del efecto Moiré sobre un patrón con un diseño superpuesto en diferentes ángulos

emisores, gracias a sus extraordinarias características eléctricas y ópticas que les permiten mejorar y mantener la absorción de luz con estabilidad a altas temperaturas. Esto ha abierto un gran abanico de posibilidades para los TMD en una gama de aplicaciones para la captación de energía, la detección y la fotocatalisis, necesarias hoy debido a los altos índices de contaminación y la escasez de recursos renovables.

Contribución de los autores

Todos los autores colaboraron en la escritura, revisión y elaboración de las figuras del manuscrito.

Conflicto de intereses

Los autores no tienen ningún conflicto de intereses que pueda influir en la transparencia u objetividad del proceso de revisión por pares o la publicación.

Agradecimientos

Los autores agradecen al programa de apoyo “Investigación en Verano” de la Universidad Iberoamericana, al proyecto Sinergias No. 1564464 y al proyecto de estancia posdoctoral del CONAHCYT (CVU 738128).

• Josué David Hernández-Varela¹, • Felipe Cervantes-Sodi²,
• Skarleth Estefanía García-Trujillo¹

¹ Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana, Ciudad de México, México.

² Departamento de Ingeniería Bioquímica, Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México.

Editor asociado: Edgar González, Ph. D.

Referencias

- Brownson, D. A. C., Kampouris, D. K., Banks, C. E. (2012). Graphene electrochemistry: Fundamental concepts through to prominent applications. In *Chemical Society Reviews*, 41 (21). <https://doi.org/10.1039/c2cs35105f>
- Ermolaev, G. A., Stebunov, Y. V., Vyshnevyy, A. A., Tatarkin, D. E., Yakubovsky, D. I., Novikov, S. M., Baranov, D. G., Shegai, T., Nikitin, A. Y., Arsenin, A. V., Volkov, V. S. (2020). Broadband optical properties of monolayer and bulk MoS₂. *Npj 2D Materials and Applications*, 4(1), 1-6. <https://doi.org/10.1038/s41699-020-0155-x>
- Ferrante, C., Di Battista, G., Parra-López, L. E., Batignani, G., Lorchat, E., Virga, A., Berciaud, S., Scopignod, T. (2022). Picosecond energy transfer in a transition metal dichalcogenide-graphene heterostructure revealed by transient Raman spectroscopy. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 119(15), 1-7. <https://doi.org/10.1073/pnas.2119726119>
- Najafidehaghani, E., Gan, Z., George, A., Lehnert, T., Ngo, G. Q., Neumann, C., Bucher, T., Staude, I., Kaiser, D., Vogl, T., Hübner, U., Kaiser, U., Eilenberger, F., Turchanin, A. (2021). 1D p-n junction electronic and optoelectronic devices from transition metal dichalcogenide lateral heterostructures grown by one-pot chemical vapor deposition synthesis. *Advanced Functional Materials*, 31(27), 1-9. <https://doi.org/10.1002/adfm.202101086>
- Zhu, C. R., Wang, G., Liu, B. L., Marie, X., Qiao, X. F., Zhang, X., Wu, X. X., Fan, H., Tan, P. H., Amand, T., Urbaszek, B. (2013). Strain tuning of optical emission energy and polarization in monolayer and bilayer MoS₂. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 88(12), 1-5. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.121301>