

ÁTOMOS CON PROPÓSITO: REDISEÑANDO EL GRAFENO PARA LA ENERGÍA DEL FUTURO

Luis Ángel Alvarado Leal

CICFIM, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas,

Universidad Autónoma de Nuevo León

Autor de Correspondencia: luis.alvaradoll@uanl.edu.mx



RESUMEN:

¿Es posible generar energía limpia usando un solo átomo como motor? Este artículo explora cómo la nanotecnología nos permite rediseñar el grafeno, un material de carbono puro, para sustituir metales caros como el platino en las celdas de combustible. A través de simulaciones cuánticas avanzadas, hemos descubierto que no basta con elegir el metal adecuado; el secreto para controlar las reacciones químicas reside en el “vecindario” atómico y en el magnetismo de los materiales. Estos hallazgos abren una ruta para producir electricidad y desinfectantes industriales de forma más barata y sostenible, marcando un hito en el diseño racional de materiales para la energía del futuro.

Palabras clave: grafeno, energía sostenible, catalizadores de un solo átomo, reducción de oxígeno, magnetismo atómico, nanotecnología

INTRODUCCIÓN: EL CORAZÓN INVISIBLE DE LA ENERGÍA LIMPIA

En un mundo que busca desesperadamente alternativas a los combustibles fósiles, tecnologías como las celdas de combustible y las baterías de aire-metal se perfilan como las piezas clave para una transición energética real. Estos dispositivos prometen electricidad limpia, silenciosa y eficiente, teniendo como único “residuo”, agua pura. Sin embargo, detrás de esta promesa existe un obstáculo microscópico que ha frenado su llegada masiva a nuestros hogares y vehículos: la reacción de reducción de oxígeno (ORR, del inglés oxygen reduction reaction).

La ORR es el proceso químico mediante el cual el oxígeno del aire se convierte en agua, liberando la energía que hace funcionar a estos dispositivos. Pero hay un problema: esta reacción es intrínsecamente lenta y difícil de controlar. Durante décadas, hemos dependido del platino para acelerarla, pero este metal es tan costoso y escaso que hace que las celdas de combustible y las baterías de aire-metal sean prohibitivas para la mayoría. Además, la ORR tiene una “doble personalidad”: puede producir agua (el camino ideal para generar energía) o peróxido de hidrógeno (un subproducto valioso para desinfección industrial, pero ineficiente para generar electricidad).



Aquí es donde entra en juego el grafeno, una red de átomos de carbono con propiedades eléctricas asombrosas que puede servir como el “tablero de ajedrez” perfecto para rediseñar la química. La frontera actual de esta investigación son los catalizadores de un solo átomo (SACs, del inglés single atom catalysts). En lugar de usar grandes bloques de metal, la ciencia ahora busca anclar átomos metálicos individuales sobre el grafeno para que cada átomo trabaje a su máxima capacidad, reduciendo costos y aumentando la eficiencia.

Mi investigación doctoral se sumerge en este mundo atómico para resolver una

pregunta fundamental: ¿Qué hace que un átomo decida producir agua o peróxido? A través de simulaciones computacionales avanzadas, hemos descubierto que el secreto no solo está en el metal que elegimos, sino en su “vecindario” atómico y, sorprendentemente, en su magnetismo. El momento magnético del metal actúa como una brújula invisible que guía al oxígeno hacia el destino deseado, permitiéndonos “hackear” la reacción a nivel cuántico.

En las siguientes secciones, exploraremos cómo hemos aprendido a manipular estas variables para transformar el grafeno en un material con propósito, capaz de liderar la energía del futuro.

METODOLOGÍA: EL ARTE DE CALCULAR LO INVISIBLE

Para entender cómo se comportan los átomos, no utilizamos microscopios convencionales ni matraces con líquidos coloridos. En su lugar, construimos un laboratorio digital dentro de potentes supercomputadoras.

SIMULANDO LA PERFECCIÓN Y SUS DEFECTOS

Nuestra investigación se basó en una técnica llamada Teoría del Funcional de la Densidad (DFT por sus siglas del inglés density functional theory). En términos sencillos, la DFT es una herramienta matemática que nos permite dibujar un “mapa” del sitio en el que se encuentran los electrones en un material. Si conocemos este mapa, podemos predecir con una precisión asombrosa si un material será un buen catalizador antes de fabricarlo en un laboratorio real.

