







Propiedades electrónicas y estructurales de  $\text{Sc}_2\text{C}$ ,  $\text{Y}_2\text{C}$  y su heteroestructura mediante simulaciones DFT con SIESTA  
Electronic and Structural Properties of  $\text{Sc}_2\text{C}$ ,  $\text{Y}_2\text{C}$ , and Their Heterostructure via DFT Simulations with SIESTA

F. A. Espinosa-Reyes <sup>a,b</sup>, R. Flores Cruz <sup>a</sup>, K.A. Martínez-Legaria <sup>a,c</sup>, L. S. Villaseñor-Cerón <sup>a</sup>, H. Gómez Pozos <sup>d</sup>  
V. Rodríguez Lugo <sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Mineral de la Reforma Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5, 42184. Hidalgo, México.

<sup>b</sup> Escuela Superior de Apan, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Apan-Calpulalpan s/n, Colonia, 43920 Chimalpa Tlalayote, Hgo.

<sup>c</sup> Academia de Nanotecnología, División de Proceso Industriales, Universidad Tecnológica de Tecámac, Carretera Federal México -Pachuca Km 37.5, CP55740, Estado de México, México.

<sup>d</sup> Área Académica de Computación y Electrónica, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Mineral de la Reforma Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5, 42184. Hidalgo, México.

## Resumen

El compuesto  $\text{Sc}_2\text{C}$  es un electruro (electride, en inglés) que, al disponerse en dos dimensiones y combinarse con un MXene, adquiere propiedades únicas. Por su parte,  $\text{Y}_2\text{C}$  es un material que exhibe una amplia variedad de propiedades físicas y electrónicas de gran interés. En el presente trabajo se estudia la interacción entre ambos compuestos dentro de una celda trigonal (hexagonal), dando lugar a una estructura unida principalmente por fuerzas de van der Waals. Mediante simulaciones de primeros principios, se analizan las propiedades electrónicas emergentes de esta combinación, ajustando diversos parámetros estructurales para obtener una configuración estable. Como resultado, se construye una heteroestructura de ambos materiales, cuyas características electrónicas pueden ofrecer potencial para aplicaciones en dispositivos electrónicos basados en materiales bidimensionales.

**Palabras Clave:** Electruro, MXene, van der Waals Heteroestructura,  $\text{Sc}_2\text{C}$ ,  $\text{Y}_2\text{C}$ .

## Abstract

The compound  $\text{Sc}_2\text{C}$  is an electride, which, when arranged in two dimensions and combined with a MXene, exhibits unique properties. On the other hand,  $\text{Y}_2\text{C}$  is a material that also displays a wide range of interesting physical and electronic properties. In this work, the interaction between these two compounds is investigated within a trigonal (hexagonal) cell, resulting in a structure primarily held together by van der Waals forces. Using first-principles simulations, the emergent electronic properties of this combination are analyzed by tuning various structural parameters to achieve a stable configuration. As a result, a heterostructure of the two materials is obtained, whose electronic characteristics may offer potential for applications in electronic devices based on two-dimensional materials.

**Keywords:** Electride, MXene, van der Waals, Heterostructure,  $\text{Sc}_2\text{C}$ ,  $\text{Y}_2\text{C}$ .

## 1. Introducción

En los últimos años, los electruros han recibido una atención creciente debido a sus propiedades electrónicas inusuales. Estos materiales se caracterizan por la presencia de electrones no ligados a núcleos atómicos específicos, que

actúan como aniones localizados en vacíos intersticiales dentro de la red cristalina (Zhou, 2024). Este tipo de configuración electrónica ha permitido descubrir propiedades emergentes en diversos compuestos, como el carburo de escandio ( $\text{Sc}_2\text{C}$ ) y el carburo de itrio ( $\text{Y}_2\text{C}$ ), los cuales han sido identificados como posibles electruro en estructuras bidimensionales. (Zhou, You, Zhao, Feng, & Shen, 2024).

\*Autor para la correspondencia: venturar@uaeh.edu.mx

**Correo electrónico:** es423025@uaeh.edu.mx (Fausto Alejandro-Espinosa Reyes), fl335558@uaeh.edu.mx (Rommel Flores Cruz), kevm12411@gmail.com (Kevin Alejandro Martínez Legaria), leslysabina@gmail.com (Lesly Sabina Villaseñor Cerón), gpzos@uaeh.edu.mx (Heberto Gómez Pozos), venturar@uaeh.edu.mx (Ventura Rodríguez-Lugo)

**Historial del manuscrito:** recibido el 04/09/2025, última versión-revisada recibida el 31/10/2025, aceptado el 31/10/2025, publicado el 12/12/2025. DOI: <https://doi.org/10.29057/icbi.v13iEspecial4.15921>



Una de las características más destacadas de los electruros es su capacidad para formar heteroestructuras unidas mediante fuerzas de Van der Waals, lo que puede dar lugar a una serie de propiedades funcionales únicas (McRae et al., 2021). Entre ellas se incluyen el ferromagnetismo, la superconductividad, las propiedades topológicas no triviales y la aparición de plasmones de Dirac, todas de gran interés en el desarrollo de materiales avanzados para aplicaciones electrónicas y espintrónicas. (Yu, Li, Hosono, & Wang, 2025). Estudios computacionales han revelado que los electruros presentan una baja electronegatividad catiónica, lo que favorece una mayor hibridación entre los orbitales metálicos y los estados intersticiales de tipo electruro. Esta hibridación contribuye a la apertura del gap de energía en la estructura electrónica del material (McRae et al., 2022; Tojigamori, et al., 2024). En particular, el compuesto  $\text{Y}_2\text{C}$  ha sido reportado como un electruro bidimensional con comportamiento magnético inducido por los electrones intersticiales. Según Inoshita et al., el  $\text{Y}_2\text{C}$  es uno de los pocos electruros 2D que exhibe magnetismo, atribuible principalmente a los electrones localizados en las regiones interlaminares (Modi, et al., 2023; Modi, et al., 2024). No obstante, su momento magnético es bajo ( $0.33 \mu_B$  por celda), lo cual limita su aplicabilidad en tecnologías donde se requieren altos valores de magnetización. (Dale & Johnson, 2018; Thanasarnsurapong, et al., 2024).

