



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE LA COMPUTACIÓN

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE UNA NANO ANTENA DE GRAFENO

**TESIS**

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE  
MAESTRO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE LA COMPUTACIÓN

PRESENTA:

**SUGEIL SUÁREZ PIÑA**

Director de Tesis:

DRA. SUEMI RODRÍGUEZ ROMO

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, UNAM.

Ciudad Universitaria, CD. MX.

Enero, 2019



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## **Dedicatoria**

A mis padres Mary y Gonzalo que son mi ejemplo de lucha constante para salir adelante y por estar presentes siempre en cada momento de mi vida, les dedico un sueño más. Gracias por estar conmigo siempre, los quiero.

A mis hermanas Jako y Marisol por su cariño y apoyo incondicional, sus porras, sus palabras de aliento, sus desaires jaja, pero lo más importante por ser mis hermanas y sé que siempre estarán ahí.

A mi familia, que son mis pilares para salir adelante. Gracias Olaf por estar siempre a mi lado apoyándome en los buenos y malos momentos, por esas palabras de aliento que necesitaba en los momentos difíciles, por la gran paciencia que tienes conmigo. A nuestros bebés Luna y Luan que con sus sonrisas son suficientes para alegrar mi día a día. Gracias mi nena hermosa por tu tiempo y por tus palabras cuando me decías: -“tú puedes mami”, “tú trabaja yo estoy aquí sentadita”. Gracias Luan mi pequeño Taz, por ser el guerrero que eres y siempre tener esa sonrisa hermosa. Los amo mucho.

## **Agradecimiento**

A la Dra. Suemi por su experiencia, paciencia y palabras de aliento que recibí en los momentos que más lo necesité.

A Mel y Andrés por su amistad, conocimiento y porras que tuve durante todo este trayecto.

Al Ing. Patlán por su apoyo incondicional y por su amistad.

A mis compañeros que me brindaron su apoyo en este camino: Aldo, Elpidio, Nidia, René y Jorge.

A mis profesores, el Dr. Oscar Ibáñez Orozco, el Dr. Ricardo Paramount, el Mtro. Felipe de Jesús Vargas por sus conocimientos que me aportaron para salir adelante.

Al proyecto PAPIIT 101817 de la UNAM y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología.

Al posgrado en Ciencia e Ingeniería de la Computación.

# ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE FIGURAS.....	3
GLOSARIO DE TÉRMINOS.....	5
MOTIVACIÓN Y PROBLEMA.....	8
OBJETIVO GENERAL.....	12
OBJETIVOS PARTICULARES.....	12
JUSTIFICACIÓN.....	13
INTRODUCCIÓN.....	14
<b>CAPÍTULO 1 ESTADO DEL ARTE.....</b>	<b>17</b>
1.1 Antecedentes.....	17
<b>CAPÍTULO 2 ANTENAS.....</b>	<b>23</b>
2.1 Definición de antena.....	23
2.2 Clasificación según el comportamiento.....	25
2.3 Clasificación y tipos de antenas.....	25
2.3.1 Antenas lineales o de hilo.....	25
2.3.2 Antenas de apertura y reflectores.....	26
2.3.3 Antenas tipo parche o microstrip.....	26
2.4 Parámetros de una antena.....	27
2.4.1 Impedancia.....	28
2.4.2 Diagrama de radiación.....	28
2.4.3 Intensidad de radiación.....	30
2.4.4 Directividad.....	30
2.4.5 Ganancia.....	31
2.4.6 Eficiencia.....	31
2.4.7 Polarización.....	32
2.5 Métodos de análisis de una antena.....	32
2.6 Antenas de banda ancha y multifrecuencia.....	33
2.6.1 Antenas fractales.....	33
<b>CAPÍTULO 3 GRAFENO.....</b>	<b>36</b>
3.1 Grafeno.....	36
3.2 Propiedades del grafeno.....	39
3.3 Estructura del grafeno.....	43
3.4 Aplicaciones del grafeno.....	46

3.5	Conductividad del grafeno y obtención de la conductividad fuera y dentro de la diagonal de Hall.....	47
<b>CAPÍTULO 4</b>	<b>METODOLOGÍA.....</b>	<b>51</b>
4.1	Modelo Drude-Lorentz .....	51
4.2	Modelo de Drude-Lorentz usando el lenguaje de COMSOL Multiphysics.....	54
4.2.1	<i>Modelo electrónico de grafeno .....</i>	<i>54</i>
<b>CAPÍTULO 5</b>	<b>SIMULACIONES COMPUTACIONALES .....</b>	<b>59</b>
5.1	Proceso de resultados y diagrama de flujo.....	59
5.2	Simulación de una nano antena cuadrada a base de grafeno.....	61
5.2.1	<i>Programación de la ecuación de Kubo en MATLAB.....</i>	<i>62</i>
5.3	Sustitución en MATLAB de los parámetros de la antena.....	62
5.4	Simulación de un parche peano fractal con iteración n=1 .....	68
5.5	Obtención de los coeficientes, vectores primitivos y los vecinos más cercanos del grafeno .....	69
5.6	Obtención y simulación de los puntos de Dirac y Nanocintas del grafeno por medio de MATLAB.....	72
5.7	Uso de GUI (interfaz gráfica usuario).....	74
5.8	Simulación de la antena peano fractal n=1 en Comsol Multiphysics 5.2 .....	77
<b>CAPÍTULO 6</b>	<b>CONCLUSIONES .....</b>	<b>83</b>
<b>CAPÍTULO 7</b>	<b>BIBLIOGRAFÍA.....</b>	<b>85</b>

# ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 Espectro de las ondas de Terahertz que se encuentran en el extremo más alejado de la banda de infrarrojos, justo antes del inicio de la banda de microondas. ....	8
Figura 1.2 Lanzamiento de la 5Generación por parte de UIT (Unión internacional de Telecomunicaciones. Imágenes obtenidas de [9].....	10
Figura 1.3 Ventajas del grafeno Vs desventajas del material metálico .....	11
Figura 1.4 Diagrama de proceso de la obtención de los resultados de la nano antena peano fractal de grafeno. ....	15
Figura 1.5 Diagrama de bloques de la simulación de la nano antena peano fractal n=1. ....	15
Figura 2.1 Diagrama de una antena.....	23
Figura 2.2 Espectro de frecuencias. Imagen obtenida de [16] .....	24
Figura 2.3 Configuraciones típicas [11]. ....	26
Figura 2.4 Antenas microstrip [11] .....	27
Figura 2.5 Impedancia de una antena [15]. ....	28
Figura 2.6 Diagrama de radiación. ....	29
Figura 2.7 Cortes del diagrama de radiación de una antena. ....	29
Figura 2.8 Parámetro de diagrama de radiación de una antena. ....	30
Figura 2.9 Directividad de una antena.....	31
Figura 2.10 Polarización de una onda electromagnética de una antena.....	32
Figura 2.11 Proceso iterativo de generación de fractales [11]. ....	34
Figura 2.12 Fractales que se usan en la naturaleza. ....	34
Figura 2.13 Parche Peano Fractal iteración 1. ....	35
Figura 3.1 Superficie de Fermi. Imagen obtenida de [20].....	37
Figura 3.2 . a) La conductividad de Hall (roja) y la resistividad longitudinal (verde) en función de la densidad de portadora. b) La resistencia longitudinal y de Hall en función de la densidad de flujo magnético para una muestra dopada con electrones. Imagen obtenida de [20].....	37
Figura 3.3 Microscopía de fuerza atómica (AFM) del grafeno. Imagen obtenida de [20] .....	39
Figura 3.4 Celda hexagonal del grafeno. ....	39
Figura 3.5 Formas alotrópicas del carbono. Diamante y grafito (3D); grafeno (2D); nanotubos (1D); furellenos (0D). Imagen obtenida de [1]. ....	44
Figura 3.6 a) estructura del grafeno. bidimensional. b) enrejado real y c) enrejado recíproco. ....	45
Figura 3.7 Relación de dispersión de la red de panal, mostrando el cono de Dirac en una esquina de la primera zona de Brillouin.....	46
Figura 3.8 Plano XY de grafeno. Imagen obtenida de [22] .....	47
Figura 4.1 Representación del modelo de Drude: los electrones en azul, son movidos por el gradiente de campo eléctrico y chocan con los iones de la red cristalina que están en rojo [25]. ....	51
Figura 4.2 Modelo del grafeno en el plano XY. Imgen obtenida de [26] .....	54
Figura 4.3 Captura de ventana en COMSOL Multiphysics del modelo de dispersión Drude-Lorentz para la configuración de la ecuación de onda eléctrica [28]. ....	57
Figura 4.4 Variables para el modelo de dispersión de Drude-Lorentz.....	57
Figura 5.1 Proceso de avances de resultados. ....	60
Figura 5.2 Diagrama de flujo completo usado para el diseño y simulación de la nano antena. ....	61
Figura 5.3 Parámetros de la antena. Imagen del lado izquierdo tomada de [23] .....	61
Figura 5.4 Diagrama de flujo de la ecuación de KUBO resultado en MATLAB.....	62
Figura 5.5 Parámetros de la nano antena de grafeno. ....	63
Figura 5.6 Diagrama de Flujo del programa para obtener las gráficas de directividad, impedancia y ancho de banda de la antena de parche .....	63

Figura 5.7 Gráfica de la directividad de la nano antena de grafeno ..... 64

Figura 5.8 Obtención de la frecuencia de resonancia de la nano antena de grafeno. .... 65

Figura 5.9 Impedancia obtenida de la nano de grafeno. .... 66

Figura 5.10 Diagrama de flujo de la ecuación de KUBO con base de datos. .... 67

Figura 5.11 Gráfica de impedancia y reactancia de la ecuación de KUBO..... 67

Figura 5.12 Primera interacción de la antena peano fractal. .... 68

Figura 5.13 Gráfica del parche peano fractal interacción  $n=1$  sin malla de grafeno. .... 68

Figura 5.14 Diagrama de flujo del parche peano fractal Giuseppe  $n=1$  en una malla de hexagonal (izquierda) y geometría del parche peano fractal (derecha). .... 69

Figura 5.15 Zona de análisis de la malla de grafeno para la obtención de la zona de Brillouin y sus vecinos. .... 70

Figura 5.16 a) Diagrama de flujo del programa de los vectores primitivos y la primera zona Brillouin usado en MATLAB. b) gráficas de los vectores primitivos, c) vecinos de la primera zona de Brillouin..... 71

Figura 5.17 Gráfica de la estructura de bandas a lo largo de las direcciones cristalográficas, usando la aproximación de amarre fuerte, se muestran las 8 bandas. .... 72

Figura 5.18 Gráfica de las nanocintas (NanoRibbons). .... 73

Figura 5.19 GUI (Interfaz Gráfica de Usuario) de los valores de la conductividad del grafeno. .... 74

Figura 5.20 GUI de la simulación de la nano antena de parche cuadrado. .... 75

Figura 5.21 GUI de las gráficas de los vectores primitivos y vecinos de la primera zona de Brillouin con valores..... 75

Figura 5.22 GUI gráficas del parche peano fractal  $n=1$  con enrejado y sin enrejado ..... 76

Figura 5.23 GUI gráficas vector de onda y nano ribbons. .... 76

Figura 5.24 Diagrama de bloques de la simulación de la nano antena peano fractal. .... 77

Figura 5.25 Geometría de la nano antena peano fractal 2D ..... 78

Figura 5.26 Geometría de la nano antena peano fractal 3D ..... 78

Figura 5.27 Diseño de la antena a base de grafeno sobre un sustrato de dióxido de silicio..... 79

Figura 5.28 Geometría del área de la antena de parche peano fractal  $n=1$  ..... 79

Figura 5.29 a) Directividad en 3D y b) Directividad en forma polar de la nano antena peano fractal  $n=1$ . .... 81

Figura 5.30 Obtención de la frecuencia de resonancia de la nano antena peano fractal  $n=1$ . .... 82

# GLOSARIO DE TÉRMINOS

---

**Grafeno.** El grafeno es un nuevo material nanométrico bidimensional, descubierto en el 2004 por **Andre Geim y Konstantin Novoselov** y obteniendo el Premio Nobel de Física en el 2010. El grafeno fue obtenido por exfoliación micromecánica del grafito. El grafeno es una hojuela cuasiplana con pequeñas ondulaciones, dando la apariencia de un panel de abejas, con un grosor de un átomo de carbono (0.1 nm). Uno de sus comportamientos es como semiconductor gap superficial y ausencia de localización electrónica, entre otras [1].

**Efecto Hall cuántico.** El efecto Hall cuántico (o el efecto Hall cuántico entero) es una versión de la mecánica cuántica del efecto Hall, observado en sistemas bidimensionales con electrones sometidos a bajas temperaturas y fuertes campos magnéticos, en la que la conductividad  $\sigma$  toma los valores cuantizados

$$\sigma = \nu \frac{e^2}{h} \quad (1.1)$$

donde:

$e$  es la carga elemental

$h$  es la constante de Planck.

El prefactor  $\nu$  conocido como el “factor de relleno”, puede tener cualquier número entero ( $\nu = 1, 2, 3, \dots$ ) o valor fraccional ( $\nu = 1/3, 2/5, 3/7, 2/3, 3/5, 1/5, 2/9, 3/13, 5/2, 12/5\dots$ ).

Pueden distinguirse tanto el efecto Hall cuántico entero como el efecto Hall cuántico fraccionario, dependiendo de si  $\nu$  es un entero o una fracción cuántica, respectivamente. El efecto Hall cuántico entero se entiende muy bien y puede explicarse simplemente en términos de orbitales de partículas solas, de un electrón en un campo magnético (véase cuantización de Landau). El efecto Hall cuántico fraccionario es más complicado, ya que su existencia se basa fundamentalmente en las interacciones electrón–electrón. También se entiende muy bien como efecto Hall cuántico entero, no de electrones sino de compuestos de flujo de carga conocidos como fermiones compuestos.

La cuantización de la conductancia de Hall tiene la importante propiedad de ser increíblemente precisa. Las medidas reales de la conductancia han resultado ser enteras o múltiplos fraccionarios de  $\frac{e^2}{h}$  en casi una parte de 1 billón. Este fenómeno, denominado “cuantización exacta”, ha demostrado ser una sutil manifestación del principio de invariancia de norma [2].



**Fermión.** Un fermión es uno de los dos tipos básicos de partículas elementales que existen en la naturaleza (el otro tipo es el bosón son partículas con espín entero). Los fermiones se caracterizan por tener espín semi-entero ( $1/2, 3/2, \dots$ ). Los fermiones son los electrones, los protones, y los neutrones. La función de onda que describe una colección de fermiones debe ser antisimétrica con respecto al intercambio de partículas idénticas. El tipo de partícula se llama así en honor al científico italiano Enrico Fermi.

**Fractal.** Un fractal es un objeto geométrico cuya estructura básica, fragmentada o aparentemente irregular, se repite a diferentes escalas [3].

**Materiales Conductores y Semiconductores.** Se llaman materiales conductores a los que poseen una superposición entre su banda de valencia y de conducción, esto quiere decir que la recombinación hueco electrón requiere de energía mínima para generar flujo de carga eléctrica los metales son el mejor ejemplo. Los semiconductores son aquellos que poseen una banda prohibida de energía cuyo valor no supera los 3 eV. Su banda de valencia está casi llena de electrones, y separada de su banda de conducción por el valor específico a cada material (Si, Ge, AsGa).

**Nano tecnologías.** Es la manipulación de la materia a escala nanométrica. La más temprana y difundida descripción de la nanotecnología [4] se refiere a la meta tecnológica particular de manipular en forma precisa los átomos y moléculas para la fabricación de productos a macro escala, ahora también referida como nanotecnología molecular. La nanotecnología definida por el tamaño es naturalmente un campo muy amplio, que incluye diferentes disciplinas de la ciencia tan diversas como la ciencia de superficies, química orgánica, biología molecular, física de los semiconductores, microfabricación, etc. [5]

**Nano.** Es un prefijo griego que indica una medida ( $10^{-9} = 0,000\ 000\ 001$ ), no un objeto; de manera que la nanotecnología se caracteriza por ser un campo esencialmente multidisciplinar, y cohesionado exclusivamente por la escala de la materia con la que trabaja.

**Nanocintas de grafeno (GNR).** Son tiras de grafeno con un ancho inferior a 50 nm. Las cintas de grafeno se introdujeron como un modelo teórico por Mitsutaka Fujita y coautores para examinar el efecto del tamaño del borde y la nanoescala en el grafeno. [6].

**Nano litografía.** Se refiere a la deposición de nanopartículas por el método litográfico.

**Nano partículas.** Son partículas con dimensiones entre 1 y 100 nm, dependiendo de su composición pueden ser conductoras, magnéticas, superconductoras, aislantes. También se pueden clasificar en orgánicas e inorgánicas dependiendo de su precursor.

***Nano materiales.*** El campo de los nanomateriales incluye los subcampos que desarrollan o estudian los materiales que tienen propiedades únicas que surgen de sus dimensiones a nanoescala [7].

# MOTIVACIÓN Y PROBLEMA

El uso de las nano-antenas plasmónicas basadas en grafeno en el rango de los micrómetros son óptimos para radiar ondas electromagnéticas en la banda de terahercios y con una mayor eficiencia de la radiación con respecto a sus homólogos metálicos. Las propiedades únicas del grafeno también permitirán mejorar el rendimiento de las antenas en las comunicaciones móviles.

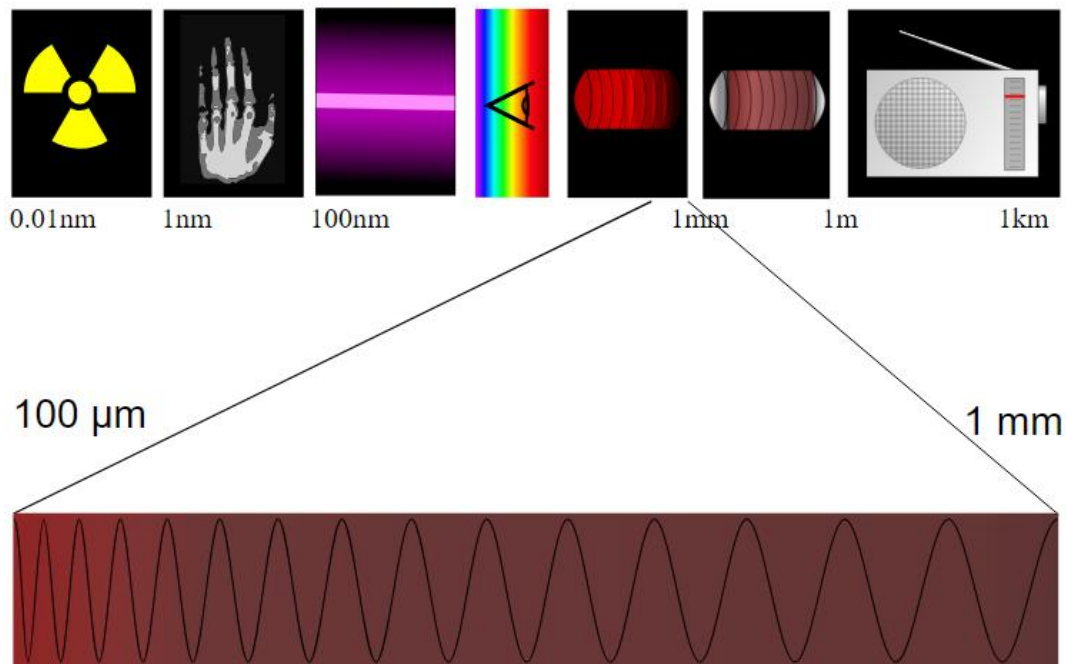


Figura 1.1 Espectro de las ondas de Terahertz que se encuentran en el extremo más alejado de la banda de infrarrojos, justo antes del inicio de la banda de microondas.