Para este estudio, diseñamos “tableros” de grafeno digital. El grafeno perfecto es como un panel de abejas infinitamente plano, hecho exclusivamente de átomos de carbono dispuestos en celdas hexagonales perfectas. Sin embargo, un panel perfecto es demasiado estable para reaccionar. Por ello, le creamos vacancias: agujeros estratégicos donde retiramos “celdas” de carbono del panel. En estos huecos, rodeados a veces por átomos de nitrógeno para dar estabilidad, se introdujeron átomos individuales de diferentes metales como hierro, cobalto o níquel. Así nacen los catalizadores de un solo átomo, donde cada metal queda suspendido y listo para trabajar.

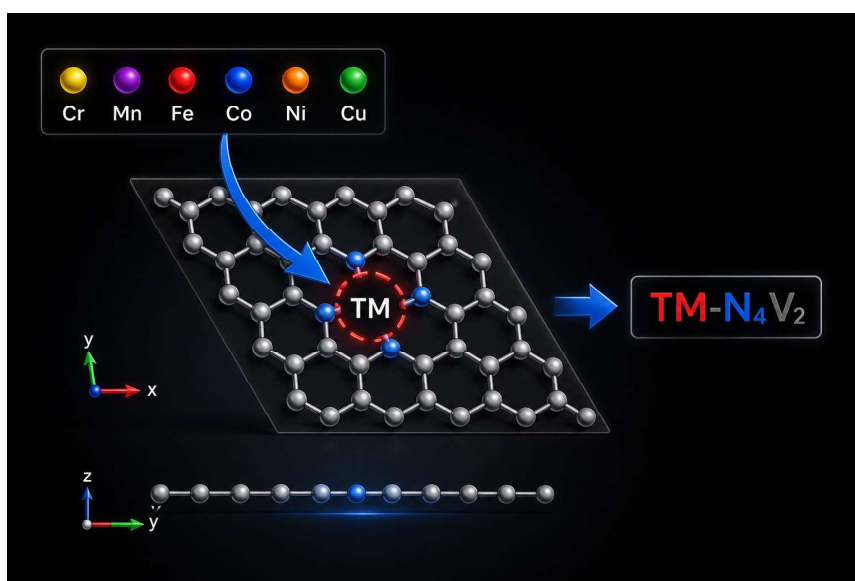


Figura 1: Representación tridimensional de un catalizador de un solo átomo. En esta estructura, un átomo metálico individual (como el hierro, mostrado en rojo) se ancla en las celdas de un “panel” de grafeno (gris) y es sostenido por 4 átomos de nitrógeno (azul). Esta disposición permite que el metal quede atrapado en el plano del grafeno, maximizando su exposición para transformar el oxígeno con eficiencia. Etiquetamos esta estructura como $\text{TM-N}_4\text{V}_2$, donde: TM representa el Metal de Transición atrapado (como los mostrados en el recuadro rojo), N4 indica los 4 átomos de nitrógeno que rodean y estabilizan al metal, V_2 hace referencia a la doble vacancia, es decir, el espacio dejado por el retiro de dos átomos de carbono del “panel” original.

Escenarios de Prueba Cuánticos

Utilizamos programas de alta precisión (como VASP y Quantum ESPRESSO) para someter a estos modelos a pruebas extremas:

VASP
Vienna Ab initio
Simulation Package

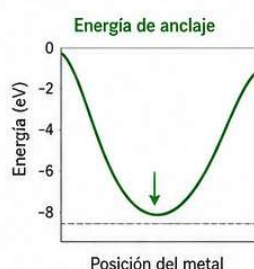
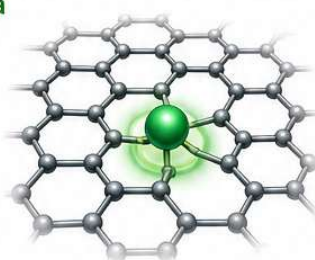
**QUANTUM
ESPRESSO**
open-source quantum
simulation software



1. Estabilidad del Sistema

Evaluamos cuánta energía se requiere para “anclar” el átomo metálico dentro de la estructura del grafeno.

Esto nos permite determinar si el material será estable o si el metal podría desplazarse, afectando su rendimiento.



Estable

El metal permanece anclado en su sitio.

