



Una breve reflexión de la Física del estado sólido

CECILIA NOGUEZ *

En toda la historia de la humanidad, el ser humano ha modificado la materia desarrollando herramientas diversas; pasando por la Edad de Piedra hasta llegar a lo que llamamos la Era de la Informática. Sin embargo, lo que conocemos formalmente como la Física del Estado Sólido comienza muy poco tiempo después de que se exponen las primeras bases de la mecánica cuántica, las cuales proporcionaron herramientas poderosas para describir los sólidos desde el punto de vista atómico. Pero la Física del estado sólido no se limita al uso de la mecánica cuántica, también integra en la descripción y solución de sus problemas al electromagnetismo, la mecánica clásica, la Física estadística y sus diferentes subáreas.

Desde un punto de vista muy personal, considero que los problemas que representan entender la materia desde la Física del estado sólido son los más ricos y retadores. Además, es una de las áreas que ha cristalizado más rápidamente su aportación a la tecnológica y por supuesto a la Era de la Informática. Basta recordar el progreso de los transistores y la microelectrónica, así como la gestación de nuevas disciplinas como la ciencia e ingeniería de materiales, la nanociencia y la nanotecnología, la ingeniería electrónica, entre otras. En estas nuevas disciplinas no sólo integran las leyes físicas, sino también principios biológicos y propiedades químicas de la materia con aplicaciones en salud, medio ambiente, energía, seguridad, comunicaciones, entre otras áreas de interés universal.

Un punto de partida importante de la Física del estado sólido es el llamado Teorema de Bloch, que permite describir arreglos periódicos de átomos, los llamados cristales, resolviendo la ecuación de Schrödinger de los electrones que componen al sistema y desarrollando la llamada teoría de bandas. Recordemos que en un sólido cristalino en tan sólo un centímetro cúbico se tienen 10^{23} átomos más sus respectivos electrones. Por lo que, sin el Teorema de Bloch, sería imposible entender los sólidos y mucho menos sus interacciones y respuestas a estímulos externos como la luz, los campos magnéticos, cambios de temperatura, presión, fuerzas mecánicas, etcétera. Tampoco se hubieran inventado otros sistemas a partir de estos conceptos como los cristales líquidos, los cristales fotónicos o los metamateriales, entre otros. Y mucho menos se hubiera llegado a la sofisticación tecnológica de crear materiales tan delgados como el espesor de un átomo, ni a la creación de las herramientas necesarias para observarlos e interactuar con ellos.

Sin lugar a dudas, la Física del estado sólido, con la ayuda del Teorema de Bloch y su consecuente teoría de bandas, ha sido indispensable para el desarrollo tecnológico actual y me atrevo a decir que seguirá siendo la base de lo mucho que veremos tanto en ciencia básica como en tecnología. En términos conceptuales, se ha visto que el estudio de la Física del estado sólido sigue un camino que lleva gradualmente

* Universidad Nacional Autónoma de México.
Contacto: cecilia@fisica.unam.mx

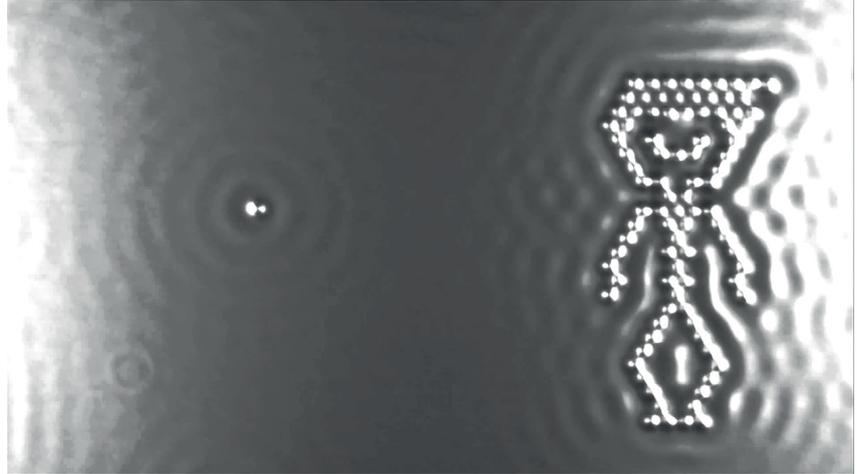


a sistemas de creciente complejidad. En una primera etapa se estudiaron las estructuras atómicas de los cristales, sus simetrías dada su periodicidad, la interacción atómica que da lugar a dichos cristales y la explicación a sus propiedades fundamentales como dureza, respuesta térmica, transporte electrónico y respuesta a diferentes campos electromagnéticos, como los rayos X, la luz, entre otros.