En 2024, Shakil et al., estudiaron mediante cálculos DFT al sistema  $\text{Sc}_2\text{C}$  prístino, el cual tiene un carácter metálico, lo que se confirma en la estructura de bandas por la superposición entre la banda de valencia y la banda de conducción, y por ende, en la densidad de estados (DOS), en donde se observan valores finitos alrededor del nivel de Fermi dominados por electrones Sc-d. Tras la funcionalización con grupos O, -OH y -F, algunas configuraciones (como  $\text{Sc}_2\text{CO-G}_3$ ,  $\text{Sc}_2\text{CO-G}_4$ ,  $\text{Sc}_2\text{COH-G}_3$ ,  $\text{Sc}_2\text{COH-G}_4$  y  $\text{Sc}_2\text{CF-G}_4$ ) dejan de ser metálicas, volviéndose semiconductores indirectos, con bandas prohibidas de energía de: 0.318 eV, 1.404 eV, 0.974 eV, 1.732 eV y 1.07 eV, respectivamente. La DOS refuerza estos resultados, ya que muestra cambios alrededor del nivel de Fermi dependiendo tanto del grupo funcional como del número de átomos añadidos, clasificando así a las configuraciones entre conductoras y semiconductoras. En los casos semiconductores, la DOS se reduce cerca de  $E_f$ , indicando la apertura de la banda prohibida, mientras que en las metálicas se mantiene la presencia de estados en esa región.

Por otro lado, los MXenes fueron descubiertos por primera vez en 2011, y entre ellos se encuentran  $\text{Sc}_2\text{C}$  y  $\text{Y}_2\text{C}$ , los cuales son una clase de materiales bidimensionales que consisten en carburos, nitruros o carbonitruros de metales de transición, cuya fórmula general está conformada por un metal de transición temprana (M), un elemento del grupo principal, el cual a menudo es del grupo 13 y 14 (A) y la presencia de Carbono o nitrógeno con un valor específico de  $n$  como 1, 2, 3, 4 ( $\text{Mn}^{+1}\text{AX}_n$ ) (Hong, Klie, & Ögüt, 2016; Zhang, et al., 2024). La fórmula para los MXenes es  $\text{Mn}^{+1}\text{X}_n$ , donde M representa el metal de transición y X representa C, N o CN. (Khan et al., 2024). Los MXenes han ganado notoriedad en los últimos años, ya que su estructura laminar, combinada con su alta conductividad y superficie funcionalizable, los convierte en materiales versátiles con aplicaciones en baterías,

supercapacitores, almacenamiento de hidrógeno, sensores, catalizadores, entre otros. (Yin, Li, & Cui, 2023; Shakil, 2024).

En este trabajo se analiza la heteroestructura formada entre  $\text{Sc}_2\text{C}$  y  $\text{Y}_2\text{C}$ , haciendo uso de simulaciones de primeros principios mediante el software SIESTA. El objetivo principal es explorar las propiedades electrónicas, estructurales y magnéticas de la heteroestructura, considerando las fuerzas Van der Waals que gobiernan su estabilidad y comportamiento cuántico. Este estudio busca aportar información relevante para el diseño racional de nuevos electruros<sup>4</sup> bidimensionales con funcionalidades mejoradas para aplicaciones tecnológicas. (Roszak & Balasubramanian, 1998).

## 2. Metodología Computacional

Para el presente estudio se empleó el programa computacional SIESTA 4.1-b4 con el propósito de determinar las propiedades electrónicas de los compuestos  $\text{Sc}_2\text{C}$  y  $\text{Y}_2\text{C}$ . En primera instancia, se llevó a cabo la optimización de la energía de corte, variando distintos valores del parámetro  $R_y$  en el intervalo de 300 a 500 Ry, con incrementos de 50 Ry, donde se seleccionó una energía de 450 Ry. En todos los casos se utilizó el funcional de Aproximación de Gradiente Generalizado (GGA) junto con el funcional de intercambio-correlación Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE). Posteriormente, se seleccionó el sistema con la menor energía obtenida para realizar la optimización de las mallas  $k$ . La malla inicial sustituida por diferentes configuraciones:  $3 \times 3 \times 1$ ,  $5 \times 5 \times 1$ ,  $7 \times 7 \times 1$ ,  $9 \times 9 \times 1$  y  $11 \times 11 \times 1$ , se seleccionó una malla de  $9 \times 9 \times 1$ . Los criterios de convergencia aplicados durante la etapa del relajamiento estructural fueron el algoritmo de gradiente conjugado (CG) con una tolerancia mínima de  $1 \times 10^{-7}$ , un desplazamiento máximo de  $0.05 \text{ \AA}$  y una tolerancia energética de  $0.001 \text{ eV/\AA}$ . Finalmente, se calculó la estructura de bandas a lo largo de la ruta de la primera zona de Brillouin  $\Gamma\text{--M--K--}\Gamma$ . Para la generación de las funciones de base se utilizó el parámetro Split Norm con un valor de 0.18 en el material  $\text{Y}_2\text{C}$  y en la bicapa  $\text{Sc}_2\text{C--Y}_2\text{C}$ , mientras que en  $\text{Sc}_2\text{C}$  se empleó un valor de 0.16, optimizando la calidad de las bases de acuerdo con las características electrónicas de cada sistema.