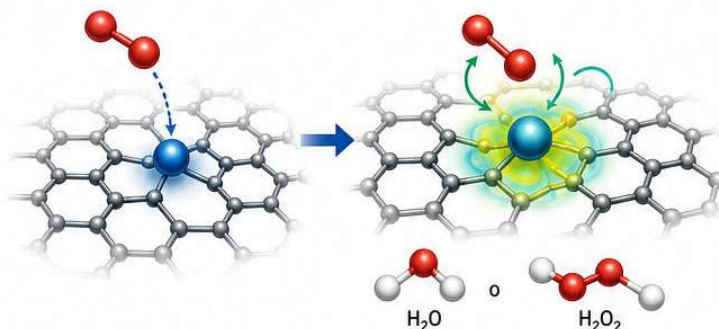
2. La Danza del Oxígeno

Simulamos cómo una molécula de oxígeno interactúa con el metal.

Analizamos:

- La fuerza de la reacción
- El flujo de electrones
- La ruptura de enlaces del oxígeno

Este proceso es clave para entender cómo se forman productos como agua o peróxido.

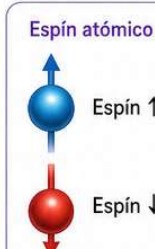
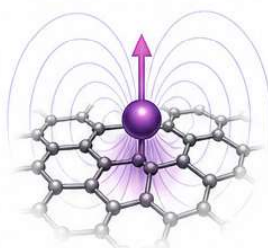


3. El Interruptor Magnético

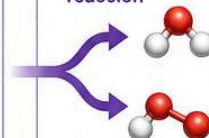
Analizamos el “espín” de los átomos, una propiedad cuántica similar a la de un pequeño imán.

Este “magnetismo invisible” influye directamente en:

- La dirección de la reacción
- La eficiencia del proceso químico



Guía invisible que decide el destino de la reacción



Resultado Final

Gracias a este enfoque, logramos:



Ejecutar miles de experimentos virtuales



Reducir significativamente tiempo y costos



Obtener una comprensión profunda de la química a escala atómica



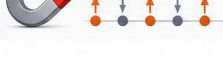
Esto nos brinda una ventaja enorme frente a los métodos experimentales tradicionales.

RESULTADOS: LOS LÍDERES DEL PANAL Y LA BRÚJULA INVISIBLE

Tras miles de horas de procesamiento en supercomputadoras, nuestro laboratorio virtual reveló cómo los átomos individuales “gobiernan” la química del oxígeno. Los resultados no solo confirmaron que podíamos sustituir al platino, sino que nos mostraron

las reglas secretas que siguen los átomos para decidir el destino de la energía. En el Cuadro 1 se resumen los resultados principales para los seis metales estudiados, destacando su comportamiento magnético y el producto final que generan.

Los Campeones de la energía limpia

Metales	Magnetismo	Producto	Eficiencia
 Hierro	 Moderado	 Agua	 Excelente (el mejor)
 Manganese	 Alto	 Agua	 Bueno
 Cobalto	 Bajo	 Agua	 Regular
 Cromo	 Muy Alto	 Agua	 Pobre
 Níquel	 Nulo	 Peróxido	 Efectivo para desinfección
 Cobre	 Inducido	 Peróxido	 Efectivo para desinfección

Cuadro 1: Comparativa de selectividad y eficiencia. Resumen de cómo la naturaleza magnética de cada átomo metálico sobre el grafeno decide si el oxígeno se reduce de forma completa para generar electricidad (camino de 4 electrones) o de forma parcial para producir peróxido de hidrógeno (camino de 2 electrones). El hierro destaca por ofrecer el equilibrio perfecto para las celdas de combustible.

Al probar diferentes metales en nuestro panal de grafeno, descubrimos que no todos los átomos actúan igual. El hierro (Fe) y el manganeso (Mn) se revelaron como los “campeones” indiscutibles para generar energía limpia. Estos metales mostraron una capacidad asombrosa para guiar al oxígeno por la ruta de los cuatro elec-

trones, produciendo agua pura y liberando la mayor cantidad de electricidad con el menor esfuerzo energético.

Por el contrario, metales como el níquel (Ni) y el cobre (Cu) mostraron una ruta más corta pero menos potente: la de los dos electrones, que produce peróxido de hidrógeno.

EL MAGNETISMO: LA BRÚJULA DEL OXÍGENO

¿Por qué el hierro produce agua y el níquel produce peróxido? La respuesta resultó ser fascinante: el magnetismo. Descubrimos que los metales con un fuerte “momento magnético” actúan como una brújula invisible que alinea al oxígeno de forma tan potente que logra estirar y romper sus enlaces químicos con facilidad.

