

Universidad Nacional Mayor de San Marcos

Universidad del Perú. Decana de América Facultad de Ciencias Físicas Escuela Profesional de Física

Propiedades eléctricas de los nanotubos de carbono

MONOGRAFÍA TÉCNICA

Para optar el Título Profesional de Licenciado en Física

AUTOR

Hernán SUÁREZ QUISPE

ASESOR

Mg. Robert Marino ESPINOZA BERNARDO

Lima, Perú

2022



Reconocimiento - No Comercial - Compartir Igual - Sin restricciones adicionales

https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/

Usted puede distribuir, remezclar, retocar, y crear a partir del documento original de modo no comercial, siempre y cuando se dé crédito al autor del documento y se licencien las nuevas creaciones bajo las mismas condiciones. No se permite aplicar términos legales o medidas tecnológicas que restrinjan legalmente a otros a hacer cualquier cosa que permita esta licencia.

Referencia bibliográfica

Suárez, H. (2022). *Propiedades eléctricas de los nanotubos de carbono*. [Monografía técnica de pregrado, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Físicas, Escuela Profesional de Física]. Repositorio institucional Cybertesis UNMSM.

Metadatos complementarios

Datos de autor		
Nombres y apellidos	Hernán Suárez Quispe	
Tipo de documento de identidad	DNI	
Número de documento de identidad	10519630	
URL de ORCID	https://orcid.org/0000-0002-9141-4449	
Datos de asesor		
Nombres y apellidos	Robert Marino Espinoza Bernardo	
Tipo de documento de identidad	DNI	
Número de documento de identidad	41704209	
URL de ORCID	https://orcid.org/0000-0001-9889-8266	
Datos del jurado		
Presidente del jurado		
Nombres y apellidos	Justo Alcides Rojas Tapia	
Tipo de documento de identidad	DNI	
Número de documento de identidad	43344260	
Miembro	del jurado	
Nombres y apellidos	José Julián Medina Medina	
Tipo de documento de identidad	DNI	
Número de documento de identidad	06798653	
Datos de investigación		
Línea de investigación	A.2.1.1. Propiedades Estructurales de las Nanopartículas	
Grupo de investigación	No aplica	
Agencia de financiamiento	Sin financiamiento	
Ubicación geográfica de la investigación	Universidad Nacional Mayor de San Marcos	
	País: Perú	
	Departamento: Lima	
	Distrito: Lima	
	Lautuu: -12.000120	

	Longitud: -77.081642
Año o rango de años en que se realizó la investigación	2019-2021
URL de disciplinas OCDE	Física de la materia condensada https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.02



Universidad Nacional Mayor de San Marcos

Universidad del Perú. Decana de América

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA

ACTA DE SUSTENTACIÓN DE MONOGRAFÍA TÉCNICA EN LA MODALIDAD VIRTUAL PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE LICENCIADO EN FÍSICA

Siendo las 18:00 horas del viernes 28 de enero del 2022, en la Sala de Sesión Virtual de la Facultad de Ciencias Físicas, bajo la Presidencia del Dr. Justo Alcides Rojas Tapia, el Mg. José Julián Medina Medina (Miembro), y el Mg. Robert Marino Espinoza Bernardo (Asesor) se dio inicio a la Sesión Pública Virtual de Sustentación de Monografía Técnica para la obtención del Título Profesional de Licenciado en Física, mediante la Modalidad M3 - Por Suficiencia Profesional, del Bachiller:

HERNÁN SUÁREZ QUISPE

El Presidente del Jurado en primer lugar dio lectura al documento formal que designa al Jurado y aprueba el acto de sustentación de la Monografía Técnica, así como el Resumen del Expediente e invitó al citado Bachiller a realizar la presentación y exposición de su Monografía Técnica titulada:

"Propiedades Eléctricas de los Nanotubos de Carbono"

Concluida la exposición del candidato y luego de las preguntas de rigor por parte del Jurado, el Presidente del Jurado con el apoyo de la Unidad de Informática, invitó al Bachiller y al público a abandonar momentáneamente la Sala de Sesión Virtual, para dar paso a la deliberación y calificación por parte del Jurado.

Al término de la deliberación del Jurado el Dr. Justo Alcides Rojas Tapia invitó al candidato y al público en general a pasar a la Sala de Sesión Virtual, para dar lectura al Acta de Calificación, en cuyo contenido se ha registrado la nota obtenida por el bachiller, la misma que ha sido de:

17	DIECISIETE	MUY BUENO
(NÚMERO)	(LETRAS)	(MENCIÓN)

Habiendo concluido la Sustentación de la Monografía Técnica, el Presidente del Jurado, remitirá el Acta al Vicedecano Académico de la Facultad de Ciencias Físicas, quien la suscribirá dando fe de la realización del acto virtual de manera remota.

El Acta de Calificación será remitida al Director de la Escuela Profesional de Física quien a su vez solicitará la aprobación del Consejo de Facultad para el otorgamiento del Título Profesional de Licenciado en Física al Bachiller Hernán Suárez Quispe.



Universidad Nacional Mayor de San Marcos Universidad del Perú. Decana de América

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA

Siendo las 19:11 horas, se dio por concluido el acto académico, expidiéndose tres (03) Actas originales de la Sustentación de la Monografía Técnica.

Ciudad Universitaria, viernes 28 de enero del 2022.



Firmado digitalmente por ROJAS TAPIA Justo Alcides FAU 10148092282 soft Motivo: Soy el autor del documento Fecha: 01.02.2022 08:23:54 -05:00

Dr. Justo Alcides Rojas Tapia PRESIDENTE

Mg. José Julián Medina Medina MIEMBRO

Mg. Robert Marinó Espinoza Bernardo ASESOR



Firmado digitalmente por LOZANO BARTRA Whualkuer Enrique FAU 20148092282 soft Motivo: Soy el autor del documento Fecha: 05.11.2022 08:18:19 -05:00

Dr. Whualkuer Enrique Lozano Bartra VICEDECANO ACADÉMICO – FCF

Datos de la plataforma virtual institucional del acto de sustentación:

ENLACE:

Unirse a la reunión Zoom https://us06web.zoom.us/j/83082983596?pwd=Kzc2bU5MSzdCK1hLNTVFV2Q0L2V2UT09

ID de reunión: 830 8298 3596 Código de acceso: 814817

Grabación archivada en: https://www.facebook.com/FCFUNMSM/videos/358885432717213



FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA

INFORME DE EVALUACIÓN DE ORIGINALIDAD

- 1. Facultad: Ciencias Físicas
- 2. Escuela Profesional: Física
- 3. Autoridad Académica que emite el informe de originalidad: Mg. Jiménez Tintaya, César Omar
- 4. Apellidos y nombres de la autoridad académica: Mg. Jiménez Tintaya, César Omar
- 5. Operador del programa Informático de similitudes: Mg. Jiménez Tintaya, César
- 6. Documento evaluado: Tesis para optar el Título profesional de Licenciado en Física titulada "Propiedades Eléctricas de los Nanotubos de Carbono"
- 7. Autor del documento: Hernán Suárez Quispe
- 8. Fecha de recepción del documento: 03/01/22
- 9. Fecha de aplicación del programa informático de similitudes: 30/11/22
- 10. Software utilizado
 - Turnitin
- 11. Configuración del programa detector de similitudes
 - Excluye textos entrecomillados
 - Incluye Bibliografía
 - Excluye cadenas menores a 40 palabras
- 12. Porcentaje de similitudes según programa detector de similitudes: 9% (nueve por ciento)
- 13. Fuentes originales de las similitudes encontradas
 - zaguan.unizar.es < 1%
 - qdoc.tips < 1%
 - dspace.unia.es < 1%
 - cybertesis.uach.cl < 1%
 - hdl.handle.net< 1%
- 14. Observaciones: ninguna
- 15. Calificación de originalidad
 - Documento cumple criterios de originalidad, sin observaciones
- 16. Fecha del Informe: 30 de noviembre del 2022



rmado digitalmente por JIMENEZ INTAYA Cesar Omar FAU 1148092282 soft otivo: Soy el autor del documento scha: 01.12.2022 08:30:21 -05:00

Firma del Evaluador

Dedicado a mi familia

Agradecimientos

Agradezco a Dios y a mi familia, quienes son mi motivación para mejorar en todos los aspectos de la vida. También deseo agradecer a mi asesor, Mg. Robert Espinoza, por guiarme en el desarrollo de esta monografía y a mis amigos, quienes de diversas maneras me han apoyado.