Para la simulación de la heteroestructura se realizó con las mismas características sin ninguna modificación usando GGA-PBE estándar.

## 3. Resultados

### 3.1 Propiedades estructurales

La Tabla 1 muestra las distancias de enlace obtenidas tras la relajación estructural de los tres sistemas estudiados. La primera columna indica las especies atómicas enlazadas, mientras que las columnas siguientes presentan las longitudes de enlace antes y después de la relajación. Los análisis se realizaron de manera independiente para cada material utilizando SIESTA para obtener las estructuras de banda. Durante la relajación, los parámetros de red y las coordenadas atómicas se ajustaron para alcanzar la configuración de mínima energía, lo que provocó cambios en las distancias de enlace respecto a los valores iniciales.

Se observa que, tras la relajación estructural, las distancias de enlace en el sistema  $\text{Sc}_2\text{C}$  presentan una ligera disminución en comparación con los valores originales. En particular, los enlaces  $\text{C}_1\text{--C}_1$  y  $\text{Sc}_1\text{--Sc}_2$  reducen su longitud, indicando un

reacomodo atómico que tiende a compactar la estructura y mejorar la estabilidad del sistema. Este comportamiento sugiere una mayor interacción entre los átomos vecinos y una redistribución de las cargas electrónicas, lo cual es consistente con la búsqueda de la configuración de mínima energía durante la relajación. Además, las distancias finales entre los distintos pares atómicos muestran una simetría coherente con la naturaleza del compuesto, evidenciando que el proceso de relajación fue exitoso y que el sistema alcanzó un estado estable.<sup>6</sup>

Tabla 1: Distancias de enlace (en Å) entre las distintas especies atómicas de los materiales antes y después de la relajación estructural.

<b>Sc<sub>2</sub>C</b>			
Tipo de átomo	Original	Relajado	
Sc <sub>1</sub> – C <sub>1</sub>	2.283 Å	2.23 Å	
Sc <sub>1</sub> – Sc <sub>2</sub>	3.122 Å	3.058 Å	
<b>Y<sub>2</sub>C</b>			
Y <sub>1</sub> – C <sub>1</sub>	2.283 Å	2.23 Å	
Y <sub>1</sub> – Y <sub>2</sub>	3.122 Å	3.058 Å	
<b>Y<sub>2</sub>C-Sc<sub>2</sub>C</b>			
Tipo de átomo	Distancia		
Sc <sub>2</sub> – C <sub>2</sub>	2.483 Å		
Sc <sub>1</sub> – C <sub>2</sub>	2.483 Å		
Sc <sub>1</sub> – Y <sub>2</sub>	4.021 Å		
C <sub>1</sub> – Y <sub>2</sub>	2.484 Å		
C <sub>1</sub> – Y <sub>1</sub>	2.484 Å		

heteroestructura se resumen a continuación. Para el material Sc<sub>2</sub>C de una sola capa, las longitudes de enlace entre los átomos de escandio y carbono son idénticas para ambos átomos de Sc: Sc<sub>1</sub>–C<sub>1</sub> = 2.283 Å y Sc<sub>2</sub>–C<sub>1</sub> = 2.283 Å. La distancia entre los átomos de escandio, Sc<sub>1</sub>–Sc<sub>2</sub>, es de 3.122 Å, indicando que no existe un enlace directo entre ellos.

Las distancias calculadas son: Sc<sub>2</sub>–C<sub>2</sub> = 2.483 Å, Sc<sub>1</sub>–C<sub>2</sub> = 2.483 Å, Sc<sub>1</sub>–Y<sub>2</sub> = 4.021 Å, C<sub>1</sub>–Y<sub>2</sub> = 2.484 Å y C<sub>1</sub>–Y<sub>1</sub> = 2.484 Å. Se observa que los enlaces entre Sc y C presentan valores idénticos, al igual que los enlaces C–Y, lo que indica simetría y uniformidad en estas interacciones dentro de la estructura. Por otro lado, la distancia mayor entre Sc<sub>1</sub> e Y<sub>2</sub> (4.021 Å) sugiere una interacción más débil entre estos átomos en comparación con los enlaces más cortos. En conjunto, los resultados muestran un patrón estructural consistente, donde los enlaces fuertes mantienen la estabilidad del sistema mientras que los enlaces más largos reflejan interacciones menos significativas. Todo esto se representa gráficamente en la Figura 1.

En la tabla 2 se resumen todos los valores correspondientes a la celda unitaria de cada sistema. Los parámetros de red muestran que para Y<sub>2</sub>C, los valores de a y b son ambos 3.62027 Å, mientras que en Sc<sub>2</sub>C disminuyen a 3.33284 Å, evidenciando una reducción en las dimensiones de la celda. En el sistema combinado Sc<sub>2</sub>C–Y<sub>2</sub>C, los parámetros a y b vuelven a coincidir con los de Y<sub>2</sub>C, 3.62027 Å, indicando que las dimensiones se mantienen iguales a las de Y<sub>2</sub>C.