El uso de las nuevas tecnologías en el ámbito de las comunicaciones móviles es una de las justificaciones del presente trabajo. La radiación dentro de la banda de frecuencias de los Terahercios está entre el infrarrojo lejano y las microondas como se muestra en la Figura 1.1, luego tiene un amplio abanico de aplicaciones. Siendo una radiación que no es ionizante y que permite generar pulsos ultracortos de alta resolución espacial (submilimétrica). La radiación THz posee algunos atributos únicos como son [8]:

- ☞ Materiales que bloquean los espectros visibles e IR (infrarroja), por lo que revelan que son transparentes en el rango de frecuencia de Terahertz, lo que permite lograr una resolución espacial requerida para obtener imágenes de calidad. Los rayos T son no ionizantes, capaces de penetrar en la ropa, polietileno, poliéster y otros tipos de cubiertas, y cerramientos, hechos de varios materiales opacos, absorbidos selectivamente por el agua y sustancias orgánicas.

- ☞ La emisión de THz no daña a ninguna especie biológica, lo que no es el caso de los rayos X. Las ondas de terahercios no tienen radiación ionizante, son ondas de rayos X combinadas no invasivas y se consideran absolutamente seguras para los humanos, las plantas y los animales en este planeta tierra.
- ☞ Las ondas en Terahertz son bastante aptas para el análisis estructural de cualquier ser biológico. Se puede realizar un análisis químico efectivo sobre estas sustancias porque para muchas de ellas sus líneas espectrales características que se encuentran en el rango de los THz lejano (1–3 THz).

Muchas de estas aplicaciones se pueden realizar de forma remota con el uso de antenas, manejando cierta distancia en caso de ser requerido debido a la peligrosidad que pudiera conllevar su aplicación.

En aplicaciones de las comunicaciones inalámbrica el uso del rango de los THz es muy adecuado para desarrollar un sistema de telecomunicaciones inalámbricas de generación actual que pueda disparar a una velocidad de 100 Gb/s [8]. Esta utilidad de la tecnología Terahertz es bastante prometedora para la transmisión de información de alta velocidad entre dispositivos electrónicos, creación de redes de área local inalámbricas (WLAN) y redes de área personal inalámbricas (WPAN) de nueva generación.

Actualmente el uso del espectro radioeléctrico es el segmento del espectro electromagnético comprendido entre los 3 KHz y los 300 GHz que sirve como medio de transmisión de tecnologías inalámbricas como las redes celulares, la radio, la televisión y el Wi-Fi para establecer comunicaciones.

Las Telecomunicaciones Móviles Internacionales (IMT) deben cumplir con los requisitos acordados por la UIT (Unión Internacional de Telecomunicaciones) en el lanzamiento de la 5G y se tiene un análisis en donde ya se maneja de forma masiva el uso de dispositivos móviles y no necesariamente el uso de los smartphones como lo muestra la Figura 1.2; el hecho de usar dispositivos móviles estamos hablando del uso de antenas que cumplan con las características necesarias para el lanzamiento. A pesar de que la quinta generación se maneja solamente en el rango de frecuencia de los Gigahertz podemos hacer uso de nuevas propuestas como serían los Terahercios. Aunado a las propiedades del grafeno podríamos estar a un paso para las nuevas generaciones en un futuro no muy lejano, con el lanzamiento de la 5G y el uso masivo de los dispositivos en todo tipo de usos que se tenga una comunicación M2M (máquina a máquina). Para ello, el hecho de reducir el tamaño de la antena para adecuarlo a resonar en la banda de los Terahercios.

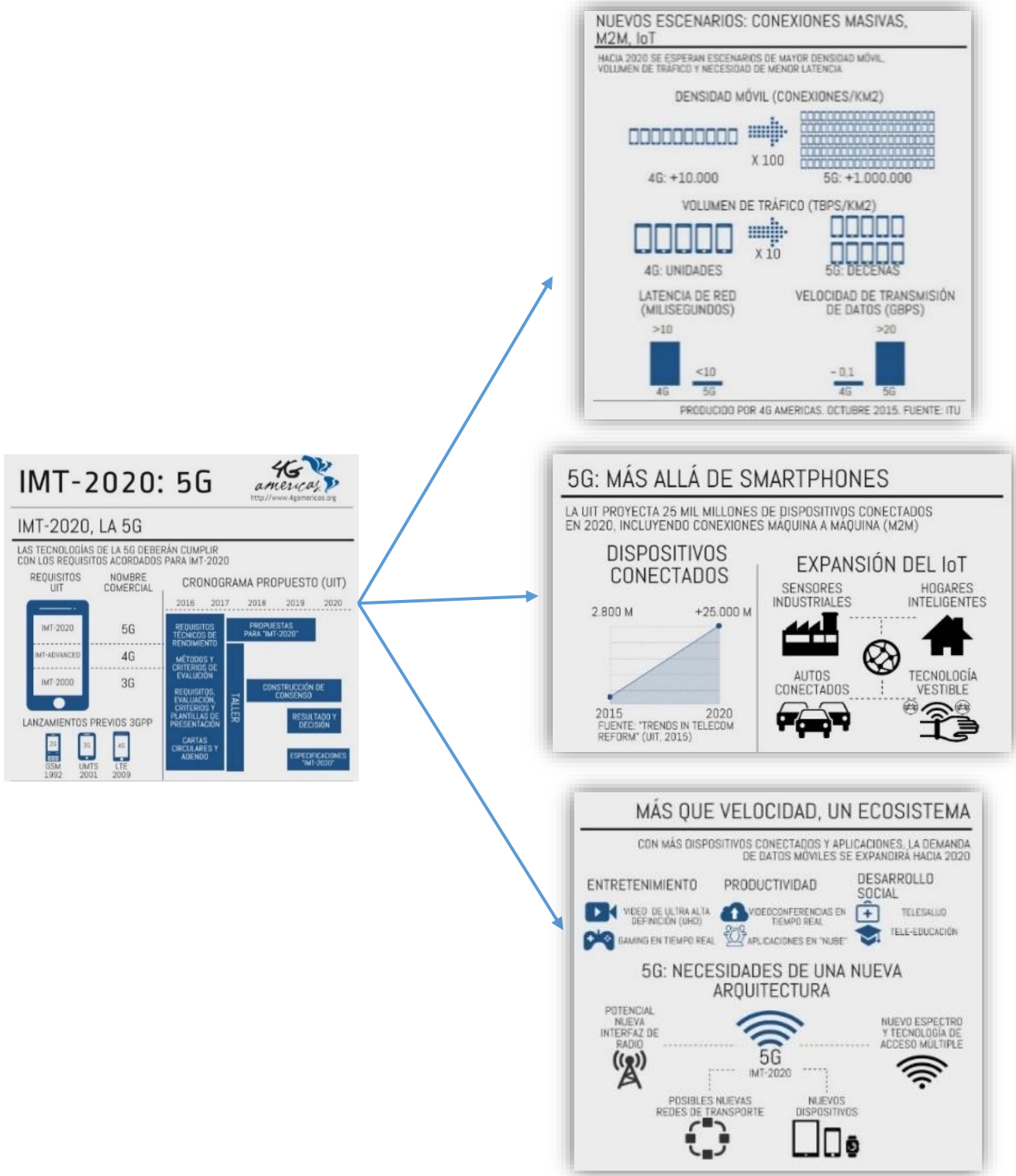
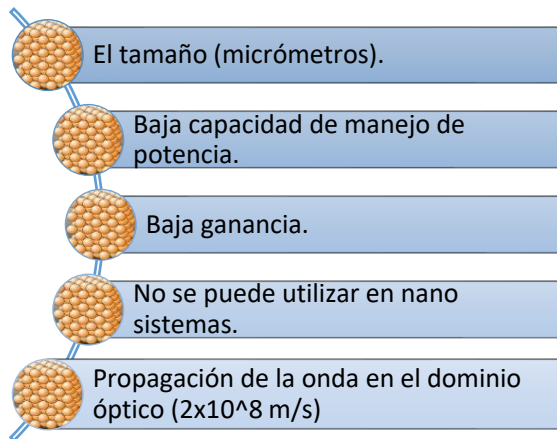


Figura 1.2 Lanzamiento de la 5Generación por parte de UIT (Unión internacional de Telecomunicaciones. Imágenes obtenidas de [9])

Dentro de las particularidades del grafeno representa tener ventajas como material de conducción en una antena a nivel nanométrico dentro de la banda de los Terahertz con respecto a sus homólogos metálicos, las cuales se muestran a continuación:

Desventajas (material metálico)



Ventajas (grafeno)

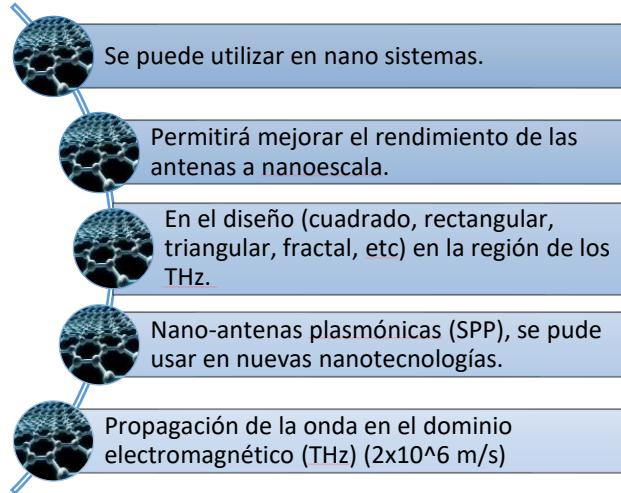


Figura 1.3 Ventajas del grafeno Vs desventajas del material metálico

El tratar de estar un paso adelante a las nuevas generaciones y que cumpla con las necesidades de los nuevos dispositivos los cuales van a requerir un ancho de banda más grande, para satisfacer la transmisión de datos en masa, al aumentar la complejidad de los próximos dispositivos móviles y así poder dar un servicio inalámbrico eficiente en las redes de área local inalámbricas (WLAN) y redes de área personal inalámbricas (WPAN) de nueva generación.

Para hacer uso de las nuevas tecnologías en el ámbito del servicio inalámbrico se están utilizando antenas fractales las cuales están diseñadas para maximizar la distancia al transmitir o recibir información. Debido a su estructura fractal una característica es la repetición de un patrón de información sobre uno o más espacios confinados dentro del perímetro a transmisión y/o recepción de datos [10].

Motivación por la cual el presente trabajo es el uso de los fractales, los cuales también tienden a ser muy compactos y de espectro expandido, el cual es una característica que se considera para el diseño de una antena fractal haciendo uso del material de grafeno que ayudará a ofrecer excelentes ganancias de diferentes frecuencias de manera simultánea o multibanda, por ello las antenas fractales son idóneas para la aplicación en las comunicaciones móviles M2M en comparación a las antenas comunes.

## OBJETIVO GENERAL

---

Calcular mediante el cómputo científico el diseño de una antena con geometría peano fractal de iteración  $n=1$  a escala nanométrica, adecuado al material de grafeno sobre un sustrato de dióxido de silicio que resuene en la banda de terahercios.

## OBJETIVOS PARTICULARES

---

- ↻ Analizar el estado del arte sobre el descubrimiento del grafeno, sus aplicaciones que se han realizado en antenas en el rango de los terahercios, el diseño de las antenas fractales y el uso de las nanotecnologías.
- ↻ Recrear la ecuación matemática de la conductividad del material de grafeno inter e intrabanda.
- ↻ Diseñar y simular por medio del cómputo una nano-antena de parche a base de grafeno sobre un sustrato de dióxido de silicio que resuene en la banda de terahercios.
- ↻ Diseñar y simular computacionalmente una nano antena peano fractal de recursión 1 a base de grafeno sobre un sustrato de dióxido de silicio en la banda de los terahercios.

# JUSTIFICACIÓN

---

La antena de parche convencional hecha de material de cobre como conductor tiende a tener desventajas en un ancho de banda estrecha, baja ganancia, baja capacidad de manejo de potencia y con dimensión alrededor de micras. [11]

El reducir aún más el tamaño de una antena metálica clásica en el rango de los micrómetros requeriría muy altas frecuencias de resonancia en el rango óptico causando una atenuación significativa de canal y la dificultad en la aplicación de nanodispositivos que funcionen a una frecuencia tan alta.

Por estas razones, al utilizar antenas metálicas a una escala de micrómetros para implementar comunicaciones inalámbricas entre nanosistemas es inviable. Sin embargo, las nano-antenas plasmónicas basadas en el grafeno, sólo unos pocos micrómetros de tamaño son óptimos para radiar ondas electromagnéticas en la banda de terahercios [12], a una frecuencia significativamente menor y con una mayor eficiencia de la radiación con respecto a sus homólogos metálicos. Las propiedades únicas del grafeno también permitirán mejorar el rendimiento de las antenas a nanoescala.

Dentro del rendimiento de las antenas a nanoescala es utilizar fractales. Con el desarrollo de la teoría fractal, la naturaleza de las geometrías fractales se ha explotado en muchos campos de la ingeniería y la ciencia, incluido el diseño de antenas. La utilización de geometrías fractales en el diseño de antenas ha llevado a la evolución de una nueva clase de antenas llamadas antenas en forma de fractal. El uso de las antenas fractales trae consigo diferentes ventajas debido a que pueden ser muy compactas, son multibanda o de espectro expandido y tienen varias utilidades en las comunicaciones inalámbricas.

Una antena fractal tiene una respuesta en frecuencia completamente diferente a las antenas tradicionales ya que es capaz de ofrecer excelentes ganancias en diferentes frecuencias de manera simultánea. En la mayoría de las antenas tradicionales existe una frecuencia para la cual ofrecen su máxima ganancia y en el resto de las frecuencias la ganancia se ve rápidamente reducida. Por esto las antenas fractales son idóneas para aplicaciones de amplio espectro frecuencial o multibanda [10].

En literatura reciente se han propuesto la utilización de antenas fractales a nano escala con materiales convencionales, pero no se han realizado trabajos con uso del material de grafeno, razón por la cual se ha motivado la realización del presente trabajo con el propósito de diseñar y simular por medio del cómputo una nano antena a base de grafeno sobre un sustrato de silicio en el rango de los terahertz.



# INTRODUCCIÓN

---

Un avance tecnológico de los últimos años ha sido la creación de nano tecnología de entre 1-100 nanómetros, utilizados en diferentes áreas de investigación desde la biología, medicina, construcción, etc.

El hecho de realizar este tipo de investigaciones ha sido para poder desarrollar nuevas tecnologías en un pequeño pero gran mundo que ha sido la nanotecnología. Una de las aplicaciones más notorias ha sido el tratar de desarrollar dispositivos tan pequeños, pero al mismo tiempo eficientes para el envío de información a velocidades de los terabits por segundo entre una comunicación interna de dispositivos electrónicos y que este envío de información sea de forma inalámbrica; y aún más el poderlo realizarlo en un material como es el grafeno el cuál brinda las propiedades necesarias para adecuar una antena de parche a niveles nanométricos. Una propiedad, por ejemplo, se ha utilizado en el cuerpo humano el cual ha sido aceptable y no lo rechaza.

Una similitud del grafeno es que se considera del tamaño de un átomo, el cual mide menos de 1 nanómetro, pero una molécula puede ser mayor, en esta escala se observan propiedades y fenómenos totalmente nuevos. Estas nuevas propiedades son las que los científicos aprovechan para crear nuevos materiales (nanomateriales) o dispositivos nanotecnológicos. De esta forma, la nanotecnología promete soluciones a múltiples problemas que enfrenta actualmente la humanidad [13].

Para la adecuación de la antena de parche utilizando el material de grafeno, se tiene sus propiedades ideales para una realización a nivel nanométrico. La intención del presente trabajo es unir dichas propiedades con los fractales los cuales son, formas geométricas, que son autosimilares, repitiéndose a diferentes escalas. Con el desarrollo de la teoría fractal, la naturaleza de las geometrías fractales se ha explotado en muchos campos de la ingeniería y la ciencia, incluido el diseño de antenas. La utilización de geometrías fractal en el diseño de antenas ha llevado a la evolución de una nueva clase de antenas llamadas antenas en forma de fractal.

Ambos temas desde el hecho de usar el material como es el grafeno y la utilización de los fractales, al unirlos nos podrán ayudar a la mejora en el diseño computacional de la unión de ambos; para la parte de comunicaciones móviles a escala nanométrica para alta resonancia en el caso de los Terahertz con ayuda de la estructura del fractal debido a que resuenan a diferentes frecuencias (multibanda), y considerando que en el envío de información en las comunicaciones deben ser eficientes, confiables y seguras con la transmisión de datos.

En los capítulos 2 y 3 daremos de forma general los conceptos de grafeno y antena, necesarios para poder comprender el uso de la simulación de la nanoantena peano fractal propuesta para el presente trabajo.

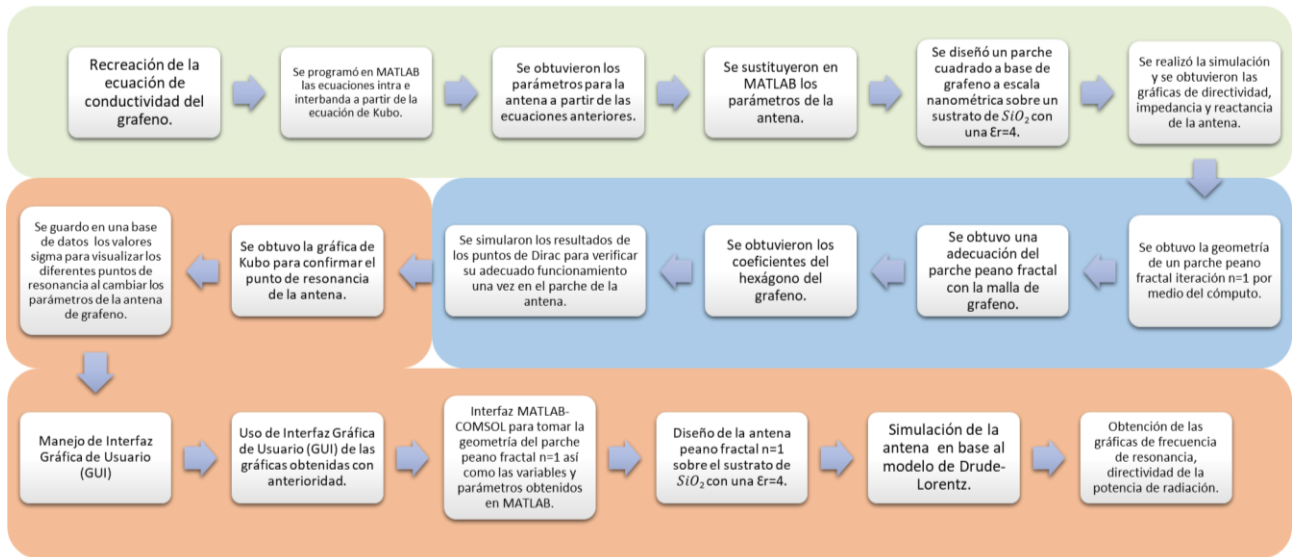


Figura 1.4 Diagrama de proceso de la obtención de los resultados de la nano antena peano fractal de grafeno.