Resumen

Los Nanotubos de Carbono (CNTs) son materiales relativamente nuevos y con interesantes propiedades que son de gran provecho para el desarrollo de avances en el campo de la nanotecnología. Al respecto, en la presente monografía se presentará un estudio descriptivo de su estructura y de las principales propiedades. En este caso se ha considerado que la capacidad de estos materiales para comportarse como metal o semiconductor, según su estructura es de particular interés, por lo que el presente trabajo de investigación se enfocará en el estudio de las propiedades eléctricas de los CNTs. Además, se mencionarán métodos de síntesis que existen para obtener los nanotubos de carbono, tales como el de descarga de arco voltaico (técnica utilizada por Iijima en 1991), la deposición química de vapor (CVD), la ablación láser, electrólisis y la síntesis por radiación microondas. Finalmente, se mencionarán aplicaciones de los CNTs en electrónica, biosensores, administración de fármacos, electroquímica, construcción de nano cables y superconductores.

Palabras clave: Nanotubos, Carbono, Nanotecnología, semiconductor, metal, electroquímica, superconductores

Resumeniv
Índice de figuras vii
Abreviacionesix
Capítulo 1: Nociones Generales1
1.1 Antecedentes
1.2 Objetivos
Capítulo 2: Marco Teórico 4
2.1 Nanotecnología 4
2.2 Nanociencia
2.3 Estructura Cristalina
2.4 Alótropos de Carbono 5
2.4.1 Diamante
2.4.2 Grafito
2.4.3 Grafeno
2.4.4 Fullereno7
2.4.5 Nanotubo de Carbono (CNT)
2.5 Técnicas de Caracterización de CNTs8
2.5.1 Difracción de Rayos X
2.5.2 Microscopía Electrónica de Barrido SEM
2.5.3 Microscopía Electrónica de Transmisión TEM
2.5.4 Microscopía de Fuerza Atómica AFM
2.5.5 Microscopía de Efecto Túnel STM
Capítulo 3: Síntesis de Nanotubos de Carbono10
3.1 Método de Descarga de Arco Voltaico10

	3.2 Deposición química de vapor (CVD)	. 10
	3.3 Ablación láser	. 11
	3.4 Electrólisis	. 12
	3.5 Síntesis por radiación con microondas	. 13
Capítulo	4: Estructura de los Nanotubos de Carbono	. 15
	4.1 Número de Capas	. 15
	4.2 Índices de Hamada (n , m)	. 15
Capítulo	5: Propiedades eléctricas de los Nanotubos de Carbono de Capa Simple	. 18
	5.1 Nanotubos de Carbono Metálicos	. 22
	5.2 Nanotubos de Carbono Semiconductores	. 23
Capítulo	6: Aplicaciones de los Nanotubos de Carbono de Capa Simple	. 24
	6.1 Transistores de Nanotubos de Carbono	. 24
	6.2 Biosensores	. 26
	6.3 Administración de fármacos	. 27
	6.4 Electroquímica	. 28
	6.5 Nano Cables	. 30
	6.6 Superconductores	. 31
Conclusi	ones	. 32
Referenc	ias	33
I CICI CIIC	.2.4	

Índice de figuras

Figura 2.1 Esquema de enlaces y forma macroscópica del diamante5
Figura 2.2 Esquema de enlaces del grafito
Figura 2.3 Esquema de enlaces del grafeno
Figura 2.4 Esquema de enlaces del fullereno7
Figura 2.5 Nanotubo de carbono del tipo zigzag7
Figura 3.1 Esquema de la producción de CNT por el método de Descarga de Arco Voltaico
Figura 3.2 Casos de crecimiento de NTC por CVD 11
Figura 3.3 Esquema para la producción de SWCNT por el método de Ablación láser.
Figura 3.4 Esquema para la producción de CNT por el método de Electrólisis 13
Figura 4.1 Tipos de CNTs de acuerdo a su número de capas 15
Figura 4.2 Enrollamiento de SWCNTs en la red hexagonal de Grafeno 16
Figura 4.3 Tipos de SWCNTs de acuerdo a su enrollamiento16
Figura 5.1 Bandas de energía permitidas y band gaps en la dispersión de un electrón.
Figura 5.2 Enlaces σ y π en una lámina de Grafeno
Figura 5.3 Estructura de bandas cerca de la energía de Fermi para el Grafeno 20
Figura 5.4 Estructura de bandas unidimensional para el (8,2) CNT 21

Figura 5.5 Estructura de bandas unidimensional Y densidad de estados (DOS) para
el (9,0) CNT
Figura 5.6 Estructura de bandas unidimensional y densidad de estados (DOS) para el
(5,5) CNT
Figura 5.7 Estructura de bandas para el (10,0) CNT semiconductor 23
Figura 6.1 Transistor bipolar PNP TIP41C 24
Figura 6.2 Estructura de un CNTFET 25
Figura 6.3 Algunas funciones oxigenadas acopladas en los bordes de un (17,37) CNT
Figura 6.4 Representación de CNT funcionalizado para dirigir PEG 27
Figura 6.5 Ilustración esquemática del funcionamiento de una batería de iones de
litio
Figura 6.6 Estructura geométrica y densidad de electrones de la intercalación de Li
con (10,0) CNT <i>Li5C</i> 40
Figura 6.7 Modelo estructural e imagen de resolución atómica HAADF-STEM de un
MoTeNW@CNT
Figura 6.8 <i>Jc</i> vs $H(T)$ para diferentes cantidades de dopaje con CNT

Abreviaciones

CNT: Carbon Nanotube. Nanotubo de carbono

SWCNT: Single Walled Carbon Nanotube. Nanotubo de carbono de pared simple
DWCNT: Double Walled Carbon Nanotube. Nanotubo de carbono de pared doble
MWCNT: Multi Walled Carbon Nanotube. Nanotubo de carbono de pared múltiple
CVD: Chemical Vapor Deposition. Deposición química de vapor
SEM: Scanning Electron Microscopy. Microscopía electrónica de barrido
TEM: Transmission Electron Microscopy. Microscopía electrónica de transmisión
TEM: Transmission Electron Microscopy. Microscopía electrónica de transmisión
AFM: Atomic Force Microscopy. Microscopía de fuerza atómica
STM: Scanning Tunneling microscopy. Microscopía de efecto túnel
PNP: Tipo de transistor con secuencia de dopaje Positivo, Negativo y Positivo
MOSFET: Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor. Transistor de efecto de campo metal-óxido-semiconductor
CNTFET: Carbon Nanotube Field Effect Transistor. Nanotubos de carbono transistor de efecto de campo

TMM: Transition Metal Monochalocogenides. Mono colagenuros de metales de transición MoTeNW@CNT: Nano cable de teluro de molibdeno dentro de un CNT

HAADF: High Angle Annular Dark Field. Campo oscuro anular de gran ángulo

Capítulo I

Nociones Generales

La energía es determinante para el desarrollo de las civilizaciones. Ante el agotamiento de las fuentes de energía no renovables, es necesario realizar la transición completa hacia otros recursos energéticos, tales como los de origen solar, eólico, hidroeléctrico, térmico, etc. Dado que no todas estas alternativas se pueden usar con flujo constante de suministro de energía, es preciso desarrollar dispositivos capaces de almacenarla para disponer de esta de forma permanente. Lograr esto dependerá completamente del avance de la tecnología.

Una forma de comprender el nivel tecnológico actual es la evaluación de los materiales que se utilizan. Algunos periodos en la prehistoria fueron conocidos por el material del cual se tenía mayor dominio y del que se obtenía más beneficios. Es así como un modelo de la historia del hombre la divide en la Edad de Piedra, la Edad de Bronce, la Edad de hierro, etc. Con el desarrollo de la humanidad, se encuentran nuevos materiales, más útiles y de mayor eficiencia.

En el campo de la electrónica, la tendencia actual de mejora tecnológica es la reducción de componentes. En principio, esto es correcto, dado que se han desarrollado componentes electrónicos de mayor rendimiento y menor consumo energético. Sin embargo, esta reducción tiene un límite. Los componentes fabricados con dimensiones del orden de los nanómetros presentan comportamientos que ya no pueden ser explicados usando la teoría clásica. Un ejemplo de ello es el "efecto túnel", que concibe la posibilidad que un electrón pueda superar una barrera de potencial. Ante esto, es necesario cambiar de enfoque, en este caso, teniendo en cuenta la física cuántica.