Los ángulos  $\alpha$  y  $\beta$  permanecen en 90.00° en todos los casos, mostrando que la geometría angular de la red no se modifica al combinar los materiales. Las únicas diferencias se observan en los valores de a y b entre Y<sub>2</sub>C y Sc<sub>2</sub>C, mientras que el sistema combinado conserva los valores de Y<sub>2</sub>C, y los parámetros c,  $\alpha$

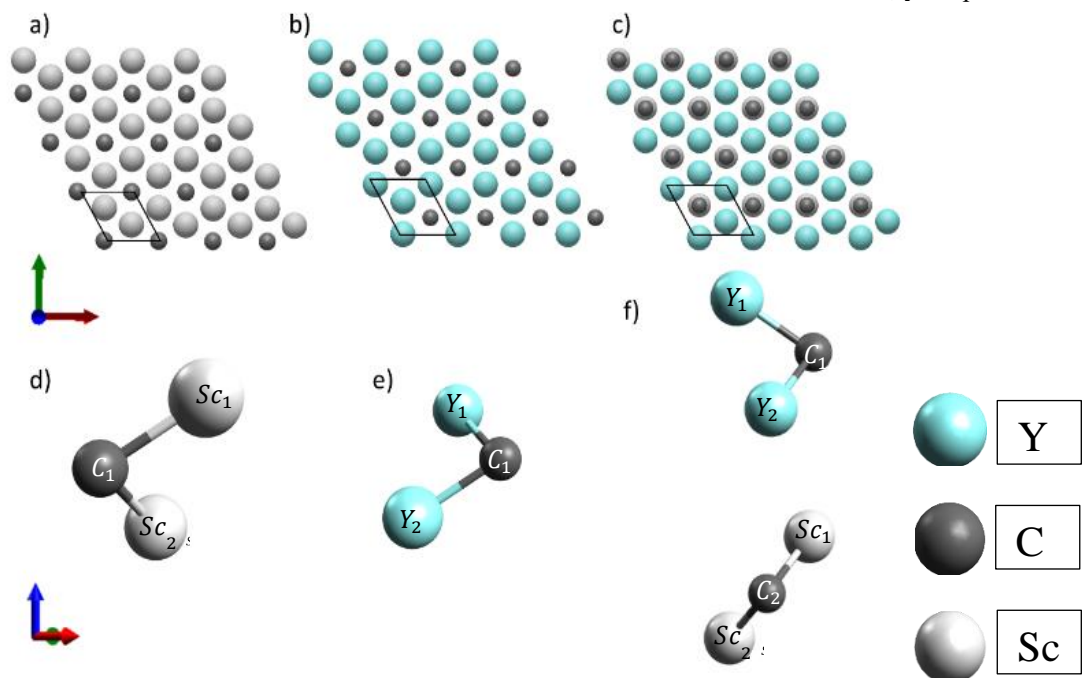


Figura 1. Perspectiva de materiales visto desde arriba en una capa con su respectiva celda unitaria en un mismo ángulo de visión de a) Sc<sub>2</sub>C, b) Y<sub>2</sub>C, c) Material Bicapa Sc<sub>2</sub>C–Y<sub>2</sub>C. Incluye igualmente las celdas unitarias de cada material vistas desde un mismo ángulo, siendo d) Sc<sub>2</sub>C, e) Y<sub>2</sub>C, f) Material Bicapa Sc<sub>2</sub>C–Y<sub>2</sub>C.

Los resultados de las distancias de enlace obtenidas tras la relajación estructural de los sistemas de una sola capa y de la

y  $\beta$  permanecen inalterados en todos los sistemas.

Tabla 2. Parámetros de red (a, b, c y ángulos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ) de los compuestos  $Y_2C$ ,  $Sc_2C$  y su heteroestructura  $Sc_2C-Y_2C$ , obtenidos a partir de la optimización estructural. La tabla permite comparar las diferencias geométricas entre los sistemas individuales y la heteroestructura.

Parámetros de red	$Y_2C$	$Sc_2C$	$Sc_2C - Y_2C$
a (Å)	3.62027	3.33284	3.62027
b (Å)	3.62027	3.33284	3.62027
c (Å)	25.00000	25.00000	25.00000
$\alpha$	90.0002	89.9981	90.0002
$\beta$	90.0002	90.0019	90.0002
$\gamma$	119.9995	120.00000	119.9984

También se calculó la energía de cohesión considerando las energías totales de los átomos individuales y de los sólidos correspondientes. Las energías totales de los átomos muestran diferencias importantes entre los elementos: el átomo de carbono presenta la energía más negativa con -152.13094 eV, el átomo de escandio tiene -42.16693 eV y el átomo de itrio

tiene -37.24600 eV. Estas energías atómicas se emplean como referencia para determinar la energía cohesiva de cada material, tomando en cuenta la contribución de cada tipo de átomo en la estructura del sólido.

En los sistemas analizados, la energía total calculada para  $Sc_2C$  es de -250.95270 eV para los tres átomos, mientras que  $Y_2C$  presenta una energía total de -279.41933 eV, también considerando tres átomos. La heteroestructura que combina ambos compuestos exhibe una energía total de -532.23327 eV para seis átomos. A partir de estas energías, junto con las energías atómicas individuales, se calcularon las energías cohesivas correspondientes, obteniéndose valores de 4.83 eV/átomo para  $Sc_2C$ , 17.60 eV/átomo para  $Y_2C$  y 11.52 eV/átomo para la heteroestructura.