Con estos conocimientos fundamentales, en una segunda etapa se les añadió cierta complejidad cambiando sistemáticamente su composición atómica para variar gradualmente sus propiedades fundamentales entre, por ejemplo, aislantes y conductores, creando así una serie de semiconductores de muy alta calidad con propiedades emergentes dependiendo de su composición. El estudio de estos semiconductores permitió el descubrimiento del primer transistor de contacto, pero la posterior necesidad de miniaturizarlo abrió una nueva etapa de complejidad. Los sistemas se volvieron de tamaño micrométrico y submicrométrico, dando lugar a nuevos fenómenos, como el confinamiento cuántico de partículas y cuasipartículas. Estos sistemas no se podían explicar con lo que se había creado a partir del Teorema de Bloch y la descripción “simplista” de los electrones del cristal. El Teorema de Bloch se adaptó a sistemas en los que se rompe la periodicidad del cristal ya fuera en una (1D), en dos (2D) o en sus tres (3D) dimensiones. Con la reducción de tamaño, los efectos debidos a la superficie e interfaces de los cristales se volvieron relevantes, así como las interacciones electrónicas, incluyendo los efectos de correlación e intercambio. Esto desató una nueva ola de desarrollos teóricos y experimentales con los que se hizo necesario entender la interacción de muchos átomos, electrones y de sus excitaciones, cómo se arreglaban los átomos en las superficies e interfaces, así como las consecuencias del rompimiento de simetrías.

En esta nueva etapa la Física computacional se posicionó como una herramienta indispensable, gracias a la cual se pueden realizar “experimentos controlados” con varios átomos, y se pueden probar las diferentes teorías mediante la comparación con los experimentos. Se comprendió que la estructura atómica del sistema determinaba sus propiedades fundamentales y se crearon microscopios electrónicos para visualizarlos. Con las computadoras y las nuevas herramientas experimentales, como microscopios de fuerza atómica, métodos ópticos, magnéticos, entre otros, se pudo avanzar de manera simultánea en el entendimiento de las propiedades de estos sistemas y en el progreso de teorías y nueva instrumentación tanto experimental como computacional.

Al fabricar los objetos submicrométricos y entenderlos como entidades autónomas, se puede pensar en, por ejemplo, los puntos cuánticos como los nuevos átomos del sistema. Así se comenzó una nueva etapa de complejidad: la creación de arquitecturas jerárquicas a partir de entidades complejas más allá de los átomos para crear nuevos cristales. De aquí surgen las llamadas superredes, los cristales fotónicos y fonónicos, entre otros. La idea es simple: si conocemos las propiedades de la entidad o entidades, así como su arreglo periódico, podemos crear supercristales con las propiedades que deseemos. Éstos son los antecedentes de los ahora llamados metamateriales. Nuevamente, esto conduce a la producción de nuevas herramientas tanto para fabricar los metamateriales en donde la nanofabricación se vuelve indispensable,



“Un chico y su átomo”, la película más pequeña del mundo creada con átomos.

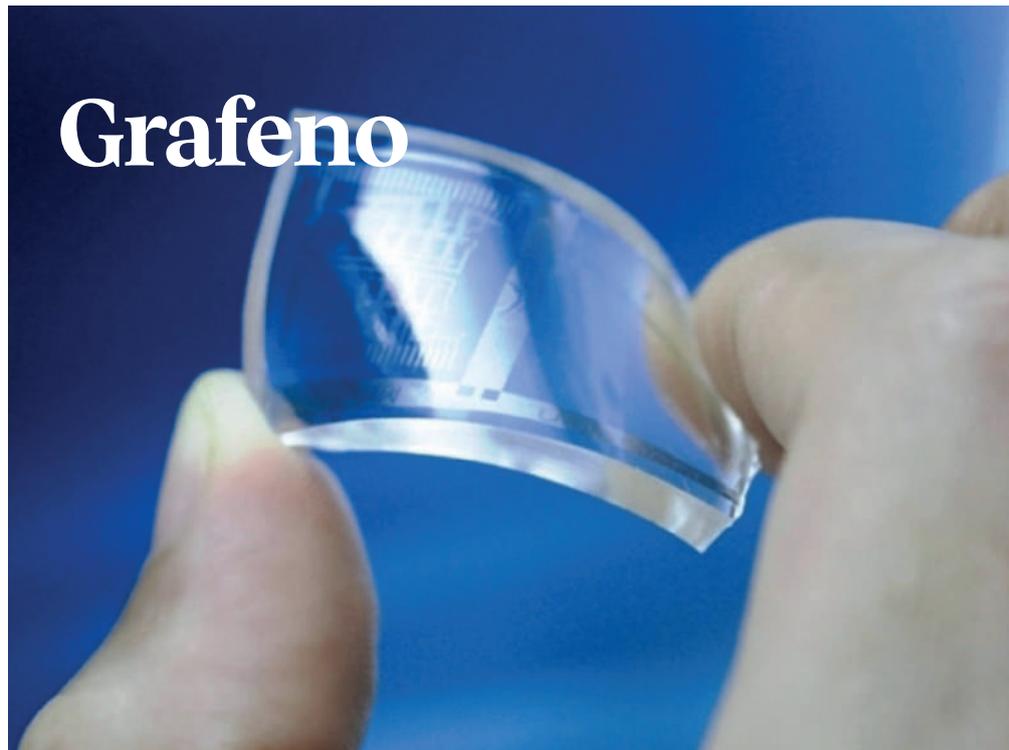
así como el desarrollo de teorías que permitan estudiar de manera integral fenómenos concurrentes a la nanoescala, tomando en cuenta la complejidad del sistema y el descubrimiento de nuevos fenómenos. Y no se diga de las técnicas experimentales que permiten distinguir entre ellos.