Gracias a la nanociencia, la humanidad es capaz de observar, manipular y caracterizar materiales, incluso a escalas nanométricas. Así, es posible manipularlos o moldearlos de acuerdo con nuestras necesidades, lo que permite contar con materiales que tengan propiedades con un mayor número de aplicaciones.

El carbono es un elemento abundante en la Tierra y puede formar muy variadas estructuras, en diferentes estados, y con distintas propiedades. Algunos ejemplos que es posible citar son el diamante, la fibra de carbono, el grafito, el grafeno, el fullereno y el nanotubo de carbono CNT (de las siglas en inglés Carbon Nanotube). Este último es una forma alotrópica del Carbono que puede ser de capa simple SWCNT (de las siglas en inglés Single Walled Carbon Nanotube), de doble capa DWCNT (de las siglas en inglés Double Walled Carbon Nanotube) y de múltiples capas MWCNT (de las siglas en inglés Double Walled Carbon Nanotube). Las propiedades electrónicas de los CNT los hacen excelentes candidatos como reemplazo de los materiales tradicionales usados en dispositivos electrónicos. No obstante, aún se están evaluando los diferentes aspectos necesarios para su implementación. Para este fin, se están llevando a cabo trabajos de síntesis, caracterización, funcionalización, etc. Cabe mencionar que el uso de herramientas como la espectroscopía y microscopía son determinantes para estas investigaciones.

En el presente trabajo se muestran, en el capítulo 2, conceptos esenciales para facilitar el estudio de los CNTs. En el capítulo 3, se tratan algunos métodos utilizados para la síntesis de los CNTs. En el capítulo 4, se analiza la estructura de los CNTs. En el capítulo 5, se mencionan las propiedades eléctricas de los SWCNTs de capa simple. Finalmente, en el capítulo 6, se presentan algunas aplicaciones tecnológicas de los SWCNTs.

1.1. Antecedentes

En la década de 1980 ya se conocía el grafito, el diamante y las fibras de carbono. Respecto a estas últimas, la primera fibra fue preparada por Thomas A. Edison (Saito, Dresselhaus, & Dresselhaus, 1998). Más adelante, el fullereno (C_{60}) y parte de su familia (C_{20} , C_{70} , C_{76} , entre otros) fueron descubiertos en 1985 por Robert F. Curl, Harold W. Kroto y Richard E. Smalley (Kroto, Heath, O'Brien, Curl, & Smalley, 1985), quienes ganaron el Premio Nobel de Química en 1996 por esos descubrimientos. Finalmente, en 1991 fue reportada la preparación de nanotubos de carbono por Sumio Iijima (Ijima, 1991).

1.2. Objetivos

En la presente investigación se desarrollará la compilación de la información existente sobre Nanotubos de Carbono como materiales unidimensionales, mediante la

búsqueda en diferentes bases de datos, especialmente lo concerniente al desarrollo teórico y experimental.

Asimismo, se identificará las formas de obtención de los Nanotubos de Carbono, sus potenciales aplicaciones, especialmente en el campo de la electrónica.

Capítulo II

Marco Teórico

2.1. Nanotecnología

Es la ciencia e ingeniería para la fabricación de materiales en la escala nanométrica (Takeuchi, 2009). El prefijo *nano* hace referencia a un valor de la mil millonésima parte de algo. Específicamente un nanómetro (1 nm) equivale a 0,000000001 m. Al respecto, es importante diferenciar entre los conceptos de nanotecnología y miniaturización. La miniaturización es un proceso que va desde estructuras grandes a estructuras más pequeñas (forma descendente). En contraste, con la nanotecnología se parte de estructuras pequeñas (nano estructuras) y a partir de ellas se preparan estructuras mayores (forma ascendente) que sean de beneficio ante las necesidades de la sociedad.

2.2. Nanociencia

Es el estudio de lo que ocurre en estructuras que están en el orden de 1 nm hasta 100 nm (Takeuchi, 2009). Estas también son conocidas como nanoestructuras, de las cuales se estudian sus fenómenos y propiedades. Haciendo uso de estos conocimientos se puede ser capaz de manipular átomos o moléculas para alterar sus propiedades de acuerdo con lo que se desee lograr.

2.3. Estructura Cristalina

En estado sólido se pueden presentar dos tipos de estructura: las cristalinas o las amorfas. Las cristalinas, a diferencia de las amorfas, presentan ordenamiento periódico perfecto o cuasi perfecto de los átomos que la conforman. Conocer este ordenamiento es relevante para entender sus propiedades. Dentro de estructura cristalina es posible realizar dos operaciones de simetría y dos de inversión: rotación, el trazo de un plano de simetría, centro de inversión y eje de rotación-inversión, respectivamente.

La celda unitaria de una estructura o red cristalina es una región interior capaz de reproducir completamente la estructura, simplemente trasladándola en todas las direcciones.

Existen catorce modos de colocar puntos en las redes cristalinas, tal que cada uno tenga el mismo medio a su alrededor. Estas estructuras son las redes de Bravais (McKelvey, 1996).

De acuerdo con el tipo de interacción entre los átomos que componen la red cristalina, estas se pueden clasificar en cristales metálicos, covalentes, moleculares e iónicos.

2.4. Alótropos de Carbono

El carbono pertenece al grupo 4 de la tabla periódica. Consta de 6 electrones en la configuración $1s^22s^22p^2$ (estado basal). Está presente en el universo en diferentes estructuras y estados. Esta diversidad se debe, en gran parte, a su capacidad de enlazarse con otros átomos, moléculas o consigo mismo. Tiene la capacidad de hibridación de sus orbitales (sp, sp^2 y sp^3). Entonces, puede formar estructuras alotrópicas de sí mismo como el diamante, el carbono amorfo, el grafito, el grafeno, el fullereno y los nanotubos de carbono.

2.4.1. Diamante

Es una estructura cristalina tridimensional en la que cada carbono presenta hibridación sp^3 por la combinación de un orbital *s* con tres orbitales *p*. La Figura 2.1 muestra a la izquierda cómo están enlazados los átomos de carbono y a la derecha la vista macroscópica del diamante. Cada átomo está unido a otros cuatro mediante un enlace covalente muy fuerte. El diamante presenta alta dureza y conductividad térmica



Figura 2.1 Esquema de enlaces y forma macroscópica del diamante Recuperado de: https://www.carbotecnia.info/el-fascinante-atomo-de-carbono/

2.4.2. Grafito

Estructura tridimensional, en la que cada carbono presenta hibridación sp^2 por la combinación de un orbital *s* con dos orbitales *p* en un plano hexagonal; el orbital restante (π) es perpendicular a dicho plano. La Figura 2.2 muestra cómo están enlazados los átomos de carbono. Cada uno está unido a otros tres, mediante un enlace covalente muy fuerte, formando láminas, las cuales están unidas a otras similares mediante un enlace débil (π) por fuerzas Van der Waals.



Figura 2.2 Esquema de enlaces del grafito. Adaptado de: https://eo.wikipedia.org/wiki/Grafito#/media/Dosiero:Graphit_gitter.png

2.4.3. Grafeno

Es una estructura bidimensional hexagonal, en la que cada carbono presenta hibridación sp^2 por la combinación de un orbital *s* con dos orbitales *p*. La Figura 2.3 muestra cómo están enlazados los átomos de carbono. Cada uno está unido a otros tres, mediante un enlace covalente muy fuerte dentro de su estructura, aproximadamente, plana y cuyo espesor es del orden del tamaño de un átomo de carbono.



Figura 2.3 Esquema de enlaces del grafeno. Recuperado de: https://www.propharma.pe/el-grafeno-sus-propiedadescaracteristicas-y-aplicaciones/

2.4.4. Fullereno

Es una estructura cero dimensional, donde cada átomo presenta hibridación intermedia entre sp^2 y sp^3 . Esto hace posible que los átomos de carbono puedan combinarse formando hexágonos y pentágonos en estructuras tridimensionales cerradas. La figura 2.4 muestra el esquema de enlaces del fullereno C_{60} .