### 3.2 Propiedades electrónicas

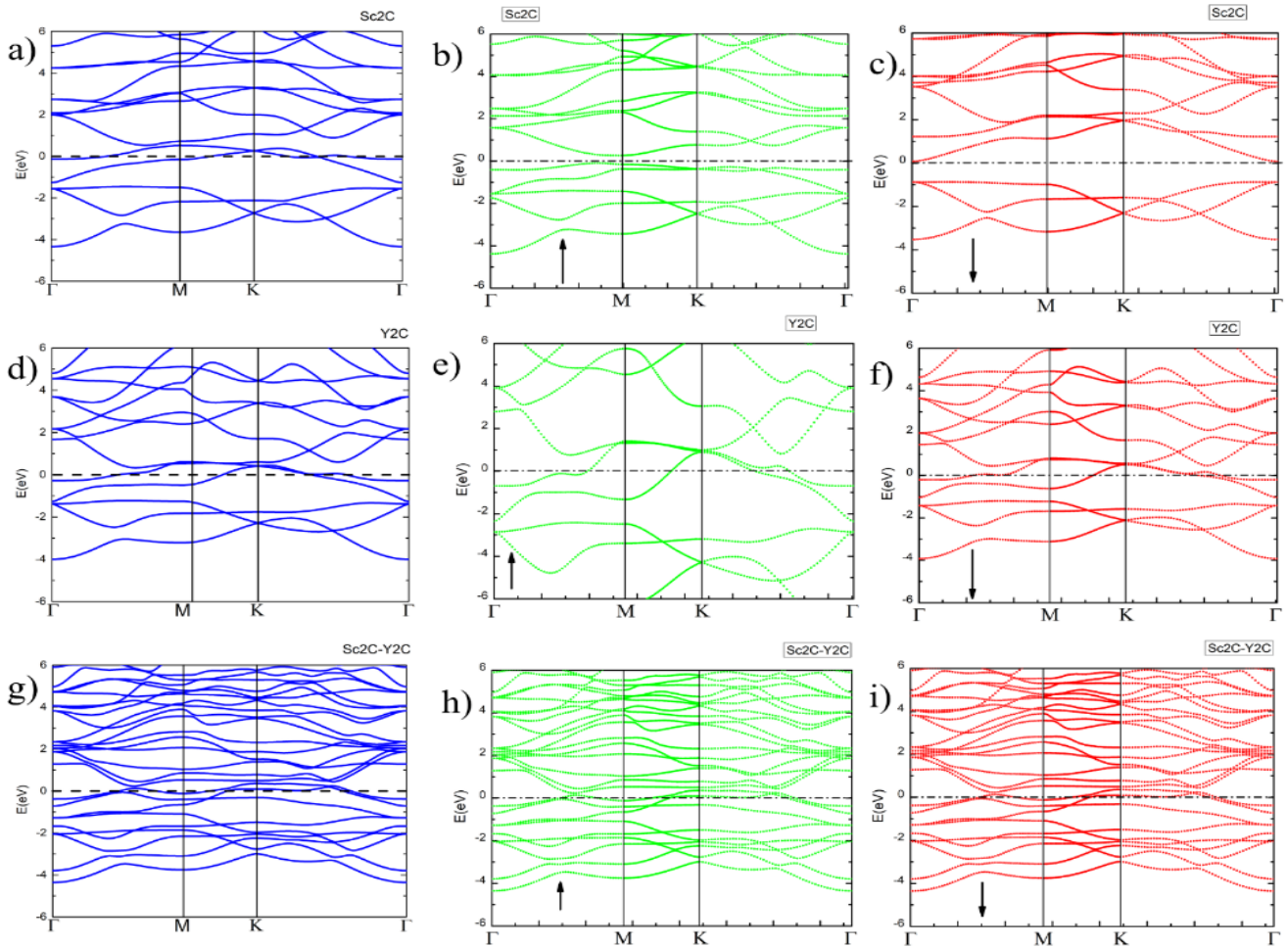


Figura 2. Estructuras de bandas electrónicas (total, espín arriba y espín abajo) de  $Sc_2C$ ,  $Y_2C$  y su heteroestructura  $Sc_2C-Y_2C$ .

En la Figura 2 se presentan las estructuras de bandas calculadas para los tres sistemas estudiados, mostrando la distribución de los estados electrónicos en cada material. Cada fila corresponde a un sistema diferente: la primera fila (a–c) representa  $Sc_2C$ , la segunda fila (d–f) corresponde a  $Y_2C$ , y la

tercera fila (g–i) a la heteroestructura formada por la combinación de ambos. En cada caso, las gráficas de la izquierda (a, d, g) muestran la estructura de bandas total, mientras que las gráficas del centro (b, e, h) y de la derecha (c, f, i) presentan las proyecciones de los estados electrónicos en

*espín arriba*<sup>5</sup> y *espín abajo*<sup>5</sup>, respectivamente, permitiendo identificar posibles diferencias en la contribución de cada spin a las bandas.

En todos los gráficos, el eje vertical indica la energía (E) en electronvoltios (eV), mientras que el eje horizontal recorre los puntos de alta simetría  $\Gamma$ , M, K y nuevamente  $\Gamma$  en la zona de Brillouin. La línea discontinua negra señala el nivel de Fermi ( $E_F = 0$  eV), que sirve como referencia para distinguir las bandas de conducción y valencia y evaluar la presencia de brechas de energía o características semimetálicas. La comparación de estas estructuras evidencia cómo la heteroestructura combina las propiedades electrónicas de  $\text{Sc}_2\text{C}$  y  $\text{Y}_2\text{C}$ , reflejando la interacción entre los diferentes componentes a nivel de bandas. Puede observarse que todos los sistemas presentan un comportamiento metálico, evidente por la superposición de las bandas de valencia y conducción, las cuales cruzan el nivel de Fermi en todos los casos. Para los sistemas  $\text{Sc}_2\text{C}$  y  $\text{Y}_2\text{C}$ , existe continuidad en los estados de energía mostrados en los gráficos desde aproximadamente -4 eV hasta 6 eV. Por su parte, la heteroestructura formada por ambos materiales presenta un mayor número de bandas en el gráfico, lo cual es esperado debido a la inclusión de más

átomos en el sistema; sin embargo, el comportamiento general se mantiene, y las bandas aparecen en un intervalo de -4 eV a 6 eV sin discontinuidades, confirmando que el carácter metálico persiste incluso al incrementar el número de capas.