Nuestros datos muestran una correlación directa: a mayor magnetismo en el metal, más fuerte es la atracción al oxígeno y más probable es que la reacción termine en agua pura. Esto nos permite usar el magnetismo como una herramienta de diseño para predecir el éxito de un material antes de fabricarlo.

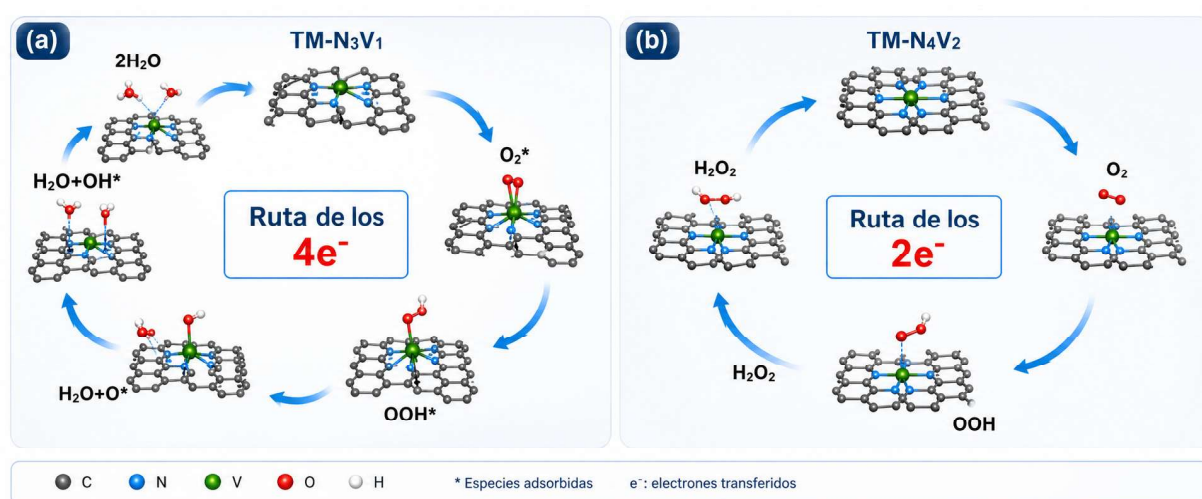


Figura 2: La reacción de reducción de oxígeno tiene dos destinos posibles: la producción de agua (ruta de 4 electrones), ideal para generar electricidad en celdas de combustible, o la producción de peróxido de hidrógeno (ruta de 2 electrones), un potente desinfectante industrial. El diseño atómico decide qué camino tomar.

CAMBIANDO EL VECINDARIO: EL EFECTO TOPE

Uno de los hallazgos más sorprendentes ocurrió al modificar el entorno del metal. Normalmente, el metal se asienta de forma plana dentro de la red del grafeno. Sin embargo, al reducir el tamaño del agujero en el panel (pasando de un entorno N₄V₂ a uno N₃V₁), el átomo metálico ya no cabe y sobresale de la superficie, formando una pequeña prominencia o tope atómico. Esta nueva ubicación lo deja mucho más expuesto y altera drásticamente su reactividad, permitiendo que el metal interactúe

con el oxígeno de una forma mucho más agresiva y eficiente.

Este cambio de posición modificó el comportamiento de los metales. Metales que antes eran mediocres, como el cobre, se volvieron extremadamente activos al quedar más expuestos, cambiando su decisión química para empezar a producir agua en lugar de peróxido. Esto demuestra que, a nivel de los átomos, la ubicación lo es todo.

EL REY DEL VOLCÁN

Para resumir todo el potencial de nuestros catalizadores, creamos un gráfico que en ingeniería llamamos “Curva de volcán”. En la cima de esta montaña, en el punto de equilibrio perfecto donde la reacción fluye con la máxima eficiencia, encontramos al hierro. Este resultado posiciona a los catalizadores de un solo átomo de hierro sobre grafeno como los herederos legítimos del trono que hoy ocupa el costoso platino.