Figura 2.4 Esquema de enlaces del grafeno. Recuperado de: https://www.novarials-store.com/products/fullerene-c60-1

2.4.5. Nanotubo de Carbono (CNT)

Es una estructura unidimensional en forma tubular. Puede ser concebida como una lámina de grafeno enrollada en sí misma. Sus extremos pueden estar abiertos o cerrados por una tapa semi esférica de fullereno. Presentan diámetros del orden de nanómetros y longitudes del orden de los micrómetros. Los CNT pueden ser monocapa (SWCNT), de doble capa (DWCNT) o multicapa (MWCNT). La forma del enrollamiento (quiralidad) y su diámetro define sus propiedades eléctricas, presentando carácter metálico o semiconductor. A lo largo de su eje presentan gran resistencia a la tensión; sin embargo, son flexibles a esfuerzos laterales. La figura 2.5 muestra un nanotubo del tipo zigzag con extremos abiertos.



Figura 2.5 Nanotubo de carbono del tipo zigzag. Recuperado de: https://worldofnanoscience.weebly.com/nanotube--carbon-fiber-overview.html

2.5. Técnicas de Caracterización de CNTs

A continuación, se presentan cinco métodos de caracterización de CNT.

2.5.1. Difracción de Rayos X

Al incidir un haz de rayos X monocromático en una red cristalina, puede ser difractado en otros haces con intensidades y direcciones que dependerán de la estructura cristalina. De acuerdo con la ley de Bragg, los máximos de difracción se dan en determinadas direcciones de incidencia y reflexión; donde las reflexiones interfieren constructivamente, con diferencia de fase múltiplos de 2π radianes. (McKelvey, 1996).

2.5.2. Microscopía Electrónica de Barrido SEM

SEM (de sus siglas en inglés Scanning Electron Microscopy) es un microscopio que utiliza un haz de electrones acelerados para formar las imágenes. Los electrones inciden sobre la muestra, son medidos por detectores y, finalmente, la imagen procesada con esa información es mostrada en un monitor.

2.5.3. Microscopía Electrónica de Transmisión TEM

TEM (de sus siglas en inglés Transmission Electron Microscopy) es un microscopio que también utiliza un haz de electrones; sin embargo, el haz atraviesa la muestra para luego ser medido en los detectores y, finalmente, se forma la imagen. Al usar un TEM la muestra debe ser muy fina para que permita el paso de los electrones transmitidos.

2.5.4. Microscopía de Fuerza Atómica AFM

AFM (de sus siglas en inglés Atomic Force Microscopy) es un microscopio que realiza el contacto directo con la muestra a través de una sonda en forma de punta muy afilada que recorre la superficie de la muestra. Los desplazamientos de la sonda son registrados con gran precisión y así se puede tener una representación de la litografía de la muestra.

2.5.5. Microscopía de Efecto Túnel STM

STM (de sus siglas en inglés Scanning Tunneling Microscopy) es un microscopio que generalmente se usa en ultra alto vacío. Se coloca una punta conductora en las cercanías de la superficie de la muestra que se desea analizar. Al aplicar la corriente entre la muestra y la punta se genera un flujo de electrones gracias al efecto túnel. Como consecuencia, se genera una corriente de tunelización que depende de la densidad local de estados en la muestra (Chem, 2008). De acuerdo con cómo la punta se desplaza sobre la superficie de la muestra, se va registrando la corriente en cada punto y luego esto puede ser representado en una imagen.

Capítulo III

Síntesis de Nanotubos de Carbono

3.1. Método de Descarga de Arco Voltaico

La producción de CNT con este método requiere de un espacio confinado con gas inerte a baja presión (100 Torr) provisto de un sistema de refrigeración. Se colocan dos electrodos de grafito con diámetros de entre 0.5 mm y 40 mm, separados a 1 mm. Los nanotubos se formarán en el electrodo negativo (cátodo). Es necesario generar corriente directa de 200 amperios a una tensión en el rango de entre 20 V y 25 V entre los electrodos. El carbono se evapora generando un plasma caliente y una parte se condensa, formándose así los nanotubos. La figura 3.1 muestra el esquema correspondiente.



Figura 3.1 Esquema de la producción de CNT por el método de Descarga de Arco Voltaico Recuperado de: Síntesis de nanotubos de carbono por CVD a partir de Tolueno y Ferroceno. (León, 2013)

3.2. Deposición química de vapor (CVD)

Es denominado CVD por sus siglas en inglés (Chemical Vapor Deposition). La producción de CNT con este método requiere de un espacio confinado (horno) con gas inerte, donde ingresa gas a base de Carbono (hidrocarburo). Se puede usar partículas metálicas como catalizador, sobre un sustrato, y que servirán como base para el crecimiento de los CNT. Todo el proceso puede durar entre 15 y 60 minutos. Con bajas temperaturas (300 °C a 800 °C) se formarán MWCNTs; sin embargo, con altas temperaturas (600 °C a 1000 °C) se formarán SWCNTs (Vargas Ferreira, et al., 2016).

En comparación con el método de Arco de Descarga Voltaica, con el método CVD se producen CNT con menos defectos; sin embargo, no son derechos. En algunos casos se presentan en forma de espiral (Grobert, 2007).

Los CNT pueden crecer hasta 1 cm de longitud y diámetros de hasta 100 nm, siendo el número de capas desde 3 hasta 100 (Grobert, 2007).

La figura 3.2 muestra la dependencia de la interacción catalizador – sustrato. Cuando la interacción es débil, el crecimiento de los CNTs es hacia abajo; sin embargo, cuando es fuerte, el crecimiento es hacia arriba (León, 2013).



Figura 3.2 Casos de crecimiento de NTC por CVD Recuperado de http://www.nanotubo.com.ar/nanotubos-de-carbono.php

3.3. Ablación láser

En este caso, las condiciones para la producción de CNT son similares a las del método de descarga de arco voltaico. Un rayo láser vaporiza un objetivo de Grafito dopado con catalizador metálico (Co, Ni y Pt) dentro de un tubo de cuarzo con gas inerte a presión de 700 Torr y temperaturas entre 800 °C y 1500 °C. El producto es SWCNT (Vargas Ferreira, et al., 2016).

La figura 3.3 muestra el esquema de producción de SWCNT, que consta de grafito sellado en un tubo de sílice con Argón, un láser de Neodimio Nd-YAG (de las siglas en inglés Neodymium-doped Yttrium Aluminium Garnet) y un colector de Cobre; todo esto en un horno a 1200 °C. En el colector se acumulan los SWCNTs.

Esta es la más costosa de las técnicas, dada la potencia requerida. Además, los CNTs resultan con impurezas (Vargas Ferreira, et al., 2016).

Con este método se produce, únicamente, un aproximado de 70% de SWCNTs de buena calidad. Además, se tiene control del diámetro mediante el cambio de temperatura del horno, catalíticos y la tasa de flujo (León, 2013).



Figura 3.3 Esquema para la producción de SWCNT por el método de Ablación láser. Recuperado de: Síntesis, Caracterización y Evaluación de la Actividad Electrocatalítica de Nanopartículas

de Pt sobre Nanotubos de Carbono (Balcázar López, 2013)

3.4. Electrólisis

La figura 3.4 muestra el esquema para la producción de CNT. En el interior de un tubo de cuarzo con gas inerte (Argón) a presión entre 100 Torr y 150 Torr y temperatura de 600 °C, están ubicados los electrodos (cátodo y ánodo) de Grafito, sumergidos en LiCl fundido. La corriente eléctrica está entre 3 A y 20 A a una diferencia de potencial hasta de 20 V entre electrodos (Vargas Ferreira, et al., 2016).

Después de la electrólisis, se puede extraer los CNTs, así como otras nanoestructuras. El rendimiento de este método está entre el 20 % y 40 %. No es costoso; pero es difícil controlar el rendimiento y dimensiones de los CNTs (Balcázar López, 2013).



Figura 3.4 Esquema para la producción de CNT por el método de Electrólisis. Recuperado de: Síntesis, Caracterización y Evaluación de la Actividad Electrocatalítica de Nanopartículas de Pt sobre Nanotubos de Carbono (Balcázar López, 2013)

3.5. Síntesis por radiación con microondas

En este método, se entrega energía por medio del campo electromagnético de las ondas al material, logrando interacciones del tipo molecular. De esta manera, se controla la temperatura de calentamiento de forma uniforme y en forma rápida. Al calentar el grafito con microondas se produce el efecto Maxwell-Wagner, en el que los electrones libres con desplazamiento restringido sufren una reorientación, calentando así el material. La frecuencia adecuada para las microondas es de 2.45 GHz. El grafito absorbe microondas sin ser calentado previamente.