En la Figura 1.4 se muestra el proceso de la obtención de los resultados de las simulaciones por medio del cómputo mostrados en el capítulo 5. En la Figura 1.5 se muestra el diagrama de bloques usado en la simulación de la antena peano fractal  $n=1$ , utilizando el método de elementos finitos (MEF), al programar en los lenguajes de MATLAB y COMSOL Multiphysics, debido a sus características de simulación y obtención de la frecuencia de resonancia en el rango de los terahercios.

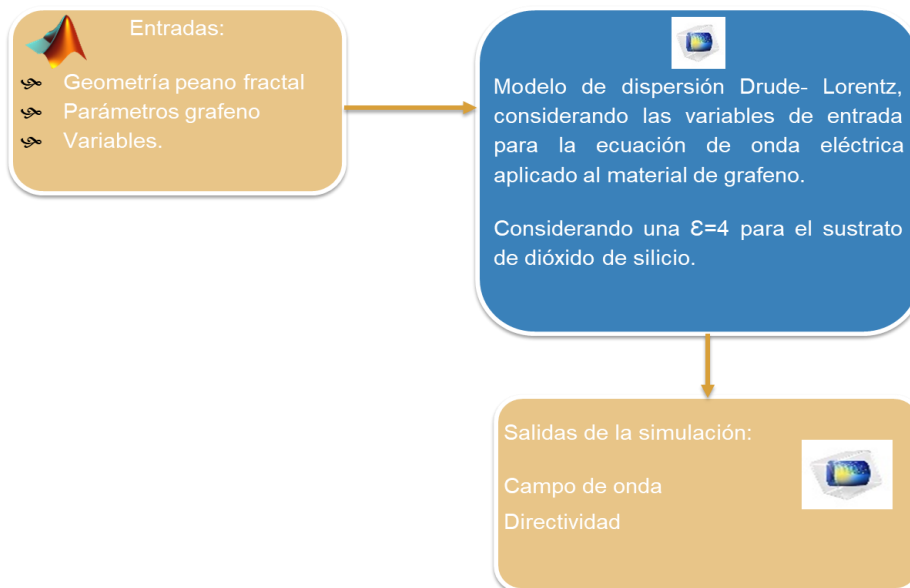


Figura 1.5 Diagrama de bloques de la simulación de la nano antena peano fractal  $n=1$ .

En el capítulo 4 se describe la metodología que se usó para la adecuación de la antena, teniendo como conductor el uso del grafeno considerando su conductividad de superficie de plasmones polarizados adaptándolo al modelo de Drude-Lorentz debido a la semejanza de la red del grafeno con respecto a la red que maneja el modelo de Drude-Lorentz, y que con ayuda del cómputo, se logró una simulación de la antena de parche peano fractal a base de grafeno sobre un sustrato de dióxido de silicio con una  $\epsilon_r = 4$ .

# Capítulo 1 ESTADO DEL ARTE

Se presentan algunos estudios directamente relacionados con la temática de antenas a base de grafeno, con el fin de tomar como base lo efectuado hasta el momento.

En los antecedentes se encontraron referencias sobre las propiedades del grafeno, así como sus aplicaciones en el avance de las nanotecnologías, las cuales se mencionan de forma cronológica a continuación, presentando un panorama más amplio de las evidencias metodológicas y empíricas que se han realizado desde el descubrimiento del grafeno, hasta su aplicación en el uso de las antenas.

## 1.1 Antecedentes

Los químicos Robert Curl, Harold W. Kroto y Richard E. Smalley recibieron el premio nobel de Química en 1996 debido a que descubrieron una nueva forma de carbono el cual se conoce como **fullerenos**, en honor al arquitecto R. Buckminster Fuller quien creó la “Cúpula Geodésica” del edificio de Estados Unidos en la Exposición Universal de Montreal en 1976. Posteriormente, Sumio Iijima descubrió los nanotubos de carbono y su forma característica se asemejan al panel de abeja. En 2004 los ganadores del Premio Nobel de Física Andre Geim y Konstantin Novoselov lograron obtener una lámina bidimensional, que se obtuvo al separarla de las láminas que conforman el grafito, el cual está formada por átomos de carbono; a esta lámina se le conoce como **grafeno**. En 2016 El premio Nobel de Química fue otorgado al francés Jean-Pierre Sauvage, el británico J. Fraser Stoddart y el holandés Bernard L. Feringa, por el diseño y la síntesis de sistemas de moléculas que pueden realizar tareas cuando se les agrega energía.

**[2004] C.L. Peterson**, en su artículo: ***Nanotechnology: from Feynman to the grand challenge of molecular manufacturing***, menciona que el término nanotecnología ha llegado a tener dos significados principales: 1) nueva ciencia y tecnología que toma ventajas de las propiedades que operan a nanoescala, y 2) construcción con precisión atómica a través del uso de sistemas de máquinas moleculares. El autor los distingue haciendo referencia a la primera como nanotecnología a corto plazo y la segunda como sistemas de máquinas moleculares, o nanotecnología molecular (MNT), también denominada fabricación molecular. Este trabajo intenta esbozar la historia del campo en general, la confusión que ha surgido entre los diversos tipos de nanotecnología, la política de financiamiento de los EE. UU. y las perspectivas en un futuro, para poner un mayor énfasis en el objetivo de construir con precisión atómica.

[2007] A. Geim, K. Novoselov, en su artículo: *The rise of graphene*, menciona que el grafeno es una estrella en ascenso rápido en el horizonte de la ciencia de los materiales y la física de la materia condensada. Este material estrictamente bidimensional exhibe una calidad cristalina y electrónica excepcionalmente alta y, a pesar de su breve historia, ya ha revelado nuevas aplicaciones físicas y potenciales, que se discuten brevemente aquí. Mientras que uno puede estar seguro de la realidad de las aplicaciones sólo cuando aparecen productos comerciales, el grafeno ya no requiere ninguna prueba más de su importancia en términos de física fundamental. Debido a su espectro electrónico inusual, el grafeno ha llevado a la aparición de un nuevo paradigma de la física de la materia condensada "relativista", donde los fenómenos cuánticos relativistas, algunos de los cuales son inobservables en la física de alta energía. En términos más generales, el grafeno representa una clase conceptualmente nueva de materiales que sólo tienen un átomo de espesor y, sobre esta base, ofrece nuevas incursiones en la física de baja dimensión que nunca ha dejado de sorprender y sigue proporcionando un terreno fértil para las aplicaciones.

[2007] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, J. P. Carbotte, en su artículo: *Magneto-optical conductivity in Graphene*, mencionan que la cuantificación del nivel de Landau en grafeno refleja la naturaleza de Dirac de sus cuasipartículas y se ha encontrado que exhibe un efecto Hall cuántico entero inusual. En particular, se puede pensar que el nivel más bajo de Landau se comparte por igual con los electrones y los agujeros, y esto conduce al comportamiento característico de la conductividad magnetoóptica en función de la frecuencia  $\Omega$  para varios valores del potencial químico  $\mu$ . Se presta especial atención al peso espectral óptico bajo varios picos de absorción y su redistribución de  $\mu$  varía. También proporcionan resultados para el campo magnético B, así como barridos de potencial químico a frecuencias fijas seleccionadas, que pueden ser particularmente útiles para posibles mediciones en grafeno. Ambas conductividades diagonales y Hall son consideradas.

[2009] Llat ser, C. Kremers, J. Jornet Miquel en su artículo *Radiation Characteristics of Tlinable Graphennas in the Terahertz Band*, mencionan que el importante papel de la conductividad del grafeno en las características del grafeno y se analiza numéricamente su rendimiento de radiación tanto en transmisión como en la recepción. La frecuencia de resonancia del grafeno se calcula como una función de su longitud y ancho, tanto analíticamente como por simulación. Además, se evalúa también la influencia de un sustrato dieléctrico con un tamaño variable, y la posición del parche con respecto al sustrato. Además, las propiedades importantes del grafeno, tales como su potencial químico o su tiempo de relajación, tienen un profundo impacto en las propiedades de radiación del grafeno. Finalmente, el patrón de radiación de una de las gráficas obtenidas del artículo se compara con el de una antena metálica equivalente. Estos resultados resultarán útiles para los diseñadores que permitan las comunicaciones inalámbricas entre nanosistemas.

[2010] **J.M. Jornet , I.F. Akyildiz** en su artículo: ***Graphene-based nano-antennas for electromagnetic nanocommunications in the terahertz band***, mencionan que la nanotecnología está permitiendo el desarrollo de dispositivos en una escala que va de uno a unos pocos cientos de nanómetros. La coordinación y el intercambio de información entre estos nano dispositivos conducirá al desarrollo de futuras nanonetworks, impulsando la gama de aplicaciones de la nanotecnología en los campos biomédico, ambiental y militar. En este artículo, se utiliza un nuevo marco mecánico cuántico para analizar las propiedades de los nanotubos de carbono (CNT) como antenas nano-dipolo. Para esto, primero las propiedades de la línea de transmisión de los CNT se obtienen utilizando el modelo de unión, ajustada como funciones de la longitud, el diámetro y la geometría del borde de los nanotubos de carbono. Luego, los parámetros de antena relevantes tales como la frecuencia de resonancia fundamental y la impedancia de entrada, se calculan y se comparan con los de una antena de nano parche basada en un nanoribbon de grafeno (GNR) con dimensiones similares. Los resultados muestran que para un tamaño de antena máximo del orden de varios cientos de nanómetros (el tamaño máximo esperado para un nano dispositivo), tanto una antena nano-dipolo como una antena nano parche podrán irradiar ondas electromagnéticas en la banda de terahercios (0.1-10.0 THz).

[2011] **Jason Horng, Chi-Fan Chen, Baisong Geng, Caglar Girit, Yuanbo Zhang, Zhao Hao, Hans A. Bechtel**, en su artículo: ***Drude conductivity of Dirac fermions in Graphene***, mencionan las mediciones de la conductividad de alta frecuencia del grafeno desde THz hasta mediados de IR a diferentes concentraciones de portadores. La conductividad exhibe dependencia de frecuencia tipo Drude y aumenta drásticamente a frecuencias de THz, pero su fuerza absoluta es menor que las predicciones teóricas. Esta reducción anómala de la fuerza del oscilador de electrones libres es corroborada por los cambios correspondientes en las transiciones entre bandas de grafeno, tal como lo exige la regla de suma.

[2012] **Julien Perruisseau-Carrier**, en el artículo: ***Graphene for Antenna Applications: Opportunities and Challenges from Microwaves to THz***, menciona que el uso de grafeno para antenas y otros pasivos electromagnéticos podría aportar beneficios significativos, como la miniaturización extrema, la integración monolítica con la nanoelectrónica RF de grafeno, la optimización dinámica e incluso la transparencia y la flexibilidad mecánica. Aunque recientemente se han presentado diferentes trabajos teóricos relacionados, se han propuesto relativamente pocas aplicaciones y se han evaluado de forma realista. Los autores repasaron las principales propiedades del grafeno y el estado del arte en su caracterización teórica y experimental. Varias aplicaciones de antenas desde microondas hasta THz, proporcionando en cada caso una evaluación crítica de los beneficios, las limitaciones y los problemas restantes para las implementaciones reales. Hace mención el artículo de las antenas de grafeno y presentan matrices en microondas

y THz, interruptores plasmónicos, meta-superficies isotrópicas y anisotrópicas, o grafeno RFNEMS.

**[2012] Homayoon Oraizi, Shahram Hedayati**, en el artículo ***Miniaturization of Microstrip Antennas by the Novel Application of the Giuseppe Peano Fractal Geometries***, mencionan las posibilidades y propiedades de la aplicación de la geometría fractal de Giuseppe Peano para la miniaturización de antenas de parche de microbanda y comparan su rendimiento con los de los fractales habituales, como Koch, Tee-Type y Sierpinski. La longitud del perímetro de parche fractal de Giuseppe Peano aumenta, mientras que su área de superficie permanece constante sin ocupar más espacio. En consecuencia, se logra la miniaturización de la antena, el mantenimiento de su ganancia y el aumento de su ancho de banda de frecuencia relativa. La antena propuesta tiene polarización circular en una de sus frecuencias de resonancia, que se realiza produciendo una perturbación en su estructura inicial. Se puede obtener una miniaturización adicional de la antena cortando ranuras en su estructura y su banda ancha se puede lograr colocando un espacio de aire debajo de su parche metálico, y se obtiene una miniaturización más efectiva colocando una tira fractal Giuseppe Peano a lo largo de la antena de parche de microbanda.

**[2013] Parul Dawar, Asok De**, en el artículo: ***Bandwidth Enhancement of RMPA Using 2 Segment Labyrinth Metamaterial at THz***, mencionan la optimización de los parámetros de la antena utilizando metamaterial de laberinto de 2 segmentos incrustado en el sustrato de la antena a alta frecuencia (THz). Ansoft HFSS (High Frequency Structure Simulator) se ha utilizado para diseñar y analizar la antena de parche de microbanda rectangular (RMPA) con una frecuencia de diseño de 9.55 THz y un rango de operación de 8.55 THz a 10.55 THz con RT Duroid ( $\epsilon_r = 2.33$ ) como material de sustrato. Las propiedades magnéticas del resonador laberíntico se han usado para demostrar matemáticamente la refracción negativa. El método de Nicolson Ross Wier (NRW) se ha utilizado para recuperar los parámetros del material del coeficiente de transmisión y reflexión. Tras la incorporación, el ancho de banda se amplía alrededor del 4% y el VSWR mejora en aproximadamente un 1,5%.

**[2014] Ali Azarbar\*, M. S. Masouleh, A. K. Behbahani**, en el artículo: ***A New Terahertz Microstrip Rectangular Patch Array Antenna*** realizan la simulación de diferentes diseños de antena de parche rectangular de matriz de microhertz a terahercios en el rango de 0.5-1 terahercios. Se aplica la técnica de varias capas para descender la profundidad de muesca. Usaron tetrafluoroetileno ( $\epsilon = 2.08$ ) en sustrato homogéneo y lo combinaron con otro material con  $\epsilon = 3.82$  en sustrato de dos capas como material huésped. Para validar resultados que provienen del software comercial Ansoft HFSS que se basan en el método de elementos finitos, utilizaron el método analítico en la frecuencia de funcionamiento (600 GHz). El algoritmo genético usando el método de

mínimos cuadrados les ayudó a optimizar los parámetros geométricos de la matriz, como la línea de alimentación de microbandas y los aspectos de parches rectangulares.

**[2014] S. Ananda, D. Sriram Kumara, Ren Jang Wub, Murthy Chavali**, en el artículo: ***Graphene nanoribbon based terahertz antenna on polyimide substrate***, mencionan el diseño de la antena de parche en terahercios basada en nano cinta de grafeno sobre un sustrato de poliamida con sus características de radiación entre la banda de 725-775 GHz. El sistema de comunicación de terahercios consiste en una mayor transmisión de velocidad de datos, baja potencia de transmisión con comunicación inalámbrica segura. La antena propuesta está compuesta por grafeno nano ribbon como parche radiante y también el plano de tierra separado por un fino sustrato de polimida de 20 m. La antena ha logrado un amplio ancho de banda de impedancia (> 5%) en la banda de operación. El diseño ha producido una ganancia máxima de 5.71dB a 750 GHz. La antena se simula mediante el uso del simulador basado en el método de elementos finitos Ansys - HFSS.

**[2014] Xueyao Ren, Xing Chen, Yufeng Liu, Wei Jin, Kama Huang** en el artículo ***A Stacked Microstrip Antenna Array with Fractal Patches***, proponen una nueva matriz de antenas microstrip, que utiliza parches en forma de fractal de Giuseppe como sus elementos de radiación y adopta una estructura apilada de dos capas para lograr propiedades tanto de banda amplia como de alta ganancia. El estudio paramétrico estima que el tamaño de la antena propuesta puede ajustarse arbitrariamente al cambiar la proporción fractal mientras se mantiene una alta eficiencia de apertura. Se diseñan, fabrican y miden dos prototipos con parches de fractal de 2x2 y 4x4, respectivamente, en cada capa. Tanto la simulación como los resultados de medición demuestran que la antena propuesta posee características alentadoras de banda ancha, alta directividad y alta eficiencia de apertura simultáneamente; por ejemplo, para los dos prototipos, sus anchuras de banda de impedancia de  $S_{11} < -10\text{dB}$  son 23.49% y 18.49%, respectivamente. A una frecuencia de trabajo de 5.8GHz, sus directividades son 12.2 dBi y 18.2 dBi, y sus eficiencias de apertura correspondientes son de hasta 91.0% y 90.5%, respectivamente.

**[2016] Rajni Bala, Anupma Marwaha**, en el artículo: ***Development of computational model for tunable characteristics of graphene based triangular patch antenna in THz regime Radiation Characteristics of Tlinable Graphennas in the Terahertz Band***, mencionan que el procedimiento de diseño presentado en este documento incorpora las propiedades eléctricas y no eléctricas del grafeno para inicializar la conductividad sintonizable que además se acopla al simulador electromagnético para analizar las propiedades de la radiación de la antena de grafeno. El modelado matemático de la antena se realiza utilizando ANSYS Maxwell. Las características ajustables de la antena se validan a partir de pérdidas de retorno y diagramas de radiación. Se logra una eficiencia de radiación suficiente a frecuencias de resonancia en el rango de 1-3 THz. También se analizan las variaciones de la sección transversal de absorción de la antena



debidas a la conductividad de la superficie sintonizable debido a los voltajes de polarización aplicados.

**[2016] Rajni Bala, Anupma Marwaha**, en el artículo: ***Characterization of graphene for performance enhancement of patchantenna in THz region***, diseña una antena de parche cuadrado metálico convencional alimentada por línea de microbanda con transformador de cuarto de onda, la cual está diseñada con grafeno como parche sobre sustrato de dióxido de silicio con un espesor de 1,8  $\mu\text{m}$  y permitividad de  $\epsilon_r = 4$ . El modelo de conductividad del grafeno está formulado con el espesor finito del parche en orden para investigar el efecto de las propiedades del sustrato y el ancho del parche sobre el rendimiento de la antena de parche cuadrado alimentada por microbanda en régimen THz. La frecuencia de resonancia se reduce a medida que el grafeno se estrecha. La geometría de antena propuesta está diseñada y optimizada con una ganancia y directividad de decibelios a 13 THz.

En el desarrollo de la computación demuestra que la miniaturización de la tecnología puede conducir a una revolución, según expresa el comité de la Real Academia de las Ciencias de Suecia [14], que considera que los tres laureados Jean-Pierre Sauvage, el J. Fraser Stoddart y Bernard L. Feringa, han miniaturizado máquinas y han llevado a la química a una nueva dimensión [14]. Esto nos da pie al gran auge que se ha tenido en el ámbito de las nanotecnologías en la época actual. A partir del gran descubrimiento del grafeno se han realizado investigaciones para poder obtener sus propiedades y aplicaciones en las nanotecnologías. Unas de sus aplicaciones del material de grafeno han sido el utilizar este material en las nuevas tecnologías, por ejemplo, en el área de las comunicaciones, específicamente en las antenas.

# Capítulo 2 ANTENAS

En este capítulo se hablará de los conceptos básicos de lo que es una antena, desde las antenas comunes hasta las complejas como son las antenas fractales.

## 2.1 Definición de antena

Es un transductor entre el medio guiado y el medio radiado. Región de transición entre una zona donde existe una onda electromagnética guiada y una onda en el espacio libre, a la que se puede además asignar un carácter direccional. Aquella parte de un sistema transmisor o receptor diseñada específicamente para radiar o recibir ondas electromagnéticas (Figura 2.1) [15]. Es de interés que la antena tenga un buen rendimiento como transmisora/receptora.