En la actualidad, hemos llegado al extremo de aislar sistemas crista-

linos tan delgados del espesor de un solo átomo, como el grafeno, lo que llamamos un cristal bidimensional o 2D. Este cristal 2D tiene bandas electrónicas cercanas al nivel de Fermi tales que sus electrones se comportan como una cuasipartícula sin masa, por lo que su velocidad no depende de su energía y tienen gran movilidad. Estas cuasipartículas se conocen como Fermiones de Dirac. Cuando se estiran o



apilan dos capas de grafeno surgen fenómenos interesantes en los que podemos modificar la población de electrones cercanos al nivel de Fermi y manipular sus propiedades electrónicas, los estados de espín de los electrones, así como sus propiedades magnéticas. Pero también hay otros materiales, los cuales podemos llamar cristales 2D, que también se consiguen aislar y manipular. De éstos, se han fabricado muy pocos, pero algunos de ellos tienen propiedades muy diferentes a las del grafeno. Se cree que se pueden obtener más de 1800 compuestos con posibilidades de ser aislados como cristales 2D. La interacción entre las capas de estos materiales es a través de interacciones débiles de van der Waals, lo que permite manipular “fácilmente” su apilamiento. Siguiendo los mismos conceptos, se ha comenzado a investigar cómo es posible crear nuevos sistemas con propiedades híbridas y emergentes. Además, se pueden crear cristales 2D con nuevas simetrías a partir de uno, dos o más componentes apiladas,



agregando nuevos grados de libertad al sistema, con fuerte confinamiento cuántico entre capas y por lo tanto propiedades físicas diferentes. Pero aquí una vez más se crean nuevas interrogantes y retos, siendo la principal, desde mi punto de vista: ¿cómo vamos a escalar estas propiedades sin modificarlas y hacerlas útiles en nuestro entorno a escala de metros?

Otros sistemas interesantes son aquéllos que son aislantes en su interior, pero conducen electrones en sus orillas. Es decir, el transporte electrónico tiene una dirección preferencial. Esto se logra cuando el sistema conserva la simetría de inversión en el tiempo, es decir, da lo mismo ir en el futuro que en el pasado, pero con un orden topológico determinado. A estos sistemas se les llama aislantes



topológicos, en ellos los estados electrónicos de superficie se conservan al igual que su simetría temporal, con consecuencias importantes en la dirección del espín de los electrones, el cual siempre es perpendicular a su momento lineal. Así que, un aislante topológico 3D crea un gas electrónico en 2D. Para cambiar estos estados de superficie es necesario cambiar la simetría temporal, no importando si los átomos en las orillas se saturan o no, ya que la topología del sistema protege su simetría temporal. Sin embargo, todavía hay muchas interrogantes sobre estos sistemas, en cómo acoplarlos con otros y hacer nuevas estructuras híbridas y complejas.