OxannVasilievna Kharissova, en su publicación "Síntesis de nanoestructuras de carbono mediante microondas" (2004), menciona los ensayos que realizó sobre este procedimiento. Preparó muestras de grafito en polvo (99 %), que colocó sobre vidrio de

cuarzo, que puede ser calentado hasta 1200 °C, permitiendo la sublimación del vapor de carbono y la acumulación de los nanotubos. En algunas muestras uso pintura de plata como catalizador. Utilizó un horno microondas doméstico de 800 W a una frecuencia de operación de 2.45 GHz. En total, preparó 8 muestras, cada una con un peso de 8 g. La primera muestra la colocó sin catalizador durante 20 minutos y no se observó aparición de nanotubos. Más adelante, colocó la última muestra con catalizador durante 60 minutos y observó aparición de nanotubos.

Kharissova caracterizó las muestras usando Microscopía Electrónica de Barrido SEM, Microscopía de Transmisión TEM y Microscopía de fuerza Atómica AFM. Obtuvo nanotubos de carbono multicapa. Observó que el tamaño y aparición de nanotubos son proporcionales al tiempo de calentamiento, siendo 60 minutos el tiempo óptimo. La ventaja de usar de plata como catalizador es que disminuye el tiempo de calentamiento hasta 30 minutos, se forma nanotubos más largos, y aumenta la cantidad de capas de los nanotubos, por lo que su diámetro se incrementa desde 168 nm hasta 400 nm. Sin embargo, la desventaja es que, ocasionalmente, partículas catalíticas se ubican a interior del nanotubo. En comparación con otros métodos de síntesis, usando microondas, los nanotubos resultan alineados, reduciendo la necesidad de procesamiento posterior.

Capítulo IV

Estructura de los Nanotubos de Carbono

4.1. Número de Capas

La estructura de los CNTs está conformada por capas de Grafeno; es decir, átomos de Carbono en una red hexagonal, enrolladas en forma de tubo. Los diámetros están en el orden de nanómetros y sus longitudes en el orden de los micrómetros. La figura 4.1 muestra CNTs de diferentes capas, ordenados de izquierda a derecha: de capa única (SWCNT), de doble capa (DWCNT) y de múltiples capas (MWCNT).



Figura 4.1 Tipos de CNTs de acuerdo a su número de capas Adaptado de: Procesado Quimico-Fisico de Nanomateriales de Carbono para la Preparación de Tintas y Películas Funcionales (Santidrián García, 2019)

4.2. Índices de Hamada (*n*, *m*)

Los números enteros positivos (n, m) y los vectores unitarios \vec{a}_1 y \vec{a}_2 , definen al vector chiral en la red cristalina hexagonal del Grafeno:

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \tag{1}$$

La figura 4.2 muestra las diferentes orientaciones del vector chiral (\vec{C}_h) , el vector de traslación \vec{T} (perpendicular al vector chiral) y los vectores unitarios \vec{a}_1 y \vec{a}_2 . De acuerdo a los valores posibles para n y m, el vector chiral tomará diferentes orientaciones dentro de la red hexagonal.



Figura 4.2 Enrollamiento de SWCNTs en la red hexagonal de Grafeno Recuperado de: Physical Properties of Carbon Nanotubes (Saito, Dresselhaus, & Dresselhaus, 1998)

La Figura 4.3 muestra los tres tipos de CNTs de acuerdo a su enrollamiento. De izquierda a derecha se tiene armchair, zigzag y chiral.



Figura 4.3 Tipos de SWCNTs de acuerdo a su enrollamiento

Adaptado de: https://www.intechopen.com/books/carbon-nanotubes-polymer-nanocomposites/polymer-carbon-nanotube-nanocomposites

El ángulo chiral (θ) es el ángulo comprendido entre los vectores \vec{a}_1 y entre \vec{C}_h (Bell, 2015):

$$\cos\theta = \frac{\vec{c}_h \cdot \vec{a}_1}{|\vec{c}_h| |\vec{a}_1|} = \frac{2n+m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}$$
(2)

El diámetro (d) queda determinado (Bell, 2015):

$$d = \frac{a}{\pi}\sqrt{n^2 + nm + m^2} \tag{3}$$

donde a es la longitud de enlace entre dos átomos de Carbono vecinos.

Los CNTs armchair (n = m), cuyo ángulo chiral mide 30° , presentan comportamiento metálico.

Los CNTs zigzag (m = 0), presentan un ángulo chiral que mide 0° .

Los CNTs chiral (0 < m < n), presentan un ángulo chiral cuyo valor está entre 0° y 30° .

Capítulo V

Propiedades eléctricas de los Nanotubos de Carbono de Capa Simple

Un electrón en un sólido con red periódica de átomos se encuentra con bandas permitidas de energía separadas por gaps (*band gaps*) no se mueve libremente. Si se considera el carácter ondulatorio del electrón (vector de onda), se puede aplicar el principio de dispersión de Bragg, dado que existen barreras de potencial provenientes de los *band gaps* en la estructura del sólido. La figura 5.1 muestra algunas bandas permitidas y algunos *band gaps*. También se muestra, en forma discontinua, la energía de un electrón libre en el espacio.



Figura 5.1 Bandas de energía permitidas y band gaps en la dispersión de un electrón. Adaptado de: *Carbon Nanotube and Graphene Device Physics* (Wong & Akinwande, 2011)

Existen infinitas soluciones para vectores de onda y energía; sin embargo, para el caso de propiedades eléctricas, es de mayor relevancia analizar los electrones con mayor energía. Muchos metales y semiconductores presentan estructuras parabólicas en la parte superior y fondo de sus bandas.

Para un sólido en equilibrio (a temperatura 0 K) la energía de Fermi (E_F) es la mayor energía de un estado ocupado (de acuerdo al principio de exclusión de Pauli). Las propiedades de los electrones con energía cercana a la energía de Fermi, determinan las propiedades de los dispositivos electrónicos (Wong & Akinwande, 2011).

En el Grafeno cada átomo de carbono presenta cuatro electrones en su capa de valencia, los cuales forman cuatro enlaces. Tres enlaces covalentes fuertes en el plano hexagonal con sus tres átomos vecinos, conocidos como enlaces σ , en tres orbitales sp^2 , producto de la hibridación de los orbitales 2s, $2p_x$ y $2p_y$. En la magnitud de la fuerza de estos enlaces radica la elevada resistencia mecánica de los CNTs a lo largo de su eje. El orbital restante es $2p_z$; un enlace débil, conocido como enlace π perpendicular al plano hexagonal. En la figura 5.2 se muestra los enlaces σ y π . Justamente ese enlace débil π es responsable de algunas de las principales propiedades como el transporte.



Figura 5.2 Enlaces σ y π en una lámina de Grafeno Adaptado de: Conduction in Carbon Nanotube Networks Large-Scale Theoretical Simulations (Bell, 2015)

Para la descripción de las bandas electrónicas del Grafeno, es práctico tomar como referencia el modelo de enlace fuerte (TB, de las siglas en inglés Tight Binding). La celda unitaria hexagonal está conformada por dos átomos de Carbono, los cuales formarán dos sub redes A y B. Para resolver la ecuación de Schrödinger, se puede escribir la función de onda como (Bell, 2015):

$$\psi_k(\vec{r}) = C_A(\vec{k})\tilde{p}_z^A(\vec{k},\vec{r}) + C_B(\vec{k})\tilde{p}_z^B(\vec{k},\vec{r})$$
(4)

donde

$$\tilde{p}_{z}^{A,B}(\vec{k},\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{R}} p_{z}(\vec{r}-\vec{r}_{A,B}-\vec{R})$$
(5)

 $\vec{k} = (k_x, k_y)$, es el vector de onda y \vec{R} es el vector de red.

En forma analítica es posible determinar la energía $E(\vec{k})$ en función del vector de onda \vec{k} , para así poder obtener la dispersión de energía para un electrón. Cada valor de $E(\vec{k})$ es una función periódica en la red recíproca dentro de la primera zona de Brillouin.