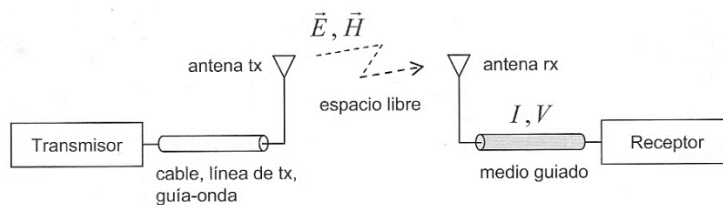


Figura 2.1 Diagrama de una antena.

Las ecuaciones de Maxwell relacionan los campos eléctricos y magnéticos con las cargas y corrientes que los crean. La solución a las ecuaciones da lugar a formas de onda como son:

- Guiadas (líneas de transmisión, guías de ondas).
- Libres en el espacio (antenas).

Las ondas electromagnéticas se caracterizan por su frecuencia ( $f$ ) y longitud de onda ( $\lambda$ ):

$$\lambda = \frac{c}{f} \tag{2.1}$$

Donde:

$c$ : es la velocidad de propagación de la luz en el medio ( $3 \times 10^8$  m/s en el espacio libre).

El conjunto de todas las frecuencias (espectro de frecuencias de la Figura 2.2) se divide en bandas, cada una de las cuales presenta características peculiares que dan origen a tipologías de antenas muy diversas.

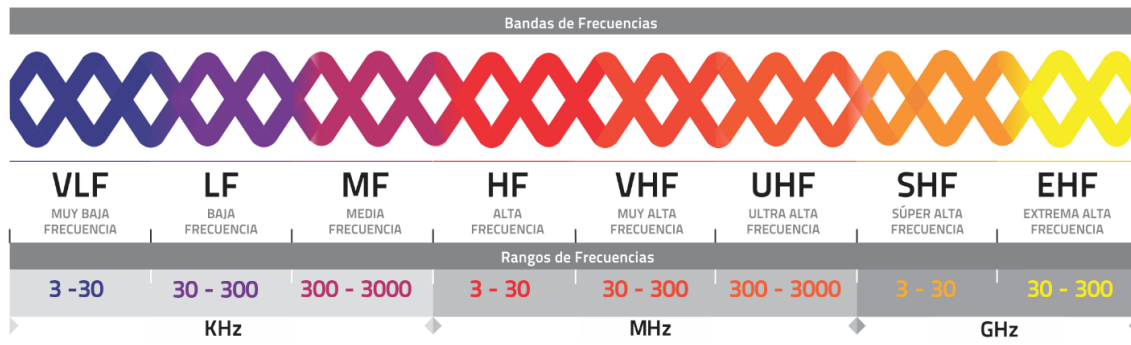


Figura 2.2 Espectro de frecuencias. Imagen obtenida de [16]

La comunicación entre un transmisor y un receptor separados una distancia R puede realizarse mediante [17]:

Una línea de transmisión con pérdidas proporcionales a  $e^{-\alpha R}$ , donde  $\alpha$  es la constante de atenuación de la línea.

Dos antenas con visión directa y con pérdidas proporcionales a  $1/R^2$ .

Son diversos los factores que intervienen a la hora de decidir la utilización de una línea de transmisión o antena, pero de forma general:

- Se utilizan líneas de transmisión para bajas frecuencias y pequeñas distancias.
- Se utilizan antenas para altas frecuencias y largas distancias.

Las ventajas que presentan las líneas de transmisión frente a las antenas son que no están sometidas a interferencias, como sí lo están los sistemas de radio, y que se logra un aumento del ancho de banda extendiendo otra línea. Los inconvenientes de las líneas de transmisión son el elevado costo y el tiempo de infraestructura para enlaces de larga distancia [17].

Algunas de las aplicaciones en las que se utilizan las antenas son:

- Comunicaciones móviles: aviones, barcos, vehículos, naves espaciales.
- Comunicaciones personales: teléfono celular.
- Sistemas de radiodifusión: radio, televisión.
- Comunicaciones radio punto a punto: policía, bomberos.
- Aplicaciones de no comunicación:
  - Sensor remoto: radar, radiometría
  - Industria: microondas

## 2.2 Clasificación según el comportamiento

- ❖ Antenas de banda ancha: cuando las antenas pueden trabajar en un margen muy amplio de frecuencias. Un ejemplo lo tenemos en antenas de bocina para realizar medidas radioeléctricas en cámara anecoica (cámara en la que se miden las antenas y que simula un entorno de espacio libre). Con una bocina podemos cubrir un gran margen frecuencial; por ejemplo, de 800 MHz a 5 GHz, sin necesidad de cambiar de antena.
- ❖ Antenas miniatura: cuando la antena presenta unas dimensiones mucho más pequeñas que la longitud de onda. Veremos que la dimensión de una antena está directamente relacionada con su comportamiento electromagnético. Si se realiza una antena que tiene dimensiones pequeñas en términos de la longitud de onda, sus características se verán alteradas tal y como veremos en el capítulo 3. Las antenas de terminales móviles son un modelo.
- ❖ Antenas multifrecuencia: antenas que pueden operar con unas características muy similares para diferentes sistemas de telecomunicación. Las antenas de estación base y terminales móviles que operan a GSM900 y GSM1800 son casos de antenas multifrecuencia.

## 2.3 Clasificación y tipos de antenas

Las antenas se pueden clasificar de acuerdo con su geometría:

- Antenas lineales o de hilo.
- Antenas de apertura y reflectores.
- Antenas tipo parche o microstrip.

### 2.3.1 Antenas lineales o de hilo

Están construidas a partir de hilos conductores que soportan las corrientes que dan lugar a los campos radiados.

Tienen como elementos radiantes conductores de hilo de sección despreciable respecto de la longitud de onda de trabajo. Se emplean a menudo en las bandas de MF, HF, VHF y UHF. Dentro de las antenas de hilo encontramos los siguientes tipos [18]:

- Dipolo.
- Dipolo en “V”.
- Monopolo vertical.
- Yagi.
- Espira.

- Loop.
- Helicoidal.

### 2.3.2 Antenas de apertura y reflectores

Son excitadas por guías de ondas y utilizan superficies o aberturas para direccionar los campos electromagnéticos, donde concentran la emisión y recepción de su sistema radiante en una dirección formando ángulos sólidos. Algunos tipos serían:

- De bocina.
- De ranura.
- Parabólicas.
- Reflector de esquina.
- Reflector parabólico.
- Lente

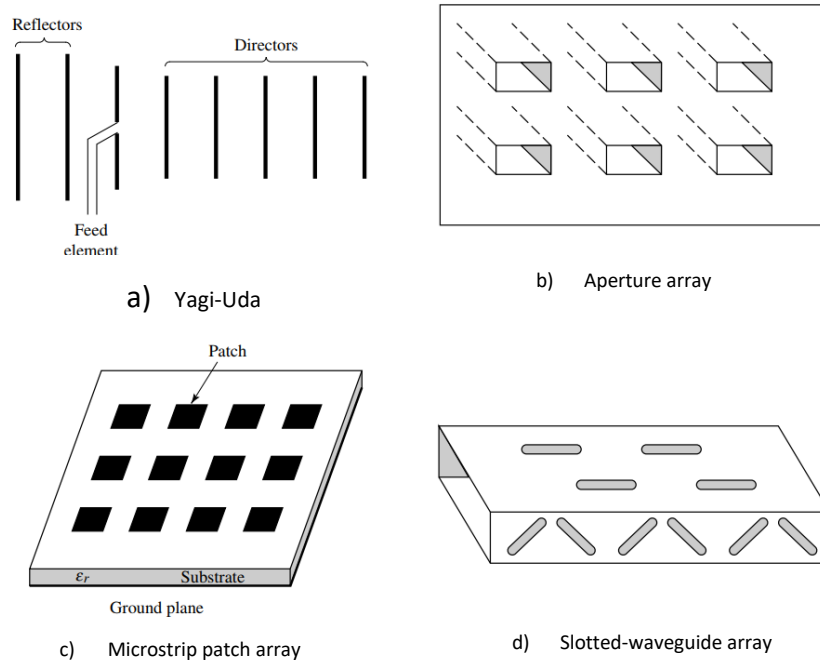
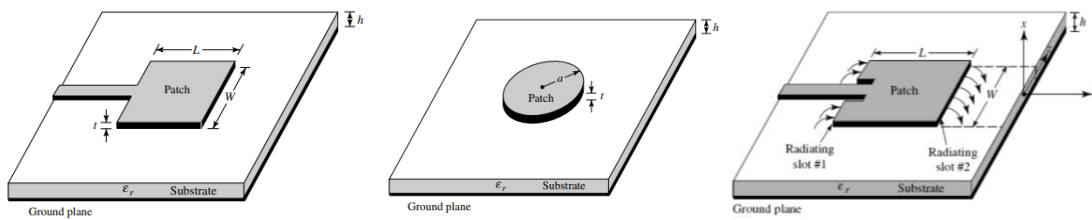


Figura 2.3 Configuraciones típicas [11].

### 2.3.3 Antenas tipo parche o microstrip

Las antenas tipo “parche” son también conocidas como antenas microstrip ya que se basan por su tecnología de microstrip. Su uso tiene un gran auge para aplicaciones en las que el tamaño reducido es importante y para frecuencia elevadas principalmente en los rangos de microondas y ondas milimétricas.

Este tipo de antenas consiste en un parche metálico sobre un sustrato con conexión a tierra



a) Cuadrado

b) Circular

c) Con inserciones

Figura 2.4 Antenas microstrip [11]

El parche metálico puede tomar muchas configuraciones diferentes como se muestra en la Figura 2.4. Los parches rectangulares o circulares y de dimensiones del orden de  $\lambda/2$ , son los más populares debido a la facilidad del análisis y fabricación, y sus atractivas características de radiación. Las antenas de microstrip son de bajo perfil, compatibles con superficies planas y no planas, simples y económicas, los cuales usan tecnología moderna en el momento de su impresión, son muy versátiles en términos de frecuencia de resonancia, polarización de patrón e impedancia. Estas antenas pueden montarse en la superficie de aeronaves, satélites, misiles, automóviles e incluso teléfonos móviles de alto rendimiento [11]. Sus características son [15]:

- Ancho de banda reducido  $\sim 5\%$  (estructura resonante): se puede aumentar al 35% o conseguir funcionamiento en 2 bandas mediante un 2° sustrato.
- Baja eficiencia de radiación (se acumula la energía en la cavidad).
- Estructura delgada.

## 2.4 Parámetros de una antena

- Impedancia.
- Diagrama de radiación.
- Intensidad de Radiación.
- Directividad.
- Ganancia.
- Eficiencia.
- Polarización.

### 2.4.1 Impedancia

La impedancia se define como “la impedancia presentada por una antena en sus terminales o la relación de la tensión a la corriente en un par de terminales o la relación de los componentes apropiados de los campos eléctricos a los magnéticos en un punto” [11].

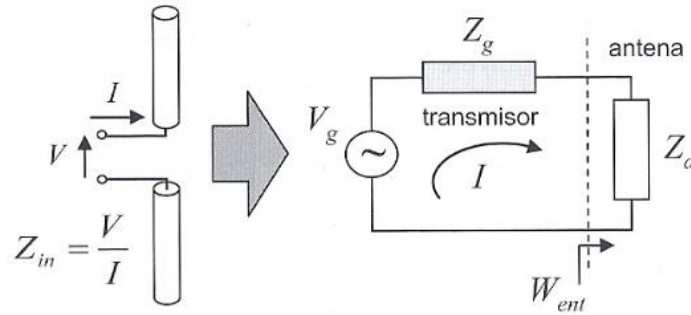


Figura 2.5 Impedancia de una antena [15].

La máxima transferencia de potencia (ad:  $Z_a$ : impedancia de la antena

$R_a$ : resistencia de la antena

$X_a$ : reactancia de la antena

$Z_g$ : impedancia del transmisor

$R_g$ : resistencia del transmisor

$X_g$ : reactancia del transmisor

$$Z_g = Z_a^* \begin{cases} R_g = R_a \\ X_g = -X_a \end{cases}$$

$$Z_g(\omega) = R_g(\omega) + jX_g(\omega)$$

$$Z_a(\omega) = R_a(\omega) + jX_a(\omega)$$

(2.2)

Antena resonante:

$$X_a(\omega_r) = 0 \quad \omega_r: \text{pulsación de resonancia}$$

(2.3)

### 2.4.2 Diagrama de radiación

Es una representación gráfica de las propiedades de radiación de la antena, en función de las distintas direcciones del espacio y a una distancia fija. Suele emplearse un sistema de representación en coordenadas esféricas [15].

$$t(\theta, \phi) = \frac{|E(r, \theta, \phi)|^2}{|E_{m\acute{a}x}(r)|^2} = \frac{P(r, \theta, \phi)}{P_{m\acute{a}x}(r)} = \frac{K(\theta, \phi)}{K_{m\acute{a}x}} \quad (\text{función normalizada}) \quad (2.4)$$

$$0 \leq t(\theta, \phi) \leq 1$$

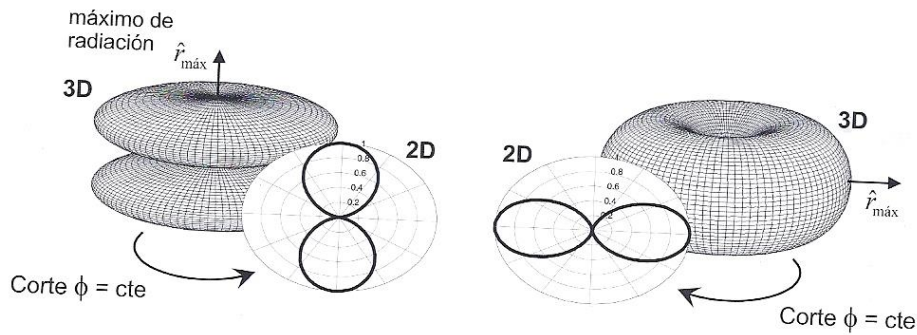


Figura 2.6 Diagrama de radiación.

### 2.4.2.1 Cortes del diagrama de radiación

Plano-E: formado por la dirección de máxima radiación y el vector campo eléctrico.

Plano-H: formado por la dirección de máxima radiación y el vector campo magnético [15].

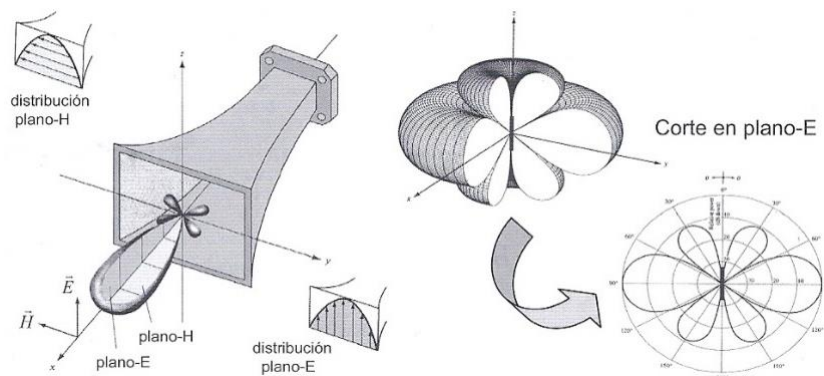


Figura 2.7 Cortes del diagrama de radiación de una antena.

### 2.4.2.2 Parámetros

- ① Lóbulo principal
- ② Lóbulos secundarios
- ③ Lóbulo lateral
- ④ Lóbulo posterior
- ⑤ Ancho de haz a -3dB
- ⑥ Ancho de haz entre nulos

Nivel de lóbulo principal a secundario (NLPS):

$$NLPS(dB) = -10 \log_{10} t(\theta_s)$$

Relación delante/atrás (F/B):

$$F/B(dB) = -10 \log_{10} t(\theta_{m\acute{a}x} + 180^\circ)$$

Interesan valores grandes de NLPS y F/B, pues los lóbulos secundarios de la antena contribuyen a generar interferencias.



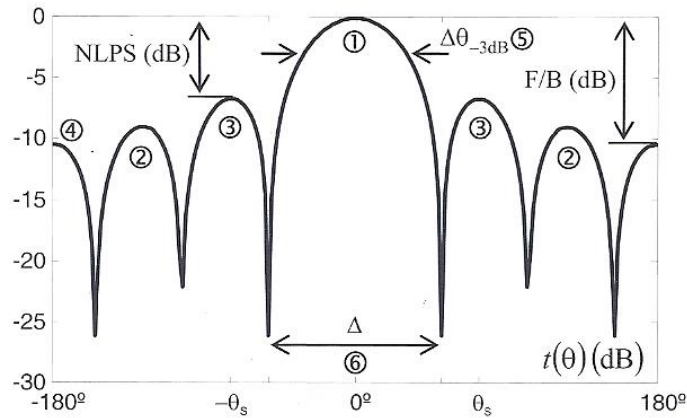


Figura 2.8 Parámetro de diagrama de radiación de una antena.

### 2.4.3 Intensidad de radiación

Es la potencia radiada por unidad de ángulo sólido en una determinada dirección (Figura 2.8). Es independiente de la distancia a la que se encuentra la antena [15].

$$K(\theta, \phi) = P(r, \theta, \phi)r^2 \quad [W/Sr] \quad (2.5)$$

Potencia total radiada:

$$W_{rad} = \iint_{4\pi} K(\theta, \phi)d\Omega \quad (2.6)$$

Antena isotrópica:

$$K_{iso} = \frac{W_{rad}}{4\pi} \quad (\text{no depende de } r, \theta, \phi) \quad (2.7)$$

### 2.4.4 Directividad.

La función de la directividad está en relación entre la densidad de potencia radiada por una antena a una cierta distancia y en una determinada dirección, y la densidad de potencia que radiaría una antena isotrópica con la misma potencia radiada [15]:

$$D = D(\theta_{m\acute{a}x}, \phi_{m\acute{a}x}) = \frac{P_{m\acute{a}x}(r)}{\frac{W_{rad}}{4\pi r^2}} \geq 1 \quad D(\theta, \phi) = Dt(\theta, \phi) \quad (2.8)$$

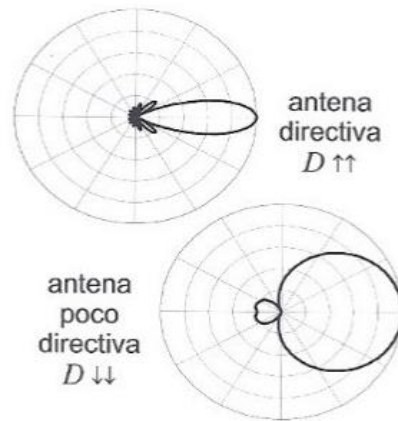


Figura 2.9 Directividad de una antena.

Para una antena isotrópica:  $D = 1$

### 2.4.5 Ganancia.

La función de la ganancia es muy parecida a la función de directividad, excepto que tiene en cuenta la potencia entregada a la antena en lugar de la potencia radiada.

$$G(\theta, \phi) = \frac{P(r, \theta, \phi)}{\frac{W_{ent}}{4\pi r^2}} = \eta_t D(\theta, \phi)$$

Normalmente suele definirse este parámetro en lugar de la directividad, ya que es el que puede medirse en el laboratorio.

$$G(\theta, \phi) = G_t(\theta, \phi) \rightarrow G = \eta_t D$$

### 2.4.6 Eficiencia.

La eficiencia de una antena se puede obtener a partir de las resistencias de radiación y óhmicas, teniendo en cuenta que es la relación entre la potencia total radiada y la potencia entregada a la antena.