En la segunda columna de la Figura 2 (b, e, h) se muestran las bandas correspondientes al *espín arriba*. En este caso se observan mayores discrepancias entre los sistemas. Para  $\text{Sc}_2\text{C}$ , el comportamiento metálico se mantiene en el mismo intervalo de energías, pero ninguna banda logra sobrepasar el nivel de Fermi y se observa un gap en el punto de alta simetría M. Para  $\text{Y}_2\text{C}$ , las bandas están más dispersas y el gap previamente evidente desde -4 eV desaparece, manteniendo todas las bandas un carácter metálico. La heteroestructura no presenta diferencias notables respecto a su comportamiento global. Por último, las bandas correspondientes al *espín abajo* de la Figura 2 (c, f, i) muestran que  $\text{Sc}_2\text{C}$  presenta un gap significativo, y el nivel de Fermi se aproxima más a las bandas de conducción.  $\text{Y}_2\text{C}$  conserva su carácter metálico también en este caso, mientras que la heteroestructura mantiene un comportamiento similar al observado en los otros gráficos de spin, sin cambios relevantes en el intervalo de energías. la heteroestructura también permanece invariante.

#### 4. Discusión

El análisis conjunto de las distancias de enlace y los parámetros de red revela información relevante sobre la estabilidad y la simetría de los sistemas estudiados. En la Tabla 1 se observa que, tras el relajamiento estructural, el Carburo de Escandio ( $\text{Sc}_2\text{C}$ ) experimenta una reducción significativa en las distancias de enlace, manteniendo, no obstante, un carácter equidistante tomando el carbono como referencia. Esto refleja una alta simetría y estabilidad intrínseca del material. De manera similar, el Carburo de Itrio ( $\text{Y}_2\text{C}$ ) presenta una contracción notable en sus enlaces, evidenciando un ajuste natural de la red cristalina hacia una configuración energéticamente más favorable. La similitud estructural entre ambos carburos sugiere que la formación de una heteroestructura  $\text{Sc}_2\text{C}-\text{Y}_2\text{C}$  mediante fuerzas de Van der Waals<sup>4</sup> es físicamente viable, dado que ambos sistemas mantienen distancias de enlace comparables y conservan la integridad de sus estructuras internas.

La energía de cohesión representa la cantidad de energía que se libera cuando los átomos se unen para formar un sólido a partir de átomos aislados. Valores más altos de energía de cohesión indican enlaces más fuertes y una estructura más estable, mientras que valores menores sugieren enlaces más débiles. En los sistemas analizados,  $\text{Y}_2\text{C}$  presenta la mayor energía de cohesión (17.60 eV/átomo), lo que sugiere que sus enlaces Y-C son más fuertes y que la celda unitaria es altamente estable. Por su parte,  $\text{Sc}_2\text{C}$  muestra un valor menor (4.83 eV/átomo), indicando que los enlaces Sc-C son más débiles y que su estructura es menos favorable energéticamente, aunque sigue manteniendo la simetría en la red.

La heteroestructura  $\text{Sc}_2\text{C}-\text{Y}_2\text{C}$ , con una energía de cohesión intermedia de 11.52 eV/átomo, refleja que la combinación de ambas capas es energéticamente favorable, conservando

estabilidad sin alcanzar la máxima cohesión de  $\text{Y}_2\text{C}$ . Este valor intermedio indica que las fuerzas entre capas son principalmente de Van der Waals, suficientes para mantener la integridad estructural sin generar tensiones significativas. En conjunto, estas energías confirman que la heteroestructura es un sistema estable y viable, que combina de manera equilibrada las propiedades de ambos carburos, y proporciona un marco sólido para entender su comportamiento estructural y sus posibles aplicaciones en dispositivos electrónicos y magnéticos. En el análisis magnético de la heteroestructura se observó la presencia de una ligera polarización de espín asociada principalmente a los átomos en la interfase, lo cual indica que el acoplamiento entre las capas induce un comportamiento magnético débil pero no despreciable. Este resultado sugiere que las propiedades magnéticas emergen del ensamblaje de las capas y no de un solo componente, reflejando el efecto combinado de las interacciones electrónicas en la heteroestructura.

Las bandas electrónicas revelan que todos los sistemas presentan un comportamiento metálico, evidenciado por la superposición de las bandas de valencia y conducción alrededor del nivel de Fermi. En  $\text{Sc}_2\text{C}$ , aunque se observan pequeños gaps parciales para ciertos puntos de alta simetría en los estados de *espín arriba*, la densidad de bandas cercanas al nivel de Fermi permite una buena conductividad. Por su parte,  $\text{Y}_2\text{C}$  mantiene su carácter metálico de manera más uniforme, con bandas altamente dispersas que cruzan el nivel de Fermi en todos los puntos, indicando una mayor densidad de estados y estabilidad electrónica. La heteroestructura  $\text{Sc}_2\text{C}-\text{Y}_2\text{C}$  combina las bandas de ambos sistemas, mostrando un aumento en el número de bandas cerca del Fermi y una ligera hibridación orbital, lo que sugiere que la interacción entre capas genera propiedades electrónicas integradas y complejas, sin comprometer la naturaleza metálica del material.

<sup>3</sup>Tanto el Y<sub>2</sub>C como el Sc<sub>2</sub>C han sido previamente investigados mediante estudios teóricos que incluyen modificaciones individuales a través de la inducción de defectos, como vacantes, así como mediante la formación de heteroestructuras. Por ejemplo, en el trabajo de Nazir et al. (2025), se funcionalizó el material Sc<sub>2</sub>C con átomos de F en sistemas cristalinos con y sin vacantes, demostrando que esta modificación permite la apertura de la banda prohibida, transformando su comportamiento de metálico a semiconductor. De acuerdo con sus resultados, el sistema con una vacante de carbono, Sc<sub>2</sub>C-V<sub>c</sub>, presentó la banda prohibida de menor valor, de 0.02 eV. Este efecto fue más notable en el sistema con vacantes y funcionalización combinada, Sc<sub>2</sub>CF<sub>0.25</sub>O<sub>0.25</sub>(OH)<sub>0.5</sub>-V<sub>c</sub>, donde la banda prohibida calculada mediante la aproximación GGA-PBE fue de 0.21 eV.