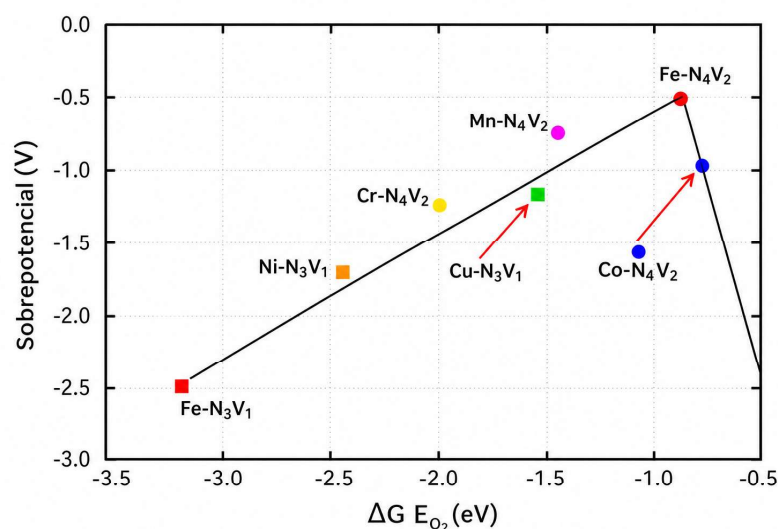


Figura 3: La curva del volcán es la brújula de la catálisis. En la base se encuentran los materiales demasiado débiles o demasiado fuertes para procesar el oxígeno; en la cima de la montaña, donde se alcanza el equilibrio perfecto de energía, se sitúa el hierro, consolidándose como el sustituto ideal del platino.

CONCLUSIONES: EL DISEÑO DE UN FUTURO SOSTENIBLE

Nuestra investigación ha demostrado que el camino hacia la energía limpia no solo depende de grandes infraestructuras, sino de nuestra capacidad para comprender y manipular la materia en su escala más fundamental: átomo por átomo. A través de este viaje por el laboratorio virtual, hemos alcanzado tres conclusiones clave que podrían cambiar las reglas del juego en la ciencia de materiales:

1. La ingeniería del vecindario es vital: No basta con elegir el metal adecuado. Hemos comprobado que el entorno del grafeno —si el átomo metálico se asienta en un agujero grande (V2) o pequeño (V1)— altera drásticamente su eficiencia. Un metal que parecía “mediocre” en una superficie plana puede convertirse en una estrella catalítica si logramos que sobresalga de la red como un pequeño tope cuántico, atrayendo con más fuerza al oxígeno.

2. El magnetismo es la brújula cuántica: Hemos descubierto que el “espín” o magnetismo de los metales es un factor decisivo. Metales con un fuerte momento magnético, como el hierro y el manganeso, actúan como imanes que guían a la molécula de oxígeno para que se rompa de la forma adecuada, garantizando la producción de agua pura y maximizando la energía obtenida.
3. El fin de la era del platino: Los resultados sitúan a los catalizadores de un solo átomo de hierro sobre grafeno nitrogenado como los herederos legítimos del costoso platino. Este hallazgo abre la puerta a celdas de combustible mucho más baratas y a una producción de peróxido de hidrógeno más eficiente para limpiar nuestras aguas.

En definitiva, hemos pasado de una química de “ensayo y error” a un diseño racional de materiales. El uso de supercomputadoras y teorías cuánticas avanzadas (DFT) nos permite ahora dibujar el mapa de la energía del futuro antes de poner un solo pie en el laboratorio físico.

AGRADECIMIENTOS

El autor agradece a la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL) y a la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas (FCFM), así como al Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM, por el apoyo académico y las facilidades brindadas. Asimismo, reconoce el financiamiento de la DGAPA-UNAM (proyectos IN102725 e IN116725), del Programa Conjunto de Colaboración de Investigación Sistema UI/UNAM y del Centro de Supercómputo de la DGCTIC-UNAM (LANCAD-UNAM-DGTIC-051 y 382). Finalmente, agradece la dirección y asesoramiento de los doctores Héctor Noé Fernández Escamilla y Noboru Takeuchi Tan, así como la colaboración de su comité de tesis y coautores.

REFERENCIAS

- (1) Alvarado-Leal, L. A., et al. (2024). “Influence of the Atomic Local Environment on the ORR Activity of Single-Atom Catalysts in N-Doped Graphene”. ACS Applied Energy Materials.
- (2) Alvarado-Leal, L. A., et al. (2025). “DFT Study of Oxygen Adsorption by Single-Atom Catalysts on N-Doped Graphene: Implications for Oxygen Reduction Reactions”. ACS Applied Nano Materials.
- (3) Nørskov, J. K., et al. (2004). “Origin of the Overpotential for Oxygen Reduction at a Fuel-Cell Cathode”. The Journal of Physical Chemistry B.
- (4) Novoselov, K. S., et al. (2004). “Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films”. Science.
- (5) Alvarado-Leal, L. A., et al. (2024). “Exploring nitrogen-mediated effects on Fe and Cu cluster development in graphene: a DFT study”. Nanoscale.