En una antena de alta eficiencia la mayor parte de la energía presente en la entrada de la antena es irradiada. Una baja eficiencia de antena tiene la mayoría de la potencia absorbida en pérdidas dentro de la antena.

$$\eta = \frac{W_t}{W_e} = \frac{W_t}{W_t + W_\Omega} = \frac{I^2 R_r}{I^2 (R_r + R_\Omega)} = \frac{R_r}{R_r + R_\Omega} \quad (2.9)$$

### 2.4.7 Polarización.

Es la polarización de una onda electromagnética (Figura 2.10), al transcurrir el tiempo, por el extremo del vector campo eléctrico en un punto fijo del espacio en el plano perpendicular a la dirección de propagación. Para ondas con variación temporal sinusoidal, esa figura es en general una elipse [15].

$$\vec{E}(z, t) = \text{Re}[(a\hat{x} + b\hat{y})e^{-i(\omega t - kz)}] \begin{cases} E_x(z, t) = |a| \cos(\omega t - kz + \phi_a) \\ E_y(z, t) = |b| \cos(\omega t - kz + \phi_b) \end{cases} \quad (2.10)$$

$$a = |a|e^{j\phi_a}, b = |b|e^{j\phi_b}$$

$\omega$ : pulsación de la onda

$k$ : constante de propagación

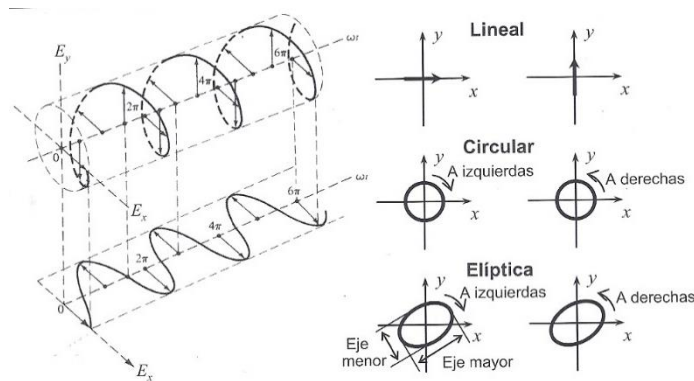


Figura 2.10 Polarización de una onda electromagnética de una antena.

La polarización de una antena en una dirección es la de la onda radiada por ella en dicha dirección. La radiación en una polarización especificada se denomina polarización de referencia o copolar, mientras que a la radiación en la polarización ortogonal se le conoce como polarización cruzada.

## 2.5 Métodos de análisis de una antena

El problema de análisis de antenas en términos generales trata de resolver las ecuaciones de Maxwell, con unas condiciones de contorno determinadas: los conductores dieléctricos de los que está formada la antena. Para estructuras de antena sencilla como las antenas tipo cable, dipolos, monopolos, los métodos analíticos son suficientes. Cuando la antena tiene una forma compleja o si el medio que la rodea presenta características como anisotropía, no-homogeneidad, etc., la resolución del problema por métodos analíticos puede ser muy complicada y, en ocasiones, imposible. Entonces hay que recurrir a los métodos numéricos. Existe un campo muy extenso y muy

atractivo tanto para investigación básica como para desarrollo de software electromagnético. Entre los métodos más conocidos encontramos el MoM (método de los momentos), FDTD (Finite Difference Time Domain) y FEM (Finite Element Method). El uso de los métodos numéricos requiere un profundo conocimiento de electromagnetismo y una fuerte carga matemática. Utilizaremos el método FDTD para comprender de una manera más física el fenómeno de la radiación electromagnética [17].

## 2.6 Antenas de banda ancha y multifrecuencia

### 2.6.1 Antenas fractales

Las antenas fractales se basan en el concepto de un fractal, que es una geometría generada recursivamente que tiene dimensiones fraccionarias, como fue pionera y avanzada por Benoit B. Mandelbrot. Mandelbrot acuñó el término fractal e investigó la relación entre los fractales y la naturaleza utilizando descubrimientos hechos por Gaston Julia, Pierre Fatou y Felix Hausdorff. Pudo demostrar que existen muchos fractales en la naturaleza y que se pueden usar para modelar con precisión ciertos fenómenos. Además, pudo introducir nuevos fractales para modelar estructuras más complejas, incluidos árboles y montañas, que poseen una autosimilitud inherente y auto-afinidad en su forma geométrica [11].

Los conceptos Fractal se han aplicado a muchas ramas de la ciencia y la ingeniería, incluida la electrodinámica fractal para la radiación, la propagación y la dispersión. Estos conceptos fractales se han extendido a la teoría y diseño de antenas, y han habido muchos estudios e implementaciones de diferentes elementos y matrices de antenas fractales.

Los fractales pueden clasificarse en dos categorías: **deterministas** y **aleatorios**. Determinísticos, como **loop** de Von Koch y las juntas de Sierpinski, son aquellos que se generan de varias copias reducidas y giradas de sí mismos. Dichos fractales se pueden generar usando gráficos de computadora que requieren un mapeo particular que se repite una y otra vez usando un algoritmo recursivo. Los fractales aleatorios también contienen elementos de aleatoriedad que permiten la simulación de fenómenos naturales [11].

Las geometrías fractales pueden describirse y generarse mejor utilizando un proceso iterativo que conduce a estructuras auto similares y de auto-afinidad. El proceso puede ser ilustrado gráficamente como se muestra para las dos geometrías diferentes en la (Figura 2.11) (a, b). La Figura 2.11(a) muestra lo que se conoce como el fractal de la isla de Minkowski, mientras que la Figura 2.11 (b) ilustra el lazo fractal de Koch. El proceso

de generación de la geometría de un fractal comienza con una geometría básica a la que se refiere como el iniciador, que en la Figura 2.11 (a) es un cuadrado Euclidiano mientras que la de la Figura 2.11(b) es un triángulo Euclidiano.

La tendencia de la geometría de la antena fractal se puede deducir observando varias iteraciones del proceso. La geometría fractal final es una curva con una estructura subyacente infinitamente intrincada de modo que, sin importar qué tan cercana se vea la estructura, los elementos fundamentales no se pueden diferenciar porque son versiones escaladas del iniciador. Las geometrías fractales se utilizan para representar estructuras en la naturaleza, como árboles, plantas, cordilleras, nubes, olas, etc. Se muestran geometrías fractales generadas matemáticamente de plantas en la Figura 2.12.

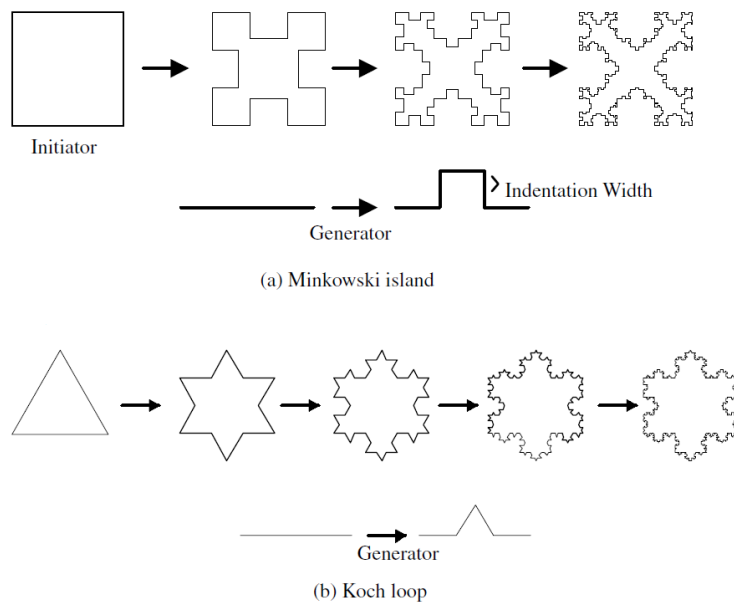


Figura 2.11 Proceso iterativo de generación de fractales [11].



Figura 2.12 Fractales que se usan en la naturaleza.

Otro tipo de antena fractal de iteración es el parche peano fractal Giuseppe. Su procedimiento recursivo se muestra en la Figura 2.13 . El Peano Giuseppe, parte de un segmento con una longitud  $f_2$  y permite su parte central con longitud  $f_1$  para dividir en dos secciones en zigzag; eso se construye iterativamente mediante el crecimiento de nuevas secciones de zigzag que tienen una relación de longitud específica  $n = \frac{f_2}{f_1}$  con respecto a su sección principal. Cuando el peano fractal se aplica a los bordes del parche cuadrado, este parche fractal con diferentes secciones resuena a diferentes frecuencias que juntas forman una amplia banda de frecuencia de trabajo.

PARCHE PEANO FRACTAL

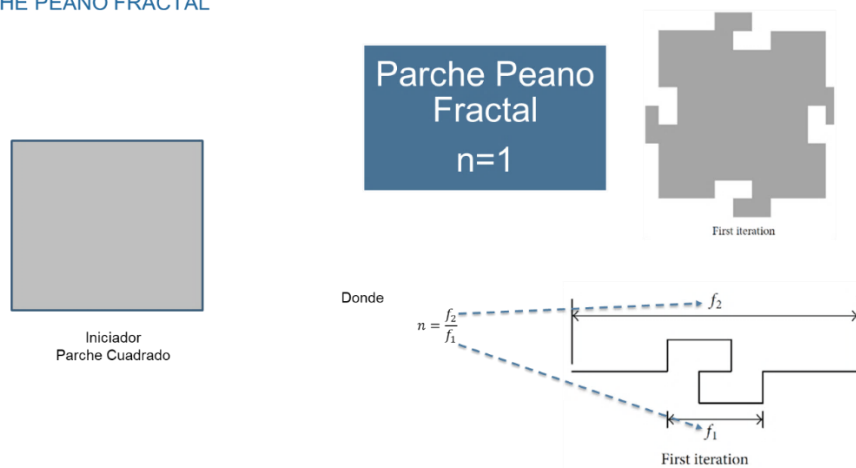


Figura 2.13 Parche Peano Fractal iteración 1.

# Capítulo 3 **GRAFENO**

En este capítulo se explicará de forma básica las propiedades del grafeno, así como su estructura y sus aplicaciones.

## **3.1 Grafeno**

El grafeno es un nanomaterial de gran interés por parte de diferentes áreas de investigación debido a sus propiedades disímiles en comparación de los macromateriales, que ha incursionado ampliamente dentro de las nuevas nanotecnologías. El grafeno no es un material novedoso en cuanto a su composición. Pero sí es nuevo y revolucionario respecto a su estructura, tanto por la disposición y ordenación de los átomos de carbono que lo forman, como por poseer el espesor de un solo átomo (monocapa). En la parte de nanomaterial es el nombre genérico para referirse a las partículas cuya dimensión es menor o igual a una millonésima de milímetro en una de sus dimensiones. Los nanomateriales pueden obtenerse a partir de diferentes elementos o compuestos químicos. El grafeno, por ejemplo, es carbono puro, concretamente es una forma alotrópica del carbono, es decir, una forma en la que se presenta el carbono, al igual que otras formas alotrópicas son el grafito o el diamante [19].

La estructura electrónica del grafeno es bastante diferente de los materiales tridimensionales usuales. La superficie de Fermi se caracteriza por seis conos dobles (Figura 3.1). En el grafeno intrínseco (no dopado), el nivel de Fermi está situado en los puntos de conexión de estos conos. Dado que la densidad de los estados del material es cero en ese punto, la conductividad eléctrica del grafeno intrínseco es bastante baja y es del orden de la conductancia cuántica  $\sigma \sim e^2/h$ . Sin embargo, el nivel de Fermi puede cambiarse mediante un campo eléctrico, de modo que el material se vuelva n-dopado (con electrones) o p-dopado (con agujeros) dependiendo de la polaridad del campo aplicado. El grafeno también puede doparse absorbiendo, por ejemplo, agua o amoníaco en su superficie. La conductividad eléctrica del grafeno dopado es potencialmente bastante alta, a temperatura ambiente puede ser incluso mayor que la del cobre [20].

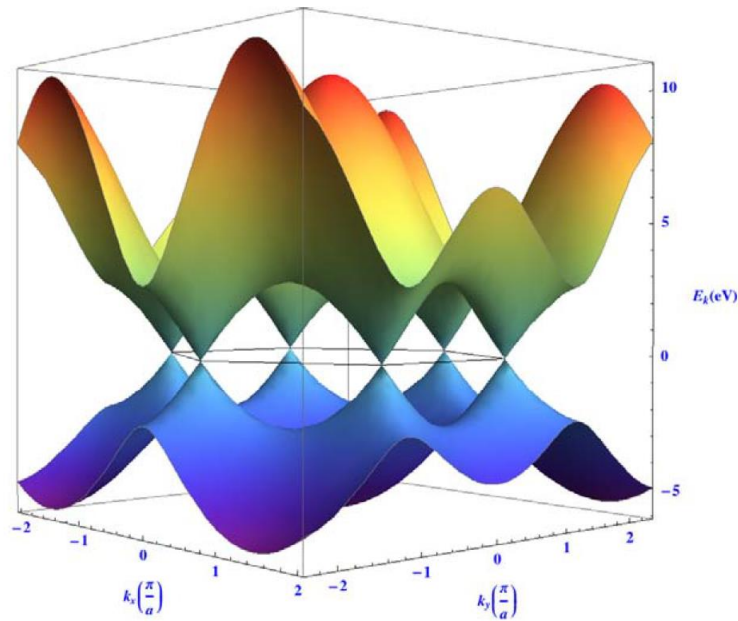


Figura 3.1 Superficie de Fermi. Imagen obtenida de [20]

Cerca del nivel de Fermi, la relación de dispersión para electrones y agujeros es lineal. Dado que las masas efectivas están dadas por la curvatura de las bandas de energía, esto corresponde a una masa efectiva igual a cero. La ecuación que describe las excitaciones en el grafeno es formalmente idéntica a la ecuación de Dirac para los fermiones sin masa que viajan a velocidad constante. Por lo tanto, los puntos de conexión de los conos se llaman puntos Dirac. Esto da lugar a interesantes analogías entre el grafeno y la física de partículas, que son válidas para energías de hasta aproximadamente 1 eV, donde la relación de dispersión comienza a ser no lineal. Un resultado de esta relación de dispersión especial es que el efecto Hall cuántico se vuelve inusual en el grafeno, como se muestra en la Figura 3.2.

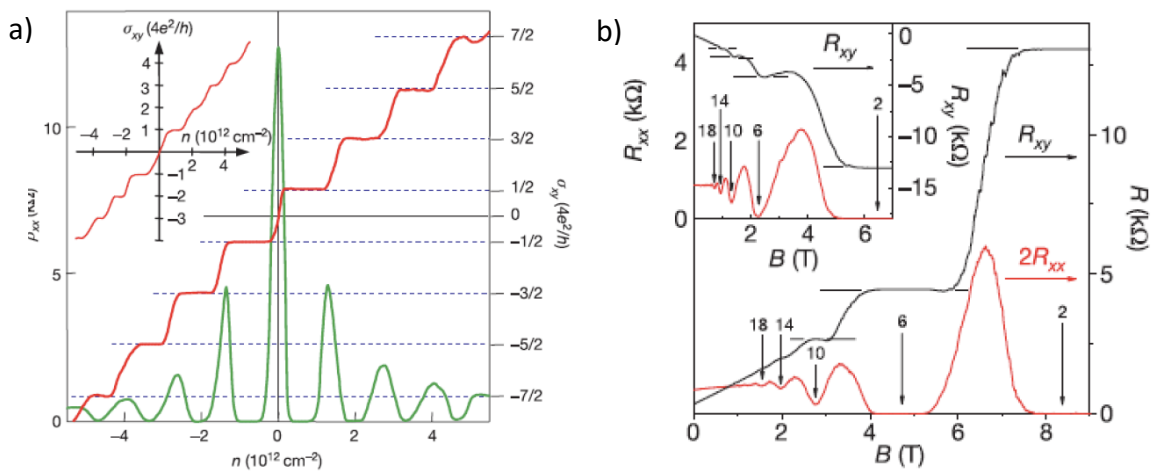


Figura 3.2 . a) La conductividad de Hall (roja) y la resistividad longitudinal (verde) en función de la densidad de portadora. b) La resistencia longitudinal y de Hall en función de la densidad de flujo magnético para una muestra dopada con electrones. Imagen obtenida de [20]



La energía  $E$  (Figura 3.2), para las excitaciones del grafeno en función de los números de onda,  $k_x$  y  $k_y$ , en las direcciones  $X$  y  $Y$ . La línea negra representa la energía de Fermi para un cristal de grafeno no dopado. Cerca de este nivel de Fermi, el espectro de energía se caracteriza por seis conos dobles donde la relación de dispersión (energía versus momento)  $\hbar k$  es lineal. Esto corresponde a excitaciones sin masa [20].

Se puede observar la forma experimental del inusual efecto Hall cuántico del grafeno en la Figura 3.2 a) donde la conductividad Hall (roja) y la resistividad longitudinal (verde) en función de la densidad de portadora. También en la Figura 3.2 a) muestra la conductividad Hall para el grafeno de dos capas teniendo en cuenta que el espaciado entre mesetas para el grafeno es  $4e^2/h$ , es decir, más grande que para el efecto Hall cuántico habitual y que se producen a múltiplos de mitad de enteros de este valor. Para una bicapa de grafeno, la altura es la misma, pero los espacios ocurren a múltiplos enteros de  $4e^2/h$ , pero sin llegar a densidad cero. En la Figura 3.2 b) se muestra la resistencia longitudinal y de Hall como función de la densidad del flujo magnético para un electrón de la muestra dopada.

De esta forma, lograron medir tanto la resistencia (longitudinal) como la resistencia Hall. Una pieza importante de datos fue el efecto de campo ambipolar donde la resistencia se midió como una función de un campo eléctrico aplicado perpendicularmente a la muestra. La resistividad de la hoja tiene un máximo claro y cae a ambos lados del máximo. Esto indica un aumento de dopaje de electrones a la derecha y de agujeros a la izquierda del máximo, teniendo en cuenta que la resistividad máxima de la hoja es  $\sim 9 \text{ k}\Omega$ , que es del orden de la cantidad de resistencia.

Andre Geim, Konstantin Novoselov y sus colaboradores de la Universidad de Manchester (Reino Unido), y el Instituto de Tecnología Microelectrónica en Chernogolovka (Rusia) presentaron sus resultados sobre las estructuras de grafeno. Publicaron sus resultados en octubre de 2004. En este documento describieron la fabricación, identificación y caracterización de la microscopía de fuerza atómica (AFM) del grafeno. Utilizaron un método de exfoliación mecánica simple pero efectiva para extraer capas finas de grafito de un cristal de grafito con cinta adhesiva y luego transfirieron estas capas a un sustrato de silicio. Este método fue sugerido y probado por primera vez por el grupo de R. Ruoff que, sin embargo, no pudieron identificar ninguna monocapa. El grupo de Manchester logró utilizar un método óptico con el que fueron capaces de identificar fragmentos formados por solo unas pocas capas. En la Figura 3.3 se muestra una imagen de AFM (microscopía de fuerza atómica) de una de sus muestras. En algunos casos, estos copos estaban formados por una sola capa, es decir, se identificó grafeno. Además, lograron modelar muestras que contienen solo unas pocas capas de grafeno en una barra Hall y conectar los electrodos a ella.