Así mismo, se ha demostrado que el Sc<sub>2</sub>C puro y funcionalizado Sc<sub>2</sub>CF<sub>2</sub> presentan energías favorables de adsorción para átomos de Mg, Ca y Zn, con valores de -0.97, -1.14 y -0.91 eV para el Sc<sub>2</sub>C, y de -0.67, -1.02 y -0.42 eV para el Sc<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>, respectivamente. En todos los casos, los sistemas mantuvieron su comportamiento conductor (Chowdhury et al., 2025; Kolavada et al., 2025).

De manera análoga, se han reportado heteroestructuras similares a la propuesta en el presente trabajo, como la de WS<sub>2</sub>/Sc<sub>2</sub>C, en la cual se combinaron dos materiales con diferente comportamiento electrónico. El sistema WS<sub>2</sub> presenta un gap de 1.84 eV sin considerar los efectos del acoplamiento espín-órbita (SOC). Al combinar ambos sistemas, el comportamiento conductor del Sc<sub>2</sub>C se modificó tras la formación de la heteroestructura, observándose una ligera separación entre las bandas de valencia y de conducción, aunque no lo suficientemente grande como para transformar el material en un semiconductor o aislante.

Dicho efecto, al igual que lo señalado previamente, solo se obtuvo cuando se emplearon sistemas funcionalizados con hidrógeno (1.49 eV) o con flúor (0.29 eV), lo cual demuestra consistencia con los resultados del presente trabajo, donde se mantuvieron los sistemas puros sin modificaciones para la generación de la heteroestructura (Bu & Sun, 2025).

De acuerdo con la literatura, la conductividad eléctrica de los MXenos puede mantenerse al formar heteroestructuras con otros MXenos, mientras que la apertura de la banda prohibida se logra predominantemente mediante funcionalización con grupos terminales como -O, -F y -OH, elementos comúnmente utilizados en la modificación de estos materiales, además de

los previamente mencionados. En este trabajo, la combinación de Sc<sub>2</sub>C y Y<sub>2</sub>C ambos conductores en su forma de monocapa confirma que la heteroestructura resultante conserva el carácter metálico, lo que coincide con la tendencia reportada en los estudios previos anteriormente descritos. Estos resultados refuerzan que, para inducir un comportamiento semiconductor en este sistema, sería necesario implementar un proceso de funcionalización específica, aprovechando esta vía de modulación electrónica para potenciales aplicaciones como el sensado.

## 5. Conclusión

En este estudio se logró modelar y analizar, mediante cálculos de primeros principios utilizando el software SIESTA, la heteroestructura bidimensional formada por Sc<sub>2</sub>C y Y<sub>2</sub>C, unida mediante fuerzas de van der Waals. Los resultados muestran que ambos compuestos mantienen una alta estabilidad estructural tras el proceso de relajación, presentando únicamente cambios mínimos en los parámetros de red y en las distancias interatómicas. Asimismo, la combinación de estos materiales genera una redistribución de los estados electrónicos cerca del nivel de Fermi, modificando la dispersión de bandas, lo que puede influir de manera significativa en sus propiedades eléctricas.

El análisis electrónico revela que la interacción entre ambas capas preserva el comportamiento metálico característico de los sistemas base, aunque con ligeras variaciones en la densidad de estados alrededor del nivel de Fermi, lo que sugiere un acoplamiento interfacial efectivo dominado por interacciones de van der Waals. Estas modificaciones podrían aprovecharse para ajustar la conductividad y la respuesta electrónica del sistema mediante estrategias como funcionalización controlada.

## 6. Agradecimientos

Los autores agradecen al SECIHTI por el apoyo financiero a R. Flores-Cruz en el programa de doctorado (432) en el Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales e Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo y la estancia posdoctoral de L.S. Villaseñor-cerón. De la misma manera, los autores agradecen el tiempo de cómputo otorgado por LANCAD y SECIHTI en la supercomputadora Yoltla del LSVP de la UAM-Iztapalapa (23-2025).

## 7. Referencias

- Bu, Y., & Sun, M. (2025). Tuning the electronic properties of WS<sub>2</sub>/Sc<sub>2</sub>C heterostructures via surface functionalization: a first-principles study. *Physical Chemistry Chemical Physics*. DOI:10.1039/D5CP01402F<sup>2</sup>
- Chowdhury, S., Parvin, M., Chung, J. S., Kang, S. G., & Gupta, B. C. (2025). Exploring Sc<sub>2</sub>C and fluorinated Sc<sub>2</sub>C MXenes for high-performance Mg-ion battery anodes. *Journal of Power Sources*, 653, 237725. DOI:10.1016/j.jpowsour.2025.237725<sup>2</sup>
- Dale, S. G., & Johnson, E. R. (2018). Theoretical descriptors of electrides. *The Journal of Physical Chemistry A*, 122(49), 9371–9391. DOI:10.1021/acs.jpca.8b08548
- Feng, C., Shan, J., Xu, A., Xu, Y., Zhang, M., & Lin, T. (2017). First-principle study of pressure-induced phase transitions and electronic properties of electride Y<sub>2</sub>C. *Solid State Communications*, 266, 34–38. DOI:10.1016/j.ssc.2017.08.016
- He, Y. (2015). The structural, electronic, elastic and thermodynamics properties of 2D transition-metal electride Y<sub>2</sub>C via first-principles