Finalmente, con todos estos sistemas en los que podemos tener un alto control de sus propiedades se encuentra un nuevo grado de complejidad, su acoplamiento a las excitaciones de átomos y moléculas individuales o en su conjunto. También el reconocimiento molecular puede generar nuevos sistemas autoensamblados, creando nuevas arquitecturas jerárquicas complejas, como si arrojásemos bloques de lego y ellos se unieran por sí solos. Por ejemplo, la luz puede ser confinada en espacios muy pequeños debido a la excitación de campos eléctricos evanescentes en nanopartículas pequeñas. La manipulación de dichos campos permite concentrar y transportar energía en “cristales plasmónicos”. Estos campos eléctricos confinados se acoplan con ciertas excitaciones fundamentales de la materia, modificando drásticamente la tasa de eficiencia de emisores y absorbedores de luz, como pueden ser moléculas o átomos. También estos campos evanescentes



confinados pueden aumentar o disminuir la transferencia de calor entre partículas que se encuentran a distancias de separación nanométricas. Estos sistemas se pueden aplicar en una gran cantidad de dispositivos como celdas fotovoltaicas, en nuevos sistemas LED, en enfriamiento y control de calor, en transistores térmicos, en grabación magnética asistida por calor, en fotosíntesis artificial y, por supuesto, en computación cuántica.

Todos estos nuevos sistemas nos imponen nuevos retos. Será necesario desarrollar nuevas metodologías teóricas, experimentales y computacionales que permitan estudiar de manera integral fenómenos concurrentes debido a la complejidad del sistema. Es indispensable entender las bases de la transición entre comportamientos cuánticos y clásicos en dispositivos y sistemas, así como el uso y control de los efectos cuánticos. Se deben encontrar modelos teóricos realistas en los que se puedan describir estados electrónicos excitados, así como la correlación electrónica, para sistemas con miles de átomos. Aunque se ha avanzado en esta dirección, la mayoría de las teorías se encuentran muy limitadas en su descripción fenomenológica o en el número de átomos que pueden estudiar. Al mismo tiempo, es indispensable incrementar la capacidad de cómputo en al menos 10,000 veces para realizar, por ejemplo, simulaciones *ab initio* de puntos cuánticos, simulación de autoensamblado de materiales programados, entre otros.

Además, es necesario desarrollar la modelación multiescala para, por ejemplo, la generación de campos

de fuerza en dinámica molecular de dispositivos específicos como celdas solares que nos permitan determinar su eficiencia con mayor precisión. También se deben inventar metodologías basadas en nuevas tecnologías, como la inteligencia artificial, la cual se proyecta puede ayudar a identificar patrones, tendencias y no tener que explorar uno por uno los más de 1800 compuestos 2D y sus posibles combinaciones para determinar las estructuras idóneas y sus propiedades físicas predeterminadas. Es importante innovar nuevas herramientas para detectar y escalar a sistemas más grandes el transporte cuántico y el flujo de corriente a escala molecular en nanodispositivos. Dentro de los procesos multiescala es necesario hacer aproximaciones más generales, pero concretas, para entender mejor la catálisis, proceso en el que concurren muchos fenómenos a la vez. También se deben realizar aproximaciones predictivas para la compatibilidad y ensamblaje de materiales bióticos y abióticos. Para crear imágenes en 3D con especificidad química, resolución temporal y resolución atómica de estructuras complejas, como pueden ser las proteínas individuales, herramientas con precisión atómica para medir y reestructurar, resolución temporal en reacciones químicas y desarrollo de instrumentación *in situ* para procesos controlados de manufactura.

Para crear rutas de autoensamblaje controlado de átomos y moléculas en estructuras jerárquicas es indispensable encontrar nuevas rutas. Explorar nuevos fenómenos físicos con fotones, electrones, magnones, para nuevas aplicaciones como tran-

sistores más rápidos y con menos disipación, transparencia mayor a 98%, materiales y dispositivos para conectar lo nano con el macro. Es preciso establecer las condiciones para la manufactura a gran escala de nanoestructuras puras y combinadas, simples y complejas, pero con propiedades uniformes. Descubrir nuevos materiales multiférrico/magnéticos. Entender el comportamiento colectivo de portadores de carga a temperatura ambiente en grafeno y aislantes topológicos. Almacenamiento de luz en milisegundos o mucho menos. Encontrar estructuras con bajas pérdidas de resonancia, láseres con gran eficiencia en transmisión de ener-

gía, funcionando con muy baja potencia de entrada y salidas con altas ganancias. Implementar fábricas e “impresoras de escritorio 3D” para el desarrollo de nuevos prototipos, sin la necesidad de cuartos limpios. Técnicas de impresión molecular que permitan el posicionamiento en superficies, diferenciar y seleccionar moléculas, proteínas y hasta células a gran escala.

En fin, hay un mundo nuevo, excitante, pero, sobre todo, complejo y retador en la Física del estado sólido en los años por venir, como posiblemente nunca nos lo habíamos imaginado.