De acuerdo con Bell (2015), la relación de dispersión de energía, teniendo en cuenta los orbitales π en el Grafeno, es:

$$E(\vec{k}) = \pm t_0 \left[1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_xa}{2}\right)\cos\left(\frac{k_ya}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_ya}{2}\right) \right]^{1/2} \tag{6}$$

donde t_0 es típicamente del orden de 2.9 eV.

La Figura 5.3 muestra la estructura de bandas, cerca de la energía de Fermi. La banda superior corresponde a la banda de conducción (donde se conducen lo electrones) y la inferior a la banda de valencia (donde se conducen los "huecos"). Ambas se interceptan en los seis puntos K' (puntos de Dirac) en la zona hexagonal de Brillouin (Wong & Akinwande, 2011). En los puntos de Dirac los electrones o los "huecos" se comportan en forma parecida a los fotones.



Figura 5.3 Estructura de bandas cerca de la energía de Fermi para el Grafeno. Adaptado de: Espectroscopía de Pump & Probe Aplicadas al Estudio de Aislantes Topológicos de Floquet (Peralta Gavensky, 2016)

Debido a la estructura tubular de los CNTs, las condiciones de frontera determinan una función de onda periódica a lo largo de la circunferencia. Además, existen sub bandas de energía, cuyo posicionamiento depende del ángulo quiral (θ) y del diámetro, que a su vez dependen de los índices de Hamada (n,m). Dada la periodicidad a lo largo de la circunferencia del CNT, se puede asumir la función de onda (Bell, 2015):

$$\psi(\vec{k}, \vec{r} + \vec{C}_h) = e^{i\vec{k}.\vec{C}_h} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$
(7)

Donde \vec{k} . $\vec{C}_h = 2\pi l$, con "*l*" entero, lo cual es coherente con la periodicidad del vector de onda. De acuerdo a esto, se generan líneas discretas correspondiente a sub bandas.



La figura 5.4 muestra las sub bandas para el (8,2) CNT.

Figura 5.4 Estructura de bandas unidimensional para el (8,2) CNT Recuperado de: *Conduction in Carbon Nanotube Networks Large-Scale Theoretical Simulations* (Bell, 2015)

De acuerdo con la simetría de la estructura del CNT, es posible dos comportamientos: CTN metálico o CNT semiconductor.

5.1. Nanotubos de Carbono Metálicos

Este comportamiento ocurre cuando las sub bandas incluyen a los puntos de Dirac (*K'*), para lo cual se debe cumplir que: $\vec{k} \cdot \vec{C}_h = 2\pi l$ y de forma equivalente: n - m = 3l. Esto puede ser verificado para todos los (n,n) CNTs (Armchair) y algunos (n,0) CTNs (Zigzag) o (n,m) CNTs (Chiral). Las figuras 5.5 y 5.6 muestran las estructuras de bandas y la densidad de estados (DOS) para los (9,0) CNT y (5,5) CNT, respectivamente. Ambos tienen un carácter metálico.



Figura 5.5 Estructura de bandas unidimensional Y densidad de estados (DOS) para el (9,0) CNT Recuperado de: *Conduction in Carbon Nanotube Networks Large-Scale Theoretical Simulations* (Bell, 2015)



Figura 5.6 Estructura de bandas unidimensional y densidad de estados (DOS) para el (5,5) CNT Recuperado de: *Conduction in Carbon Nanotube Networks Large-Scale Theoretical Simulations* (Bell, 2015)

5.2. Nanotubos de Carbono Semiconductores

Este comportamiento ocurre cuando las sub bandas no incluyen a los puntos de Dirac (*K'*), para lo cual se tiene la condición: $n - m = 3l \pm 1$. De acuerdo con Bell (2015), el band gap correspondiente es:

$$E_g = \frac{2\pi a t_0}{\sqrt{3}|C_h|}$$

Se puede observar que el tamaño del band gap es inversamente proporcional al diámetro del CNT. La figura 5.7 muestra la estructura de bandas para el (10,0) CNT zigzag semiconductor. Se puede observar que existe un pequeño band gap.



Figura 5.7 Estructura de bandas para el (10,0) CNT semiconductor Recuperado de: Conduction in Carbon Nanotube Networks Large-Scale Theoretical Simulations (Bell, 2015)

Capítulo VI

Aplicaciones de los Nanotubos de Carbono de Capa Simple

6.1 Transistores de Nanotubos de Carbono

El reto actual en la fabricación de circuitos integrados (chips) es hacerlos con cada vez mayor cantidad de transistores en su interior. Esto se puede lograr reduciendo las dimensiones de cada transistor, logrando así aumentar el rendimiento, reducir el consumo de energía y disminuir los costos de fabricación.

La Figura 6.1 muestra un transistor PNP que consta de un emisor (posición 1), desde donde ingresa la corriente eléctrica; una base (posición 2), donde se modula la corriente entre el emisor y colector (posición 3); y el colector, hacia donde llega la corriente. Esto es posible gracias a las propiedades de los materiales semiconductores dopados (tipo N o tipo P) de los que están constituidos, comúnmente silicio. Los transistores pueden funcionar como interruptores, amplificadores, osciladores, conmutadores, rectificadores, etc.



Figura 6.1 Transistor bipolar PNP TIP41C

Recuperado de: https://spanish.alibaba.com/product-detail/bipolar-transistors-npn-tip41c-power-ic-chip-500v-transistors-60804757130.html

De acuerdo con la ley de Moore, la cantidad de componentes dentro de un circuito integrado se duplica cada 18 o 24 meses (Lambrechts, Sinha, Abdallah, & Prinsloo, 2019). Sin embargo, la reducción de las dimensiones está alcanzando su límite.

Para la fabricación de microprocesadores de computadoras se utiliza el proceso de fotolitografía. En este método, prácticamente se imprime sobre láminas de Silicio el diseño de los transistores. En este caso, a menores dimensiones de los componentes se hace más difícil fabricarlos. Por ello, en algunas oportunidades se presentan errores en la producción.

El transistor de efecto de campo metal-óxido-semiconductor MOSFET (de las siglas en inglés Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor) muestra más eficiencia que el transistor tradicional. Sin embargo, al construirlos a menores escalas, menores de 10 nanómetros, sufren los efectos de "túnel cuántico", aumento de corriente de fuga y perforación (Kordrostami & Hossein Sheikhi, 2010).

Una posible alternativa es reemplazar los transistores de Silicio con transistores de Nanotubos de Carbono semiconductores. Las bondades radican en sus excelentes propiedades eléctricas como el gran recorrido libre medio, gracias a su estructura no plana. Además, presentan resistencia a tensiones a lo largo de su eje y tienen propiedades de transporte puramente unidimensionales. En teoría, los transistores de nanotubos de carbono de efecto de campo CNTFETs (de las siglas en inglés de Carbon Nanotube Field Effect Transistor) podrían alcanzar un dominio de frecuencia de alrededor de Tera hercios.

La figura 6.2 muestra una sección de la estructura coaxial de un CNTFET. El (13,0) CNT zigzag presenta dos regiones S (emisor) y D (colector) dopadas con Potasio. Corresponde una banda prohibida de aproximadamente 0.83 eV y un diámetro de 1 nm. El dieléctrico consiste en ZrO2 de 2 nm de espesor. La puerta (Gate) es de 10 nm de longitud y 6 nm de espesor. Existen barreras de potencial entre S y D, lo que impide la corriente de electrones; sin embargo, aplicando una diferencia de potencial en la puerta (Gate) se logra modular un flujo de corriente eléctrica. Esto se debe al carácter semiconductor del (13,0) CNT, que al recibir energía pasa de ser aislante a conductor.



Figura 6.2 Estructura de un CNTFET

Recuperado de: Fundamental Physical Aspects of Carbon Nanotube Transistors (Kordrostami & Hossein Sheikhi, 2010)

6.2. Biosensores

Los biosensores se usan para medir señales biológicas como, por ejemplo, el pulso de las personas. Están compuestos, básicamente, por un receptor biomolecular y un transductor. La señal medida es recogida por el receptor, el cual reacciona ante una señal específica y luego esta es transmitida a través del transductor. Estos componentes deben tener adecuadas propiedades bioeléctricas.

Los CNTs tienen relevantes ventajas, usándolos como biosensores para las personas. Su diámetro les permite ingresar fácilmente a través de las capas superficiales de la piel. Sus propiedades eléctricas mejoran la conducción, evitando el ruido en las señales obtenidas.