- calculations. *Journal of Alloys and Compounds*, 654, 180–184. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.09.133>
- Hong, L., Klie, R. F., & Ögüt, S. (2016). First-principles study of size- and edge-dependent properties of MXene nanoribbons. *Physical Review B*, 93(11), 115412. DOI:10.1103/physrevb.93.115412
- Hosono, H., & Kitano, M. (2021). Advances in materials and applications of inorganic electrides. *Chemical Reviews*, 121(5), 3121–3185. DOI:10.1021/acs.chemrev.0c01071
- Inoshita, T., Hamada, N., & Hosono, H. (2015). Ferromagnetic instability of interlayer floating electrons in the quasi-two-dimensional electride Y<sub>2</sub>C. *Physical Review B*, 92(20), 201109. DOI:10.1103/physrevb.92.201109
- Khan, K., Tareen, A. K., Ahmad, W., Hussain, I., Chaudhry, M. U., Mahmood, A., Khan, M. F., Zhang, H., & Xie, Z. (2024). Recent advances in non-TI MXenes: Synthesis, properties, and novel applications. *Advanced Science*. DOI:10.1002/advs.202303998
- Kolavada, H., Shukla, R. S., Gajjar, P. N., & Gupta, S. K. (2025). Tuning properties of binary functionalization of Sc<sub>2</sub>C MXenes for supercapacitor electrodes. *Journal of Power Sources*, 626, 235796. DOI:10.1016/j.jpowsour.2024.235796<sup>2</sup>
- McRae, L. M., Radomsky, R. C., Pawlik, J. T., Druffel, D. L., Sundberg, J. D., Lanetti, M. G., Donley, C. L., White, K. L., & Warren, S. C. (2022). Sc<sub>2</sub>C, a 2D semiconducting electride. *Journal of the American Chemical Society*, 144(24), 10862–10869. DOI:<https://doi.org/10.1021/jacs.2c03024>
- McRae, L., Radomsky, R., Pawlik, J., Druffel, D., Sundberg, J., Lanetti, M., & Warren, S. (2021). Design of semiconducting electrides via electron-metal hybridization: the case of Sc<sub>2</sub>C. <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/611e6702fa49ace6e8562214>
- Modi, N., Naik, Y., Khengar, S. J., Shah, D. B., & Thakor, P. B. (2024). A DFT investigation of metal-ions intercalated Y<sub>2</sub>N MXene as an anode of metal-ion batteries. *Deleted Journal*, 245(1). DOI:10.1007/s10751-024-02002-z
- Modi, N., Naik, Y., Khengar, S., Jariwala, P., Shah, D., & Thakor, P. (2023). Theoretical investigations of asymmetric functionalized Y<sub>2</sub>C-based MXene monolayers. *Solid State Communications*, 372, 115303. DOI:10.1016/j.ssc.2023.115303
- Nazir, S., Shakil, M., Gillani, S. S. A., Hussain, I., Bano, N., & Alanazi, A. K. (2025). DFT study of vacancy induced defects in functionalized Sc<sub>2</sub>C MXenes and their impact on structural, electronic and optical response. *Applied Physics A*, 131(11), 1-18. DOI:10.1007/s00339-025-09059-9<sup>2</sup>
- Roszak, S., & Balasubramanian, K. (1998). Structural and thermodynamic properties of diyttrium carbides Y<sub>2</sub>C<sub>n</sub> (n = 2–8): A theoretical study. *The Journal of Physical Chemistry A*, 102(29), 6004–6009. DOI:10.1021/jp9811833
- Shakil, M., Nazir, S., Gillani, S. S. A., Alsaiani, N. S., Alomayrah, N., & Al-Buriahi, M. S. (2024). Effect on structural, electronic and optical properties of mixed functionalized two-dimensional Sc<sub>2</sub>CT<sub>x</sub>T<sub>1-x</sub> MXenes: A DFT study. *Physica B: Condensed Matter*, 689, 416197. DOI:10.1016/j.physb.2024.416197
- Thanasarnsurapong, T., Sringamprom, S., Sirisaksoontorn, W., Jungthawan, S., Kaewmaraya, T., & Boonchun, A. (2024). Reversible hydrogen storage in Y<sub>2</sub>C MXene under the influence of functional groups (F, Cl, OH). *Scientific Reports*, 14(1). DOI:10.1038/s41598-024-75662-0
- Tojigamori, T., Matsui, N., Suzuki, K., Hirayama, M., Abe, T., & Kanno, R. (2024). Fluorination/defluorination behavior of Y<sub>2</sub>C in fluoride-ion battery anodes. *ACS Applied Energy Materials*, 7(3), 1100–1108. DOI:10.1021/acs.aem.3c02613
- Yin, S., Li, X., & Cui, H. (2023). Theoretical investigation of quantum capacitance of M<sub>2</sub>C MXenes as supercapacitor electrode. *Physica Status Solidi (B)*, 260(12). DOI:10.1002/pssb.202300386
- Yu, J., Li, K., Hosono, H., & Wang, J. (2025). Fermi-level interstitial electron contributions: A key mechanism driving magnetism in electrides. *Chemistry of Materials*. DOI:10.1021/acs.chemmater.5c00158
- Zhang, Y., El-Demellawi, J. K., Jiang, Q., Ge, G., Liang, H., Lee, K., Dong, X., & Alshareef, H. N. (2020). MXene hydrogels: Fundamentals and applications. *Chemical Society Reviews*, 49(20), 7229–7251. DOI:10.1039/d0cs00022a
- Zhou, J., You, J., Zhao, Y., Feng, Y. P., & Shen, L. (2024). Van der Waals electrides. *Accounts of Chemical Research*, 57(17), 2572–2581. DOI:10.1021/acs.accounts.4c00394.