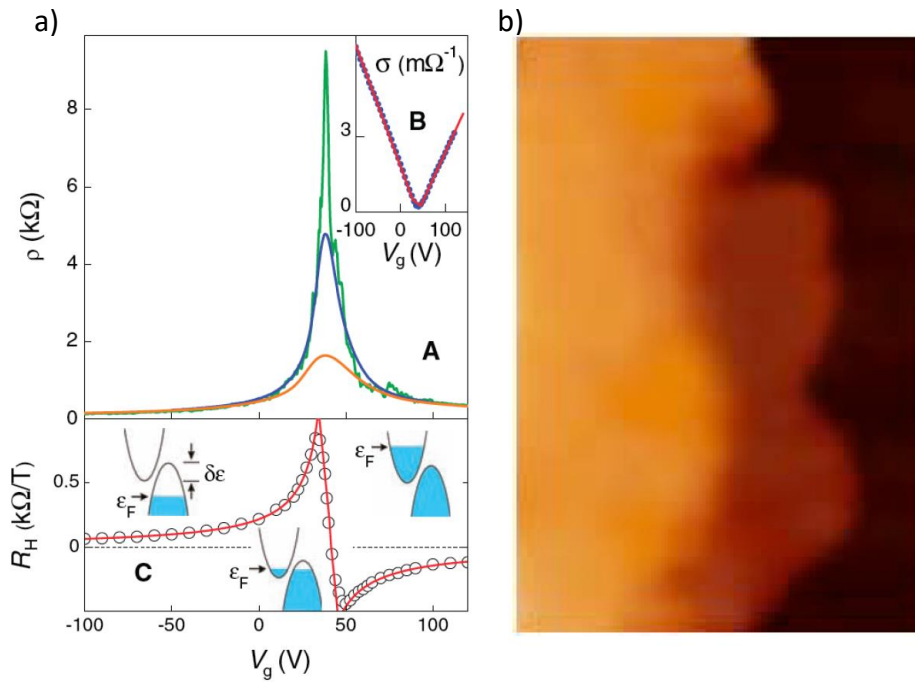


Figura 3.3 Microscopía de fuerza atómica (AFM) del grafeno. Imagen obtenida de [20]

En la Figura 3.3 a), se muestra **(A)** la resistividad (longitudinal) de unas pocas capas de muestra de grafeno para tres temperaturas diferentes (5K verde, 70K azul, 300K naranja), tenga en cuenta la dependencia ambipolar del voltaje de la compuerta, y la conductancia **(B)** como una función del voltaje de la compuerta a 77K, y la resistividad de Hall **(C)** como voltaje de puerta de función para la misma muestra. En la Figura 3.3 b), se muestra la imagen de microscopía de fuerza atómica (AFM) de una monocapa de grafeno. El área negra es el sustrato, la naranja oscura es una mono capa de grafeno y tiene un grosor de  $\sim 0.5\text{nm}$ , la parte naranja brillante contiene algunas capas y tiene un grosor de  $\sim 2\text{nm}$ .<sup>23</sup>

### 3.2 Propiedades del grafeno.

El grafeno por definición posee unas características muy interesantes, algunas absolutamente asombrosas. Además de su extremada delgadez, lo que le hace ser transparente y al mismo tiempo muy flexible, es uno de los materiales más duros y resistentes. El grafeno también es transcendental por las increíbles propiedades térmicas, electrónicas, ópticas y mecánicas que presenta. Estas propiedades junto a la abundancia de carbono en la naturaleza han hecho al grafeno ganarse el sobrenombre de “material del futuro” o “material de Dios”. El grafeno posee propiedades las cuales

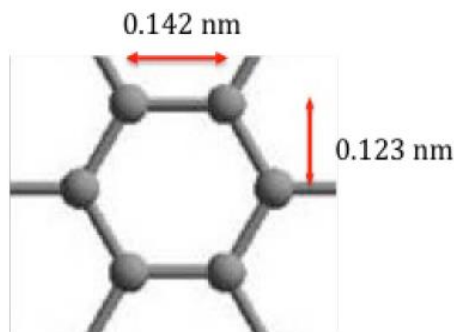


Figura 3.4 Celda hexagonal del grafeno.

se obtuvieron de la referencia [19] y se tomaron para darle las propiedades al material en las simulaciones en COMSOL y MATLAB que se usó en las antenas tanto la del parche cuadrado como el fractal. Las propiedades son las siguientes:

**a) Bidimensional**

El grafeno se considera un material bidimensional debido a que está compuesto de finísimas capas de un átomo de espesor, con lo que prácticamente solo se aprecian dos de sus dimensiones. Para hacernos una idea más real, estaríamos hablando de que es unas 100.000 veces más delgado que el cabello humano.

**b) Ligero**

El grafeno es un material ultraligero. Una lámina de grafeno de 1 metro cuadrado pesa solo 0,77 miligramos, lo que, en comparación con el acero (con la misma superficie), supondría un peso 200 veces menor con respecto al acero. Sin embargo, tiene una gran superficie específica de 2600 m<sup>2</sup>/g, lo que le confiere cierta capacidad de auto enfriamiento que a pesar de su resistencia, lo hace extremadamente ligero y flexible.

**c) Flexible**

El grafeno es flexible, elástico, maleable. Su constante elástica es enorme, tanto que una lámina de grafeno puede estirarse un 10% de su tamaño normal de forma reversible y puede doblarse hasta un 20% sin sufrir daño alguno, al mismo tiempo que puede enrollarse sobre sí misma para crear nanotubos o adoptar cualquier otra forma.

**d) Duro y resistente**

El grafeno es un material que supera la dureza del diamante y es más de 100 veces más fuerte y resistente que el acero estructural con su mismo espesor. El acero por ejemplo tiene una resistencia a la rotura en el rango de 250-1200 MPa = 0.25-1.2x10<sup>9</sup> N/m<sup>2</sup>. El grafeno es altamente rígido, con lo que soporta grandes fuerzas sin apenas deformarse. Tiene una resistencia mecánica de 42 N/m (tensión de rotura), mientras que una lámina del acero más resistente y del mismo espesor que el grafeno (que puede tomarse como 3.35Å=3.35x10<sup>-10</sup> m, es decir, el grosor de la capa en grafito), tendría aproximadamente una resistencia a la rotura 2D de 0.084-0.40 N/m [20]. Se estima que para atravesar una lámina de grafeno con un objeto afilado sería necesario aplicar un peso sobre él de aproximadamente cuatro toneladas.

**e) Transparente**

En cuanto a propiedades ópticas, el grafeno puro es prácticamente transparente, similar al vidrio, debido a su poco espesor. Una monolámina de este material absorbe solamente un ~2,3% de luz blanca incidente que llega a su superficie. La absorción de

luz se incrementa conforme aumenta el número de láminas de grafeno que se superponen (esto es, cuantas más láminas compongan el grafeno, menos transparente es).

**a) Conductor térmico y eléctrico**

El grafeno es el mejor conductor térmico que se conoce y también un excelente conductor eléctrico. Su conductividad térmica es de 5,000 W/mK, mayor que la del cobre, el diamante o la plata, lo que le permite disipar el calor y soportar intensas corrientes eléctricas sin calentarse. Por otro lado, el grafeno conduce la electricidad tan bien como el cobre: su conductividad eléctrica es  $0.96 \times 10^6 \text{ } (\Omega \cdot \text{m}^{-1})$ , mientras que la del cobre es de  $0.60 \times 10^6 \text{ } (\Omega \cdot \text{m}^{-1})$  y la del silicio  $4.5 \times 10^{-4} \text{ } (\Omega \cdot \text{m}^{-1})$ .

**b) Híbrido entre semiconductor y metal**

Una forma de clasificar los materiales según lo bien que conduzcan la electricidad es en: conductores, semiconductores y aislantes. El grafeno no es ninguna de las tres, sino que comparte características de los conductores y los semiconductores.

A nivel cuántico, debido a su disposición espacial y al tipo de enlace entre los carbonos que lo componen, los SPP (Superficie de Plasmones Polarizados) se desplazan sobre la superficie del grafeno a una velocidad sin precedentes en ningún otro material, comportándose como partículas sin masa conocidas como fermiones de Dirac (al igual que los fotones y los fermiones), y la relación resultante entre la energía y su momento es lineal.

Se mueven a una velocidad 300 veces menor que la de la luz, pero mayor que la de los electrones de los metales de forma analogía con respecto a los SPP. Al aumentar su velocidad y eficiencia, el grafeno se calienta menos y necesita menos energía (es decir, consume menos electricidad) que el silicio para realizar la misma tarea. Esto permite que en un pequeño trozo de grafeno se puedan realizar experimentos que hasta ahora solo podían hacerse en aceleradores de partículas. Por estas razones, el grafeno no puede clasificarse ni como un semiconductor ni como un metal. Es un híbrido entre ambos materiales que posee las mejores propiedades de los dos.

**c) Soporta la radiación ionizante**

Estudios recientes también han demostrado que el grafeno tiene una alta reactividad química y que, al incidir la luz sobre él, emite energía (por la promoción de electrones) pero sin llegar a ionizarse (es decir, el átomo no llega a desprenderse del electrón), por lo que es capaz de soportar la radiación ionizante. La radiación ionizante tiene aplicación en campos como el sanitario, se utilizan aparatos que emiten estas radiaciones, como en sistemas de radioterapia, etc.

**d) Multiplicador de frecuencias**

El grafeno es multiplicador de frecuencias. Si se le aplica una señal eléctrica de cierta frecuencia, el grafeno genera otra onda del doble o triple de frecuencia, por lo que permite trabajar a frecuencias de reloj mucho más altas que las actuales y aumentar así la velocidad y el intercambio de información de los procesadores.

**e) Denso e impermeable**

A todas las ventajas mencionadas hasta ahora tuvieron que añadirle su condición de impermeable. El grafeno es muy denso, incluso resistente a la penetración de las moléculas del gas helio, las más pequeñas que existen. Sin embargo, sí deja pasar el agua, la cual, encerrada en un recipiente de grafeno, muestra una velocidad de evaporación similar a la que muestra en un recipiente abierto.

La unidad de la celda hexagonal de grafeno (Figura 3.4) contiene dos átomos de carbono y tiene un área de  $0.052 \text{ nm}^2$ . Podemos calcular su densidad como  $0.77 \text{ mg/m}^2$ . Una hamaca hipotética que mide  $1\text{m}^2$  hecha de grafeno pesaría así  $0.77 \text{ mg}$ .

**f) Bactericida**

Es un material bactericida, capaz de inhibir el crecimiento de microorganismos como bacterias, virus y hongos, pero que, sin embargo, no afecta al ADN humano y, por ser carbono, se ha demostrado que permite el crecimiento de células, lo que lo convierte en un sustrato con un potencial muy interesante para la medicina regenerativa o para la industria alimentaria.

**g) Biocompatible**

Los estudios in vivo que se han realizado sobre la toxicidad del grafeno, todos ellos en poblaciones de ratas por inyección intravenosa e intratraqueal, han revelado que el óxido de grafeno no reporta toxicidad aparente para las células biológicas en concentraciones bajas y medias ( $0,1 \text{ mg}$  y  $0,25 \text{ mg}$ ), mientras que las dosis altas ( $0,4 \text{ mg}$ ) mostraron toxicidad crónica, pues aproximadamente 4 de 9 ratones murieron.

Concluyeron en la referencia [19], que el grafeno puede ser dañino para la salud cuando está sin funcionalizar debido a los residuos derivados de su producción. Sin embargo, ya oxidado y funcionalizado, tiene efectos de estrés oxidativo, y es menos viable a medida que sus dosis y su concentración son más altas.

**h) Reacciona con otras sustancias**

El grafeno es sensible a cualquier molécula que se deposite en su superficie y puede reaccionar con otras sustancias para formar composites con diferentes propiedades, lo que dota a este material de gran potencial de desarrollo.

**i) Autorreparable**

Otras características, todavía en investigación y discusión, son la capacidad de autoenfriamiento y la capacidad de autorreparación. Al parecer, si una capa de grafeno pierde algunos átomos de carbono por cualquier motivo, los átomos cercanos al hueco dejado se acercan y cierran dicho hueco. Esta capacidad de autorreparación podría aumentar la longevidad de los materiales fabricados con grafeno, aunque de forma limitada.

### **3.3 Estructura del grafeno**

Que el grafeno tenga el espesor de un átomo (monocapa) significa que es extremadamente fino (estaríamos hablando de 0.0000000001 metros, o bien, 0.0000001 milímetros), de modo que parece que solo posee las otras dos dimensiones: la longitud y la anchura, puesto que la tercera, la altura, es tan sumamente pequeña que parece no existir. De ahí que se le considere un material bidimensional. El único material bidimensional que es capaz de mantenerse estable hasta con el grosor de un átomo [19].

Podemos decir que es grafeno si comprende desde una capa de un átomo de espesor hasta 10 de estas capas superpuestas. Si lo observáramos a través de un microscopio, veríamos cómo estos átomos de carbono permanecen ordenados en forma de hexágonos planos, fuertemente enlazados y dispuestos en una superficie uniforme de ligera ondulación, con una apariencia que recuerda a la de un panal de abejas [19].

Según las capas que lo conformen, el grafeno puede ser clasificado en tres tipologías: monocapa (1 capa), bicapa (2 capas), pocas capas (de 3 a 4 capas) y multicapa (entre 5 y 10 capas). Aunque sus propiedades están en función de su dimensionalidad, los cuatro tipos presentan un conjunto de propiedades comunes que permiten caracterizarlos como grafeno [19].

El grafeno es el precursor de muchas otras formas de carbono, es la unidad elemental básica en 2D para construir todos los materiales gráfiticos de las demás dimensiones. En la Figura 3.5 se muestran las diferentes representaciones de capas del carbono; por ejemplo, si las capas de átomos de carbono las envolvemos a modo de forro de un balón, arqueadas en estructuras de cero dimensiones (0D), obtenemos fullerenos; si las

enrollamos cilíndricamente en estructuras 1D, darán lugar a los nanotubos; finalmente, si superponemos más de 10 capas tridimensionalmente (3D), obtendremos el grafito.

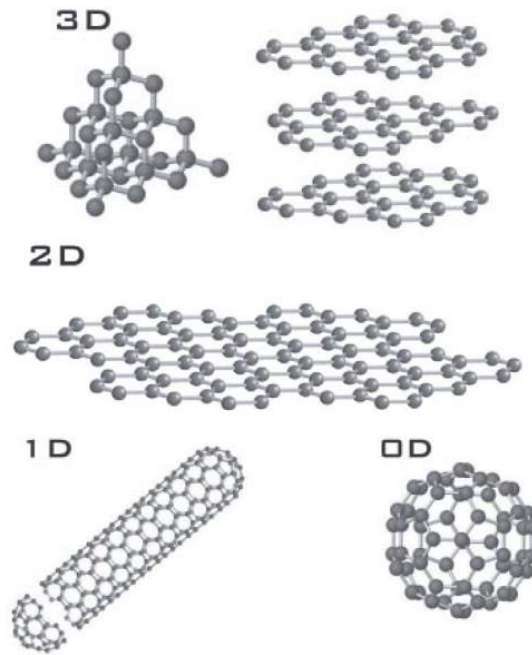


Figura 3.5 Formas alotrópicas del carbono. Diamante y grafito (3D); grafeno (2D); nanotubos (1D); furellenos (0D). Imagen obtenida de [1].

Dada la configuración de panal de abeja a partir de su geometría hexagonal se desprenden propiedades electrónicas, mecánicas y químicas excepcionales del grafeno en la relación de sus átomos se muestra en la Figura 3.6.

En las coordenadas X y Y (Figura 3.6), los vectores unitarios del espacio real  $\vec{a}_1$  y  $\vec{a}_2$  de la configuración hexagonal es expresada como

$$\vec{a}_1 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2} a, \frac{a}{2} \right) \quad \vec{a}_2 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2} a, -\frac{a}{2} \right) \quad (3.1)$$

donde  $a = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = 1.42 \times \sqrt{3} = 2.46A$  es la constante de la configuración del grafeno.

Analógicamente, los vectores unitarios  $\vec{b}_1$  y  $\vec{b}_2$ , de la red recíproca están dados por

$$\vec{b}_1 = \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right) \quad \vec{b}_2 = \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right) \quad (3.2)$$

Correspondiente a una constante de  $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$  en el espacio recíproco. Los tres puntos de alta simetría  $\Gamma$ , K y M forman un triángulo que se utiliza para calcular las relaciones de dispersión de energía.

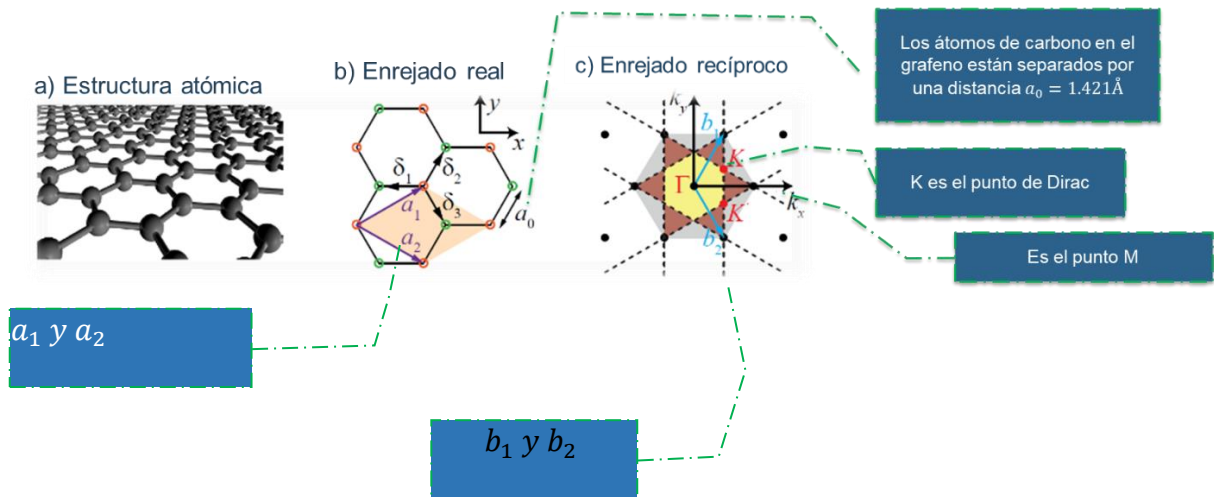


Figura 3.6 a) estructura del grafeno. bidimensional. b) enrejado real y c) enrejado recíproco.

Primera zona de Brillouin (Figura 3.6) asociada a la red de panal. Se bosquejan los vectores de la red recíproca y la localización de las direcciones cristalográficas, donde K se conoce como punto de Dirac. Las direcciones cristalográficas en el espacio recíproco, están dadas por [21]:

$$\begin{aligned}
 \Gamma &= (0, 0) , \\
 \mathbf{M} &= \frac{2\pi}{3a}(1, 0) , \\
 \mathbf{K} &= \frac{2\pi}{3a}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) ,
 \end{aligned}
 \tag{3.3}$$

Debido también a los hexágonos del grafeno en forma de panel de abeja, éstos dan lugar a bandas de niveles de energía que tienen forma de dos conos que se tocan por el vértice. Los electrones que están cerca del vértice se comportan como partículas sin masa que viajan a la velocidad de la luz, como los fotones, en dos dimensiones. Estas partículas relativistas, como se las llama, se describen por la misma ecuación, la ecuación de Dirac; por eso a estos electrones se les llama de Dirac (Figura 3.7).

Pero en el caso del grafeno la descripción de los electrones como relativistas no es del todo perfecta. Esto se debe a que las bandas cerca de los vértices sufren una distorsión por la misma presencia de los electrones, es lo que se llama el efecto espín-órbita.