Algunas de las propiedades de los nanotubos de carbono dan la capacidad de poder adaptarlos para ser integrados a sistemas biológicos. Los CNTs están estructurados de extensas cadenas de carbonos fuertemente unidos por enlaces covalentes sp^2 ; sin embargo, dada su curvatura y propiedades cuánticas, puede haber re-hibridación $\sigma - \pi$. De este modo, los orbitales σ estarían ligeramente fuera del plano y los orbitales π estarían más deslocalizados. Esto da la posibilidad de absorción molecular, dopaje y transferencias de carga (Pacios Pujadó, 2012). La figura 6.3 muestra diferentes funciones oxigenadas que pueden aparecer en los bordes de un CNT.



Figura 6.3 Algunas funciones oxigenadas acopladas en los bordes de un (17,37) CNT Recuperado de: Carbon Nanotubes as Platforms for Biosensors with Electrochemical and Electronic Transduction (Pacios Pujadó, 2012)

Los Nanotubos de Carbono con efecto de campo CNTFET pueden ser usados como biosensores. Tienen gran sensibilidad de detección, en tiempo real, de cambios en la conductividad eléctrica asociada con su bioreceptor (Pineda, Jun Han, & Ostrikov, 2014).

6.3. Administración de fármacos

Administrar fármacos al cuerpo humano requiere gran precisión. El fármaco debe actuar en células específicas y en una cantidad de dosis suficiente para lograr objetivo, minimizando las afectaciones colaterales.

Partículas con dimensiones mayores a 200 nm no soy muy utilizadas, ya que el sistema inmunológico podría contrarrestarlos. En este caso, las nano cápsulas o nano esferas pueden ser utilizadas como vehículos de transporte para llevar drogas hacia tumores cerebrales de forma eficiente. Por otra parte, dado su tamaño (menor que los capilares), se evita la formación de émbolos o trombos (Oropesa Nuñez & Jáuregui Haza, 2012).

Los nanotubos de carbono poseen propiedades y características que los hacen fundamentales para la administración de fármacos. Presentan pequeño diámetro y pueden ser manipulados física o químicamente a escala nanométrica. Además, tienen solubilidad en disolventes acuosos. Introduciendo grupos funcionales en la superficie de los nanotubos se puede anular las fuerzas de van der Waals, mejorando así su solubilidad (Oropesa Nuñez & Jáuregui Haza, 2012). Los nanotubos de carbono son capaces ingresar a las moléculas en el citoplasma, pudiendo transportar agentes terapéuticos o de diagnóstico. La figura 6.4 muestra un CNT funcionalizado para dirigir polietilenglicol (PEG), útil para tratamientos contra el cáncer (Markman, Rekechenetskiy, Holler, & Ljubimova, 2013).



Figura 6.4 Representación de CNT funcionalizado para dirigir PEG

Recuperado de: *Nanomedicine Therapeutic Approaches to Overcome Cancer Drug Resistance* (Markman, Rekechenetskiy, Holler, & Ljubimova, 2013)

6.4. Electroquímica

La batería es un dispositivo capaz de acumular (carga) y suministrar (descarga) energía eléctrica, usando la energía química, por medio de procesos de oxidación y reducción en su interior. Existen baterías recargables y no recargables.

En general, en dispositivos electroquímicos que almacenan energía hay transferencia de iones de un electrodo a otro, atravesando un electrolito. Asimismo, se genera corriente eléctrica externamente.

La figura 6.5 muestra, esquemáticamente, el funcionamiento de una batería de iones de litio. En el proceso de carga, aplicando una diferencia de potencial, los iones Li^+ son separados del $LiCoO_2$ y atraviesan el electrolito, quedando almacenados entre las capas de grafito. Al mismo tiempo, los electrones también llegan al espacio del grafito, a través del circuito externo. En el proceso de descarga, sin diferencia de potencial aplicada, los iones Li^+ retornan al $LiCoO_2$ y los electrones también retornan, a través del circuito, generando la corriente eléctrica.



Figura 6.5 Ilustración esquemática del funcionamiento de una batería de iones de litio. Recuperado de: http://almadeherrero.blogspot.com/2014/02/diseccion-de-una-bateria-de-ion-litio.html

Las baterías recargables de Litio han demostrado ser una buena opción para la operación de dispositivos portátiles. Sin embargo, aún no se ha generalizado su uso para vehículos. Se requiere mejoras en densidad de energía acumulada, temperatura de operación, costo, cantidad de ciclos (carga y descarga) y seguridad. Esto se podría lograr mejorando los materiales usados en la construcción de sus componentes.

Los CNTs son buenos candidatos, gracias a sus propiedades eléctricas, térmicas y mecánicas. Pueden absorber gran variedad de átomos o moléculas; siendo capaces de operar como ánodo, en el caso de las baterías de Litio. Comparado con el grafito, CNTs tienen la ventaja de aumentar la capacidad de la batería, gracias a su estructura, resistencia, alta conductividad y resistencia a la degradación química. Se espera que SWCNTs tengan capacidades de alrededor de 300 mAhg⁻¹, superando al grafito. La conductividad superior de los CNTs facilita la circulación, tanto de los electrones como de los iones de Litio, en los electrodos (Sehrawat, Julien, & Islam, 2016). La figura 6.6 muestra la estructura de la intercalación del Litio en (10,0) CNT Li₅C₄₀. Se puede apreciar que los átomos de Litio (pequeñas esferas blancas) no muestran densidad de electrones. Sin embargo, en las cercanías del CNT si se observa densidad de electrones, lo que implica que se realizó la transferencia de electrones entre el Litio y el CNT. Los colores rojo, amarillo, verde y azul representan en forma ascendente densidad de electrones, de alta hasta baja.



Figura 6.6 Estructura geométrica y densidad de electrones de la intercalación de Li con (10,0) CNT Li₅C₄₀ Adaptado de: First-Principles Study of Li-Intercalated Carbon Nanotube Ropes (Zhao, Buldum, Han, & Ping Lu, 2000)

6.5. Nano Cables

Los compuestos unidimensionales, como los mono-colagenuros de metales de transición TMMs (de las siglas en inglés Transition Metal Monochalocogenides), son buenas aplicaciones en dispositivos nano electrónicos, ya que pueden servir como canales ultrafinos para circuitos integrados 2D.

Nano cables TMMs pueden ser producidos dentro de CNTs, dado que las propiedades electrónicas de los CNTs se pueden ajustar para encapsular diferentes nanocables TMMs. Además, a los alambres aislados, al ser torsionados, se les podría cambiar la banda prohibida de acuerdo con el ángulo de torsión. Gracias a esto, sería posible utilizarlos en dispositivos de conmutación electro mecánicos (Kanda, y otros, 2020).

Los CNTs, al contener los nano-cables TMMs, les dan protección permanente, especialmente, en los bordes expuestos. Además, no se enlazan covalentemente con los nano-cables, por lo que no modifican las propiedades de los nano-cables TMMs (Kanda et. al., 2020).

La figura 6.7 muestra, en la parte superior, el modelo estructural de un nano-cable de teluro de molibdeno dentro de un CNT (MoTeNW@CNT). En la parte inferior se muestra la imagen que se obtiene a través del microscopio electrónico de transmisión de barrido STEM (de las siglas en inglés Scanning Transmission Electron Microscopy) con el detector de campo oscuro anular de gran ángulo HAADF (de las siglas en inglés High Angle Annular Dark Field)



Figura 6.7 Modelo estructural e imagen de resolución atómica HAADF-STEM de un MoTeNW@CNT. Recuperado de: Efficient Growth and Characterization of One-Dimensional Transition Metal Tellurides Inside Carbon Nanotubes (Kanda, y otros, 2020)

6.6. Superconductores

Un material superconductor es aquel que no opone resistencia al paso de la corriente eléctrica (resistividad cero) a cierta temperatura, llamada temperatura crítica (T_c) . En relación con ello, la densidad de corriente crítica J_c es la máxima corriente que puede haber por debajo de la T_c . Para efectos prácticos es conveniente disponer de un superconductor con mayor J_c y T_c cercana a la temperatura ambiente.

Las propiedades de superconductividad dependen de las impurezas en la estructura química del superconductor. También dependerán del tipo, cantidad y preparación del material para realizar el dopaje (Dadras, Liu, Chai, Daadmehr, & Kim, 2009).

CNTs pueden servir como material para realizar el dopaje, gracias a su diámetro nanométrico y a su estructura.

En el caso del superconductor $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO), al adicionar CNTs al 0.7 % en peso (wt %), no se altera significativamente su estructura; además, esta inclusión mejora sus parámetros superconductores, dando un mayor valor de J_c

Esto puede deberse a que un bajo dopaje con CNT mejora las interconexiones eléctricas dentro del material superconductor. La figura 6.8 muestra la densidad de corriente J_c vs el campo magnético H(T) para diferentes cantidades de dopaje con CNT a una temperatura de 70 K. Se puede observar que el máximo se obtuvo a 0.7 wt% (Dadras, Liu, Chai, Daadmehr, & Kim, 2009).



Figura 6.8 J_c vs H(T) para diferentes cantidades de dopaje con CNT Recuperado de: Increase of Critical Current Density With Doping Carbon Nano-Tubes in YBa2Cu3O7-d (Dadras, Liu, Chai, Daadmehr, & Kim, 2009)

Conclusiones

De acuerdo con la revisión de fuentes sobre el tema seleccionado se presentan las siguientes conclusiones.

- El estudio, análisis y experimentación con Nanotubos de Carbono constituye gran aporte para el avance da la nanotecnología y el nivel tecnológico en general. Por esta razón, el desarrollo de estudios, tanto descriptivos como experimentales, es fundamental para la formación de un debate que contribuya al avance científico en este campo.
- 2. La síntesis de Nanotubos de Carbono requiere de más investigación encaminada a reducir costos de proceso y elevar la precisión respecto a las características del producto. Actualmente, el método de deposición química de vapor es el más usado, dado su costo no muy elevado y relativo control en cuanto a la estructura del nanotubo producido, que puede ser guiado por el catalizador en el sustrato.
- 3. La evaluación de la estructura de los Nanotubos de Carbono ha permitido determinar que se pueden presentar en una o varias capas y que su estructura se puede entender fácilmente conociendo los índices de Hamada (n,m).
- 4. Las propiedades eléctricas de los Nanotubos de Carbono son, principalmente, su carácter metálico o semiconductor, y dependen del diámetro y forma de enrollamiento. Conociendo los índices de Hamada también se puede anticipar su comportamiento metálico o semiconductor.
- 5. Ya se pueden aprovechar aplicaciones de los Nanotubos de Carbono en electrónica, biosensores, medicina, electroquímica. Además, ya se exploran otros usos de este material. Sin embargo, existen muchas más aplicaciones potenciales por descubrir, por lo que es obligación de los investigadores en el campo de la física aportar al debate y desarrollo de un corpus teórico que permita su comprensión y uso.

Referencias

- Balcázar López, A. (2013). Síntesis, Caracterización y Evaluación de la Actividad Electrocatalítica de Nanopartículas de Pt sobre Nanotubos de Carbono. [Tesis para optar el título de Ingeniero en Metalurgia y Materiales, Instituto Politécnico Nacional. Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas de México]. https://tesis.ipn.mx/bitstream/handle/123456789/17035/25-1-16636.pdf?sequence=1&isAllowed=y
- Bell, R. (2015). Conduction in Carbon Nanotube Networks Large-Scale Theoretical Simulations. Springer.
- Chem, C. (2007). Introduction to Scanning Tunneling Microscopy. Oxford University Press.
- Dadras, S., Liu, Y., Chai, Y. S., Daadmehr, V., & Kim, K. H. (2009). Increase of Critical Current Density With Doping Carbon Nano-Tubes in YBa2Cu3O7-d. *Physica C: Superconductivity*. 469 (1), 55 – 59. https://doi.org/10.1016/j.physc.2008.11.004 Grobert, N. (2007). Carbon nanotubes – becoming clean. *Materialstoday 10* (1-2), 28 – 35.
- Harris, P. J. (2009). Carbon Nanotube Science Synthesis Properties and Applications. Cambridge University Press. https://doi.org/10.1017/CBO9780511609701
- Ijima, S. (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354, 56–58. https://doi.org/10.1038/354056a0
- Kanda, N., Nakanishi, Y., Liu, D., Liu, Z., Inoue, T., Miyata, Y., . . . Shinohara, H. (2020). Efficient Growth and Characterization of One-Dimensional Transition Metal Tellurides Inside Carbon Nanotubes. *Nanoscale*. 10.1039/D2NR03770J
- Kordrostami, Z., & Hossein Sheikhi, M. (2010). Fundantal Physical Aspects of Carbon Nanotube Transistors. En Marulanda, J. (Ed.), *Carbon Nanotubes* (169 – 186). In-Tech. 10.5772/39424
- Kroto, H., Heath, J., O'Brien, S., Curl, R., & Smalley, R. (1985). C60: Buckminsterfullerene. *Nature* 318, 162–163. https://doi.org/10.1038/318162a0
- León Lugo, Cristina. (2013). Sintesis de nanotubos de carbono por cvd a partir de tolueno y ferroceno. [Tesis para optar el título de Ingeniera en Metalurgia y Materiales, Instituto Politécnico Nacional. Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas de México]. http://tesis.ipn.mx/handle/123456789/24959

- Lambrechts, W., Sinha, S., Abdallah, J., & Prinsloo, J. (2018). *Extending Moore's Law Through* Advanced Semiconductor Design and Processing Techniques. CRC Press.
- Markman, J. L., Rekechenetskiy, A., Holler, E., & Ljubimova, J. Y. (2013). Nanomedicine Therapeutic Approaches to Overcome Cancer Drug Resistance. Advanced Drug Delivery Reviews. 65, Issues 13–14. https://doi.org/10.1016/j.addr.2013.09.019

McKelvey, J. (1980). Física del Estado Sólido y de Semiconductores. Limusa.

- Oropesa, R., & Jáuregui, U. (2012). Las Nanopartículas Como Portadores de Fármacos: Características y Perspectivas. CENIC Ciencias Biológicas, 43 (3). https://www.researchgate.net/publication/236649980_Las_nanoparticulas_como_portado res_de_farmacos_caracteristicas_y_perspectivas_Nanoparticles_as_drug_carriers_charact eristics_and_perspectives
- Pacios Pujadó, M. (2012). Carbon Nanotubes as Platforms for Biosensors with Electrochemical and Electronic Transduction. Springer.
- Peralta, L. (2016). Espectroscopía de Pump & Probe Aplicadas al Estudio de Aislantes Topológicos de Floquet. [Tesis de Maestría, Universidad Nacional de Cuyo]. <u>http://ricabib.cab.cnea.gov.ar/592/1/Peralta Gavensky.pdf</u>
- Pineda, S., Jun Han, Z., & Ostrikov, K. (2014). Plasma-Enabled Carbon Nanostructures for Early Diagnosis of Neurodegenerative Diseases. *Materials (Basel)* 25 (7), 4896-4929. doi: 10.3390/ma7074896. PMID: 28788112; PMCID: PMC5455823.
- Saito, R., Dresselhaus, G., & Dresselhaus, M. (1998). Physical Properties of Carbon Nanotubes. *Carbon 33* (7), 883 - 891. https://doi.org/10.1016/0008-6223(95)00017-8
- Santidrián, A. (2019). Procesado quimico-fisico de nanomateriales de carbono para la preparación de tintas y películas funcionales. [Tesis doctoral, Universidad de Zaragoza]. http://hdl.handle.net/10261/195531
- Sehrawat, P., Julien, C., & Islam, S. (2016). Carbon Nanotubes in Li-ion batteries: A Review.
 Materials Science and Engineering: B (213), 12 40. https://doi.org/10.1016/j.mseb.2016.06.013
- Sofyan, N., Settwan, M., Herbirowo, S., & Imaduddin, A. (2019). Synthesis ann Characterization of SiC and CN doped MgB2 Superconducting wire. *Inorganic and Nano-Metal Chemistry*. <u>https://doi.org/10.1080/24701556.2019.1711400</u>

- Takeuchi, N. (2009). Nanociencia y nanotecnología: la construcción de un mundo mejor átomo por átomo. FCE.
- Wong, H.-S., & Akinwande, D. (2011). Carbon Nanotube and Graphene Device Physics. Cambridge University Press. <u>https://doi.org/10.1017/CBO9780511778124</u>
- Zhao, J., Buldum, A., Han, J., & Ping Lu, J. (2000). First-Principles Study of Li-Intercalated Carbon Nanotube Ropes. 85. doi:10.1103/PhysRevLett.85.1706