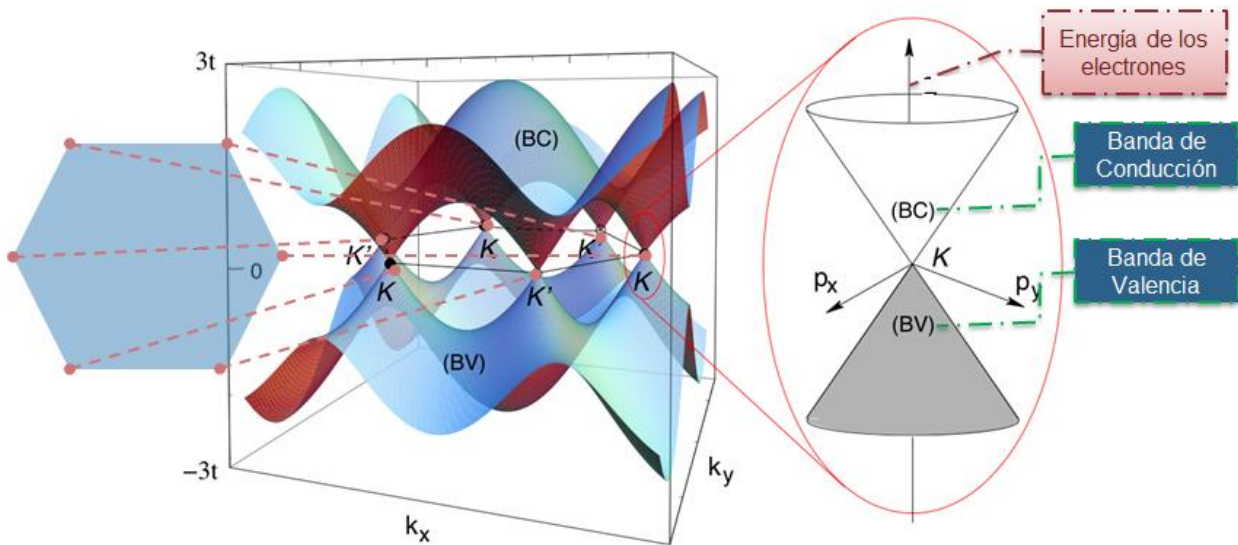


Figura 3.7 Relación de dispersión de la red de panal, mostrando el cono de Dirac en una esquina de la primera zona de Brillouin.

### 3.4 Aplicaciones del grafeno

Las aplicaciones del grafeno debido a sus propiedades, tienen amplias áreas en las cuales se pueden hacer uso del grafeno.

Para poder hacernos una idea de en cuántos campos distintos puede aplicarse el grafeno, basta con echar un vistazo a nuestro alrededor. Ordenadores, coches, teléfonos móviles y equipos de música son, por mencionar sólo algunos de ellos, cosas que encontramos frecuentemente en nuestra vida cotidiana en las que el grafeno se podría llegar a aplicar.

Por sus propiedades, el grafeno puede servir como material en la fabricación de aviones, satélites espaciales o automóviles, haciéndolos más seguros. También en la construcción de edificios, pues los convertiría en más resistentes.

Pero, sobre todo, destacan sus aplicaciones en el campo de la electrónica, donde a través de su capacidad para almacenar energía puede dotar a las baterías de una mayor duración y un menor tiempo de carga, establecer conexiones más rápidas e incluso contribuir a mejorar el medio ambiente sustituyendo a materiales contaminantes que hoy en día nos vemos obligados a utilizar.

El grafeno es capaz de generar electricidad a través de la energía solar, lo que le convierte en un material muy prometedor en el campo de las energías limpias. Si se construyeran con grafeno las placas solares, podrían generar varias veces más energía por hora que las actuales.

No hay que olvidar su relevancia en el ámbito de la salud. Su futuro en terrenos como la medicina se presenta realmente prometedor. Las investigaciones han demostrado que, al ser funcionalizado, puede ser usado para transportar fármacos, contribuir para la secuenciación de ADN, utilizarse como biosensores, servir para la creación de prótesis, e incluso se podría aplicar para mejorar el tratamiento de algunas enfermedades y para rastrear el entorno celular para la regeneración de tejidos.

### 3.5 Conductividad del grafeno y obtención de la conductividad fuera y dentro de la diagonal de Hall

El grafeno presenta condiciones en la radiación de plasmones polarizados superficiales (SPP), las ondas siendo guiadas a lo largo de una interfaz dieléctrica de metal que son generadas por una radiación de frecuencia que inciden entre las mismas. De hecho, se coloca una capa de grafeno libre compatible con las ondas magnéticas transversales SPP con un índice de modo eficaz  $\eta_{eff}$ .

$$\eta_{eff}(\omega) = \sqrt{1 - \frac{4\mu_0}{\epsilon_0\sigma(\omega)^2}} \tag{3.4}$$

donde:

$\omega$ - Es la dependiente de la frecuencia de la conductividad del grafeno.

$\epsilon_0$ -Es la permitividad en el espacio libre.

$\sigma$ -Es la conductividad.

$\mu_0$ -Permeabilidad en el espacio libre.

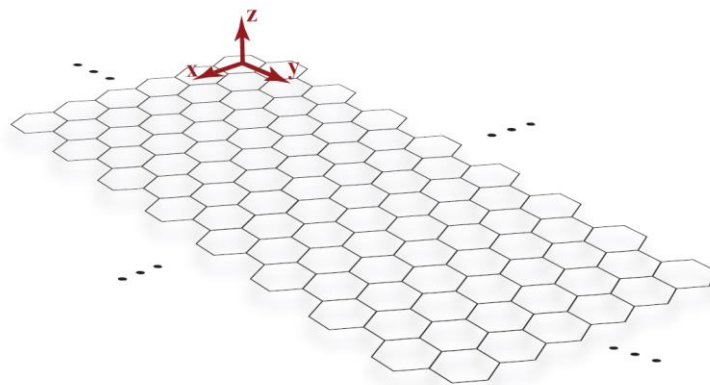


Figura 3.8 Plano XY de grafeno. Imagen obtenida de [22]

La Figura 3.8 muestra un plano XY de grafeno. Debido a que el grafeno está en el plano XY su forma tensorial de la conductividad es:

$$\vec{\sigma}(\omega, \mu_c(\mathbf{E}_0), |\Gamma, T, \mathbf{B}_0) = \bar{x}\bar{x}\sigma_{xx} + \bar{x}\bar{y}\sigma_{xy} + \bar{y}\bar{x}\sigma_{yx} + \bar{y}\bar{y}\sigma_{yy} \quad (3.5)$$

donde:

$\omega$ - Frecuencia angular en radianes.

$\mu_0$ - Potencial químico.

$\Gamma$ - Tasa de dispersión de la partícula cargada que representa el mecanismo de pérdida.

$T$ - Temperatura.

$\mathbf{E}_0$  y  $\mathbf{B}_0$  -Son el campo de polarización eléctrica y magnética continua [dc]

Se debe considerar que la tasa de dispersión  $\Gamma$  puede estar en función de la frecuencia, temperatura, campo y el índice de nivel de Landau.

La frecuencia de resonancia  $f_0$ , la combinación de SPP, la relación de dispersión y la condición de la antena resonante está dado por la siguiente fórmula:

$$L_p = L + 2\delta L = \frac{\Pi}{\beta} \quad (3.6)$$

donde:

$\delta L$ - Medida de la penetración del campo afuera del grafeno.

$\beta$ - Es el número de ondas del SPP.

$L$ - Longitud de la antena.

$L_p$ -Lado del parche "Lp".

El potencial químico  $\mu_0$ , está relacionado con la densidad de los portadores cargados, puede ser controlado por el dopaje químico o mediante la aplicación de campo de polarización.

Calculando el tensor de conductividad óptica usando la fórmula de "Kubo".

$$\sigma_{ij}(\Omega) = \frac{\Pi_{ij}^R(\Omega + i0)}{i\Omega} \quad (3.7)$$

Donde  $\Pi_{ij}^R(\Omega)$  es la función retardada de correlación corriente-corriente.

La absorción óptica en el grafeno involucra dos procesos: transiciones intrabandas y transiciones interbandas, que pueden expresarse usando la conductividad:

$$\sigma(\omega) = \sigma_{d,intra}(\omega) + \sigma_{o,inter}(\omega) \quad (3.8)$$

Donde:

$\omega$ - Frecuencia angular del fotón.

$\sigma$ - Conductividad.

El potencial eléctrico y del campo de polarización magnética “Kubo”, se obtiene la conductividad dentro de la diagonal de Hall  $\sigma_d$ .

$$\begin{aligned} \sigma_d &= \frac{e^2 v_F^2 |eB_0| \hbar (\omega + i2\Gamma)}{i\pi} \quad (3.9) \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \left( 1 - \frac{\Delta^2}{M_n M_{n+1}} \right) \frac{[n_F(M_n) - n_F(M_{n+1}) + [n_F(-M_{n+1}) - n_F(-M_n)]]}{(M_{n+1} - M_n)^2 - (\omega + 2i\Gamma)^2} \right. \\ &\times \frac{1}{M_{n+1} - M_n} + \left( 1 + \frac{\Delta^2}{M_n M_{n+1}} \right) \\ &\times \left. \frac{[n_F(-M_n) - n_F(M_{n+1}) + [n_F(-M_{n+1}) - n_F(M_n)]]}{(M_{n+1} + M_n)^2 - (\omega + 2i\Gamma)^2} \frac{1}{M_{n+1} + M_n} \right\} \end{aligned}$$

Donde:

$$\eta_F(\epsilon) = \frac{1}{(1 + \exp[\frac{\epsilon - \mu_F}{k_B T}])} \text{ Distribución Fermin-Dirac}$$

$$v_F = 10^6 \frac{m}{s} \text{ Velocidad de Fermi}$$

$\Delta$ - Brecha de la banda de excitación.

$M_n = \sqrt{\Delta^2 + 2n\hbar v_F^2 |eB_0|}$  Energía en el nivel nth de Landau asumiendo que  $e^{-i\omega t}$  es la dependencia en el tiempo de la armónica.

Para la conductividad fuera de la diagonal de Hall  $\sigma_o$ .

$$\begin{aligned} \sigma_o &= -\frac{e^2 v_F^2 eB_0}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} [n_F(M_n) - n_F(M_{n+1}) + [n_F(-M_{n+1}) - n_F(-M_n)]] \\ &\times \left\{ \left( 1 - \frac{\Delta^2}{M_n M_{n+1}} \right) \frac{1}{(M_{n+1} - M_n)^2 - (\omega + 2i\Gamma)^2} \right. \\ &\left. + \left( 1 + \frac{\Delta^2}{M_n M_{n+1}} \right) \frac{1}{(M_{n+1} + M_n)^2 - (\omega + 2i\Gamma)^2} \right\} \quad (3.10) \end{aligned}$$

Donde:

$$\eta_F(\epsilon) = \frac{1}{\left(1 + \exp\left[\frac{\epsilon - \mu_c}{k_B T}\right]\right)} \text{ Distribución Fermin-Dirac.}$$

$$v_F = 10^6 \frac{m}{s} \text{ Velocidad de Fermi.}$$

$\Delta$  Brecha de la banda de excitación.

$Mn = \sqrt{\Delta^2 + 2n\hbar v_F^2 |eB_0|}$  Energía en el nivel nth de Landau asumiendo que  $e^{-i\omega t}$  es la dependencia en el tiempo de la armónica.

Se asume que:

La tasa de dispersión  $\Gamma$  no depende de la frecuencia y del índice de nivel de Landau.

*El límite del campo magnético está por debajo  $\Delta = 0$ .*

Asumiendo que  $B_0 = 0$  y que el grafeno es isotrópico. Dado que en las diagonales de  $\sigma_d$  son independientes del campo magnético las ecuaciones de  $\sigma_{d, intra}$  queda de la siguiente manera, la cual se asemeja a la ecuación base del artículo [23] donde se tomaron para la realización del parche cuadrado [23]:

$$\sigma_{d, intra} = i \frac{e^2 k_B T}{\pi \hbar^2 (\omega + i2\Gamma)} \left[ \frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left( e^{\frac{\mu_c}{k_B T}} + 1 \right) \right] \quad (3.11)$$

Donde:

$\hbar$ - Constante de Planck.

T- Temperatura.

$k_B$ - Constante de Boltzman.

El término interbanda no puede ser evaluado analíticamente cuando:

$$k_B T \ll |\mu_c| \text{ y } k_B T \ll \hbar \omega \quad (3.12)$$

# Capítulo 4 METODOLOGÍA

En este capítulo se hablará de la definición y comportamiento del modelo Drude-Lorentz en el subtema 4.1, adecuando las ecuaciones para la simulación de acuerdo con las propiedades del material de grafeno a nivel cuántico en COMSOL Multiphysics, de la antena peano fractal  $n=1$  a base de grafeno en una base de dióxido de silicio en el subtema 4.2.

## 4.1 Modelo Drude-Lorentz

El modelo de Drude o de Lorentz-Drude para conducción eléctrica fue desarrollado hacia el 1900 por Paul Drude para explicar las propiedades de transporte de electrones en materiales (especialmente en metales). El modelo de Drude proporciona una base de la mecánica clásica para la conductividad de los metales, se basa en la aplicación de la teoría cinética a los electrones en un sólido. Proporciona unos resultados razonables, aun cuando actualmente ha sido superado por el correspondiente modelo cuántico basado en la teoría de bandas de conducción [24] [25].

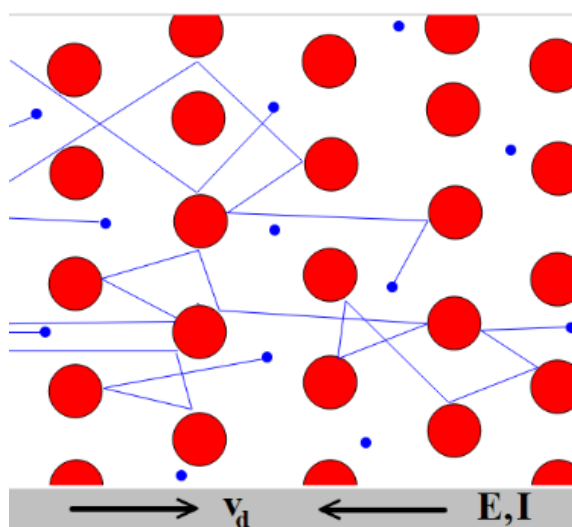


Figura 4.1 Representación del modelo de Drude: los electrones en azul, son movidos por el gradiente de campo eléctrico y chocan con los iones de la red cristalina que están en rojo [25].

Según este modelo, un material conductor está formado microscópicamente, por una red cristalina en la que existen tanto electrones ligados como electrones libres de moverse por la red.

Supone que el material contiene iones positivos inmóviles y que un "gas de electrones" clásicos, que no interactúan entre sí de densidad  $n$ , donde el movimiento de cada uno

se encuentra amortiguado por una fuerza de fricción producto de las colisiones de los electrones con los iones, caracterizada por un tiempo de relajamiento  $\tau$ .

Los electrones ligados están sometidos a una fuerza elástica que los hace oscilar alrededor de los iones de carga positiva, mientras que los electrones libres son los responsables de la conductividad.

El modelo de Drude supone que un portador promedio de carga eléctrica está sujeto a la acción de una "fuerza de resistencia"  $\gamma$ . En presencia de un campo eléctrico externo  $E$  se satisface la siguiente ecuación diferencial:

$$m \frac{d}{dt} \langle \vec{v} \rangle = q\vec{E} - \gamma \langle \vec{v} \rangle \quad (4.1)$$

donde:

$\langle \vec{v} \rangle$  es la velocidad promedio,

$m$  es la masa efectiva

$q$  la carga eléctrica del portador de carga.

La solución estacionaria:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{v} \rangle = 0 \quad (4.2)$$

de esta ecuación diferencial es:

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{q\tau}{m} \vec{E} = \mu \vec{E} \quad (4.3)$$

donde:

$\tau = \frac{m}{\gamma}$  es el tiempo libre medio de un portador de carga, y  $\mu$  es la movilidad eléctrica.

Si se introduce la densidad del gas de portadores de carga  $n$  (partículas de unidad por volumen), podemos relacionar a la velocidad promedio con una corriente eléctrica:

$$\vec{J} = nq \langle \vec{v} \rangle \quad (4.4)$$

Se puede demostrar que el material satisface la ley de Ohm con una conductividad eléctrica en corriente eléctrica continua  $\sigma_0$ .

$$\vec{J} = \frac{nq^2\tau}{m} \vec{E} = \sigma_0 \vec{E} \quad (4.5)$$

El modelo de Drude permite también predecir la corriente como una respuesta a un campo eléctrico variable en el tiempo con una frecuencia angular  $\omega$ , en cuyo caso:

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + i\omega\tau} \quad (4.6)$$

Donde se ha supuesto que:

$$E(t) = \Re(E_0 e^{i\omega t}) \quad (4.7)$$

$$J(t) = \Re(\sigma(\omega) E_0 e^{i\omega t}) \quad (4.8)$$

Existe otra convención en la que,  $i$  es reemplazado por  $-i$  en todas las ecuaciones. La parte imaginaria indica que la corriente está retrasada respecto al campo eléctrico, lo que se produce porque los electrones necesitan aproximadamente un tiempo  $\tau$  para acelerarse en respuesta a un cambio en el campo eléctrico aplicado. En el caso previo el modelo de Drude se aplicó a los electrones; pero también puede ser aplicado a los huecos, es decir a los portadores de carga positiva en los semiconductores.

Denotando mediante  $n_A$  la densidad de electrones por unidad de volumen se obtiene una ecuación que relaciona el vector de polarización y el campo eléctrico:

$$\vec{P} = n_A \langle \pi \rangle = -n_A e \vec{r}(t) \quad (4.9)$$

Donde  $\langle \pi \rangle$  representa el valor medio del momento dipolar eléctrico del electrón ligado. El movimiento de los electrones ligados vendría dado por la siguiente ecuación:

$$m \frac{d\vec{v}(t)}{dt} = -e(\vec{E}_m + \vec{v} \times \vec{B}_m) - k\vec{r} - \beta\vec{v} \quad (4.10)$$

Donde  $E_m$  y  $B_m$  son los campos eléctrico y magnético a nivel microscópico. Los otros términos del segundo miembro representan respectivamente la fuerza elástica y una fuerza "viscosa", que en el modelo trata de simular la continua pérdida de energía debida al efecto Joule. Dividiendo ahora por la masa y multiplicando por el factor  $-e n_A$  se obtiene:

$$-en_A \frac{\partial^2 \langle \vec{r} \rangle}{\partial t^2} + \frac{e^2 n_A}{m} \vec{E} + en_A \omega_0^2 \langle \vec{r} \rangle = en_a \gamma \frac{\partial \langle \vec{r} \rangle}{\partial t} \quad (4.11)$$



$$\frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \omega_0^2 \vec{P} = \frac{e^2 n_A}{m} \vec{E} \quad (4.12)$$

Donde se ha introducido  $\frac{k}{m} = \omega_0^2$  y  $\frac{\beta}{m} = \gamma$

## 4.2 Modelo de Drude-Lorentz usando el lenguaje de COMSOL Multiphysics

Para el modelado de la nano antena se usó el lenguaje de COMSOL Multiphysics 5.2, la ventaja de usar este tipo de modelado es que como se está hablando de niveles cuánticos dadas las propiedades mismas del grafeno y debido a la complejidad misma del uso de la nano antena peano  $n=1$ , el cual no se logró simular de forma adecuada en MATLAB y se requirió del uso de otro software para poder obtener los resultados al simular la nano antena se optó por el uso de este.

Una de las necesidades de este programa para poder hacer que entrara en resonancia la antena, se requirió de crear un nuevo material usando las propiedades del grafeno y que tuviera una conductividad para poder hacer la simulación en COMSOL Multiphysics. La simulación se realizó de acuerdo a la ecuación de Drude-Lorentz considerando los valores para el grafeno de la referencia [26]. Para la simulación del grafeno se tomaron las siguientes propiedades [27]:

### 4.2.1 Modelo electrónico de grafeno

La (Figura 4.2) representa un grafeno infinito que se encuentra en el plano -XY en la interfaz entre dos medios diferentes generalmente caracterizados por  $\mu_1, \epsilon_1$  por  $z \geq 0$  y  $\mu_2$  y  $\epsilon_2$  por  $z < 0$ , respectivamente.

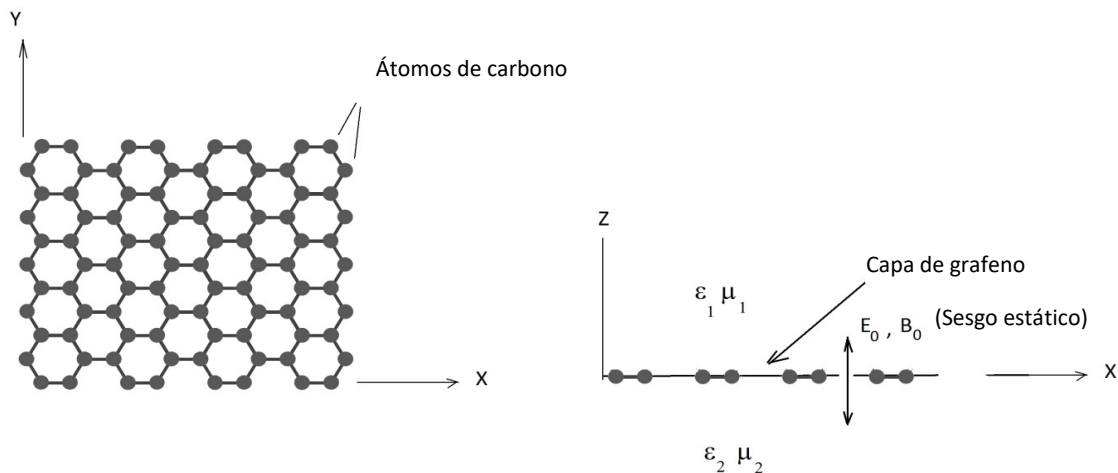


Figura 4.2 Modelo del grafeno en el plano XY. Imgen obtenida de [26]

El grafeno se modeló en régimen lineal. El modelo lineal de grafeno se caracteriza según la fórmula de Kubo. En el modelo de señal lineal o pequeña, la lámina de grafeno se modela como un tipo de metal infinitesimalmente delgado, mediante una conductividad de superficie de tensor 2D de  $\sigma = \sigma_x a_x + \sigma_y a_y$ .

Esta conductividad es una función dependiente de múltiples variables como se muestra a continuación:

$$\hat{\sigma}(\omega(\text{rad/s}), \mu_c(E_0), B_0, T) = \sigma_x \hat{a}_x + \sigma_y \hat{a}_y \quad (4.13)$$

Donde  $\omega$  es la frecuencia en radianes,  $\mu_c$  es el potencial químico o nivel de Fermi que puede controlarse mediante un campo de polarización electrostática aplicado  $E_0 = E_0 a_z$ , o mediante dopaje,  $\gamma$  es una tasa de dispersión de electrones fenomenológica (inversa del tiempo de relajación del portador de  $\tau$ ) se supone que es independiente de la energía,  $T$  es la temperatura y  $B_0 = B_0 a_z$  es un campo de polarización magnetostático. Tres casos de (Ec. 4.13) serán considerados.

- 1) **Dispersión espacial**, ni sesgo electrostático ni magnetostático ( $E_0 = B_0 = 0$ ).
- 2) **Sesgo electrostático**, sin sesgo magnetostático ni dispersión espacial ( $E_0 \neq 0, B_0 = 0$ ). En este caso, la matriz de conductividad es diagonal:

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_d(\mu_c(E_0)) \\ \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0 \end{cases}$$

- 3) **Sesgo magnetostático**, ( $B_0 \neq 0$ , y posiblemente  $E_0 \neq 0$ ). Este caso se refiere como el régimen de efecto Hall local.

Para hablar de frecuencias de THz donde la energía del fotón debe ser menor a la energía de Fermi  $\hbar\omega \ll E_F$  y la parte interbanda de la conductividad del grafeno es insignificante en comparación con la intrabanda como se hace mención en el subtema 2.5., y de acuerdo a la Ec. 2.12, tenemos que la conductividad intrabanda es:

$$\sigma_S^{intra} = \frac{2e^2 K_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left( 2 \cosh \left( \frac{E_F}{2K_B T} \right) \right) \frac{1}{\omega + j\tau^{-1}} \quad (4.14)$$

Donde:

T: Temperatura,

$E_F$ : potencial electroquímico (energía de Fermi),

$\tau = 10^{-13}$  s (Tiempo de relajación).

$k_B = 1.3806488 \times 10^{-23}$  (m<sup>2</sup> kgs<sup>-2</sup>K<sup>-1</sup>)

$$\begin{aligned}\hbar &= 6.62606957e^{-34}/\pi \text{ ( eV/s);} \\ \epsilon_0 &= 8.85418781762e^{-12} \text{ (F/m)} \\ e &= 1.60217657 \times 10^{-19} \text{ C}\end{aligned}$$

Para las simulaciones numéricas, el grafeno generalmente se representa como una capa de material de pequeño espesor  $\Delta$  con una permitividad efectiva en el plano basada en la conductividad volumétrica de  $\sigma_V$ .

$$\sigma_V^{intra} \triangleq \frac{\sigma_S^{intra}}{\Delta} = \frac{2e^2 K_B T}{\Delta \pi \hbar^2} \ln \left( 2 \cosh \left( \frac{\mu_C}{2k_B T} \right) \right) \frac{1}{\omega + j\tau^{-1}} \quad (4.15)$$

El modelo de material Drude-Lorentz es una demostración muy importante de materiales dieléctricos en forma cerrada. Cuando trabajamos con metal, el modelo Drude -Lorentz clásico se reduce al modelo de metal Drude, en donde no tenemos resonancia.

$$\sigma_{Drude}(\omega) \triangleq \frac{\sigma_0}{1 - j\omega\tau} \Rightarrow \times \frac{j}{j} \Rightarrow \frac{\sigma_0}{\omega\tau + j} \Rightarrow \sigma_{Drude}(\omega) = \frac{\sigma_0/\tau}{\omega + j\tau^{-1}} \quad (4.16)$$

$$\sigma_V^{intra} = \frac{\sigma_0^{Gr}/\tau}{\omega + j\tau^{-1}} \quad (4.17)$$

$$\sigma_0^{Gr} \triangleq \frac{2e^2 K_B T \tau}{\Delta \pi \hbar^2} \ln \left( 2 \cosh \left( \frac{E_F}{2k_B T} \right) \right) \quad (4.18)$$

Para considerar el grafeno como un metal muy delgado (haciendo una analogía con respecto al grafeno), se puede definir una permitividad equivalente como se muestra a continuación:

$$\epsilon_{eff}^{Gr}(\omega) = \epsilon_0 + j \frac{\sigma_V^{intra}(\omega)}{\omega} = \epsilon_0 + \frac{j\sigma_0^{Gr}}{\omega(1-j\omega\tau)} \quad (4.19)$$

Para la interfaz transitoria de ondas electromagnéticas, se hace uso del modelo de dispersión Drude-Lorentz de los modelos de campo de desplazamiento eléctrico disponibles dentro de COMSOL Multiphysics. La función de polarización Drude-Lorentz (Figura 4.3) puede agregar como subfunciones la función de ecuación de onda. La función de polarización Drude-Lorentz agrega la siguiente ecuación a los dominios deseados:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Gamma_n \frac{\partial}{\partial t} + \omega_n^2 \right) \mathbf{P}_n = \epsilon_0 f_n \omega_p^2 \mathbf{E} \quad (4.20)$$

Esta ecuación se resolverá junto con la ecuación de onda dependiente del tiempo para el potencial del vector magnético.

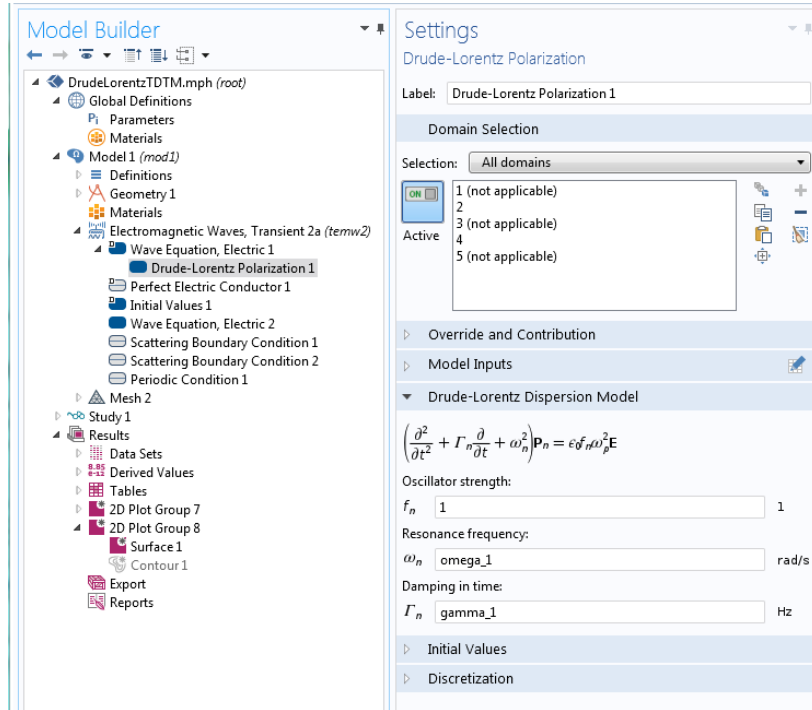


Figura 4.3 Captura de ventana en COMSOL Multiphysics del modelo de dispersión Drude-Lorentz para la configuración de la ecuación de onda eléctrica [28].

Las variables que se tomaron en cuenta para el modelo de dispersión Drude-Lorentz son las siguientes:

Nombre	Expresión	Unidad	Descripción
ka	ewfd.k0*na	rad/m	Wave number in air
lx	ka*cos(phi)*sin(theta)	rad/m	
ly	ka*sin(phi)*sin(theta)	rad/m	
kaz	-ka*cos(theta)	rad/m	
kb	ewfd.k0*nb	rad/m	Wave number in substrate
kbz	-kb*cos(theta)	rad/m	

Nombre	Expresión	Unidad	Descripción
nrelPoav	nx*ewfd2.relpovx+ny*e...	W/m <sup>2</sup>	Relative normal Poynting...
sigma_sc	intop_surf(nrelPoav)/10	m <sup>2</sup>	Scattering cross section
sigma_abs	intop_vol(ewfd2.Qh)/10	m <sup>2</sup>	Absorption cross section
sigma_ext	sigma_sc+sigma_abs	m <sup>2</sup>	Extinction cross section

Nombre	Expresión	Unidad	Descripción
E0x	-sin(phi)*exp(-i*(lx*x+ly*...		
E0y	cos(phi)*exp(-i*(lx*x+ly*...		

Nombre	Expresión	Unidad	Descripción
ewfd.Ex	0		
ewfd.Ey	0		
ewfd.Ez	0		

Figura 4.4 Variables para el modelo de dispersión de Drude-Lorentz

Considerando los siguientes parámetros de entrada y sustituyendo en la ecuación de la conductividad del grafeno (KUBO Ec. 3.11) [26]:

$$E_f = 0 \text{ [eV]}$$

```
temp=300[K]
tao=0.1[ps]
omega_p=sqrt(log(2*cosh(Ef/(2*k_B_const*temp)))*(2*(e_const^2)*k_B_const*temp)
/(pi*(hbar_const^2)*(epsilon0_const*dgr)))
omega_1=0[rad/s]
gamma_1=1/tao
omega_0=2*pi*f0
```

La variable  $\omega_p$  se sustituye de la ecuación de KUBO (Ec. 3.11) para la conductividad del grafeno intrabanda tomando sus constantes de dicha ecuación.

Tanto el uso de las variables como de los parámetros antes mencionados están relacionados para que entre en conductividad la superficie de plasmones polarizados de acuerdo con las propiedades del grafeno al momento de realizar la simulación con una permitividad relativa del sustrato ( $SiO_2$ ) de 4. Para el modelo de dispersión [26] en COMSOL Multiphysics se considera:

- ☞  $\omega_p = \omega_p$
- ☞ Oscillator strength = 1
- ☞ Resonance frequency =  $\omega_1$
- ☞ Damping in time =  $\gamma_1$

Una vez analizado el modelo se continua con la simulación considerando los parámetros y variables para obtención de radiación de conductividad de la antena óptima en el rango de los terahetz.

# Capítulo 5 SIMULACIONES COMPUTACIONALES

En este capítulo se mostrarán los resultados de las simulaciones de dos antenas, la del parche cuadrado convencional y la antena peano fractal  $n=1$ , ambos a escala nanométrica usando el material de grafeno como conductor en una base de dióxido de silicio.

## 5.1 Proceso de resultados y diagrama de flujo.

Los resultados se obtuvieron por medio del método de elementos finitos (MEF). Se usaron como apoyo dos lenguajes de programación:

- ☞ MATLAB R2015a para 64 bits. MATLAB (MATrix LABoratory) es una herramienta matemática que ofrece un entorno de desarrollo integrado (IDE) con un lenguaje de programación propio (lenguaje M). Las capacidades de programación orientada a objetos del lenguaje de MATLAB® permiten desarrollar aplicaciones de cálculo técnico complejas. Es posible definir clases y aplicar patrones de diseño orientado a objetos estándar en MATLAB que permiten la reutilización de código, la herencia, el encapsulamiento y el comportamiento de referencia sin necesidad de prestar atención a las tareas habituales de bajo nivel requeridas en otros lenguajes [29]. El programa se utilizó en la plataforma de sistema operativo de Windows 10, con las siguientes características: Procesador AMD A9-9410 RADEON R5, 5COMPUTE CORES 2C +3G 2.9 GHz; RAM 8 GB.
- ☞ COMSOL Multiphysics 5.2 para 64 bits. COMSOL Multiphysics es un paquete de software de análisis y resolución por elementos finitos para varias aplicaciones físicas y de ingeniería, especialmente fenómenos acoplados, o multifísicos. COMSOL Multiphysics también ofrece una amplia y bien gestionada interfaz a MATLAB y sus toolboxes que proporcionan una variedad de posibilidades de programación, preprocesado y postprocesado. También proporciona una interfaz similar a COMSOL Script. Además de las interfaces de usuario convencionales basadas en físicas, COMSOL Multiphysics también permite entrar sistemas acoplados de ecuaciones en derivadas parciales (EDP). Las EDP se pueden usar directamente o utilizando la llamada forma débil [28]. El programa se utilizó en la plataforma de sistema operativo de Windows 10, con las siguientes características: Procesador AMD A9-9410 RADEON R5, 5COMPUTE CORES 2C +3G 2.9 GHz; RAM 8 GB. Debido a las necesidades de simulación también se utilizó en otra plataforma de Windows 10 Pro con las siguientes

características: Procesador Intel (R) Xeon(R) CPU ES-2609 v4 @1.70GHz, RAM 32GB.

La obtención de resultados se realizó por etapas y se dividieron en tres los cuales se muestran en la Figura 5.1, en los segmentos verde y violeta se usó MATLAB, mientras que el segmento naranja se usaron los dos lenguajes, MATLAB y COMSOL Multiphysics.

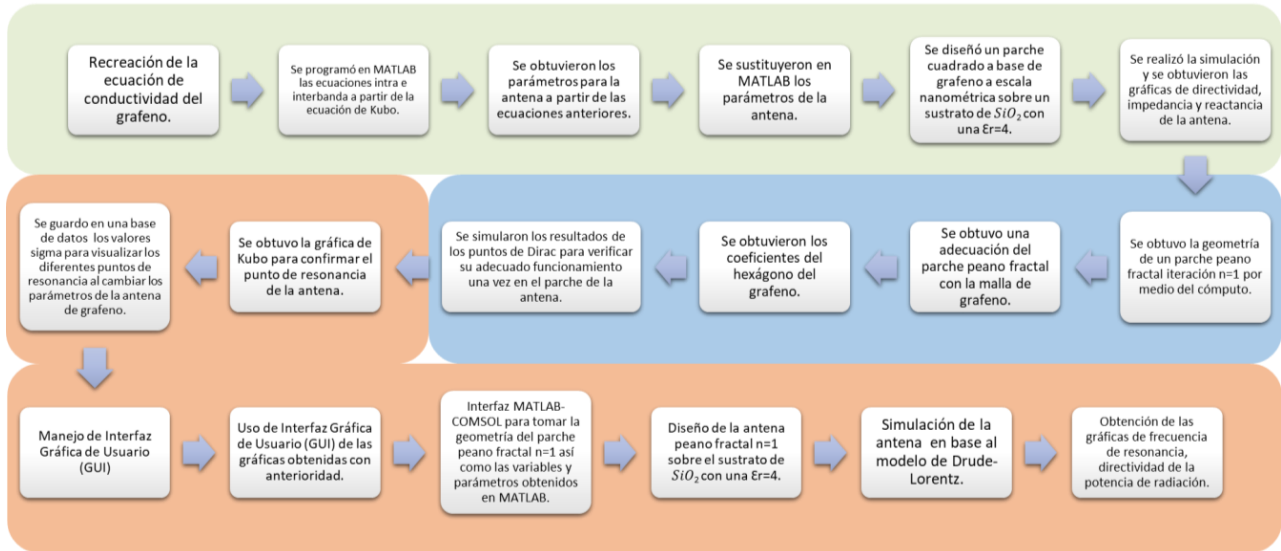


Figura 5.1 Proceso de avances de resultados.

En la sección verde del proceso se inició con la resolución y obtención de las ecuaciones de conductividad a partir de la ecuación de Kubo que se requerían para la adecuación de las propiedades de la antena mostradas en el tema **Conductividad del grafeno y obtención de la conductividad fuera y dentro de la diagonal de Hall**. Se continuó con la programación de las ecuaciones obtenidas de la conductividad dentro de la diagonal de Hall y de las transiciones intrabandas e interbandas de la Ec. ( 3.8 ), para así poder obtener los parámetros adecuados de la antena a simular.

En la sección morada, una vez teniendo la simulación de la antena a valores nanométricos y habiendo verificado los resultados de acuerdo con el material de grafeno, se continuó con la geometría de la antena peano fractal de iteración 1 el cual se programó en MATLAB y verificando las propiedades del material de grafeno se obtuvieron los coeficientes del hexágono y con valores aleatorios se simularon los puntos de Dirac para verificar el adecuado funcionamiento del parche fractal.

En la sección naranja se retomó la ecuación de Kubo Ec. ( 3.7 ) para obtener la gráfica y verificar la frecuencia de resonancia, de acuerdo a los valores arrojados por MATLAB de los valores sigma y teniendo diferentes valores de antena tomando en cuenta los parámetros de grafeno se guardaron en una pequeña base de datos para poder visualizar la frecuencia de resonancia más adecuada. Por último, para tener una

visualización más amigable con el usuario se realizaron GUI (Interfaz Gráfica de Usuario) de los programas usados.

En la Figura 5.2 se muestra el diagrama de flujo completo usado en la paquetería de software de MATLAB.

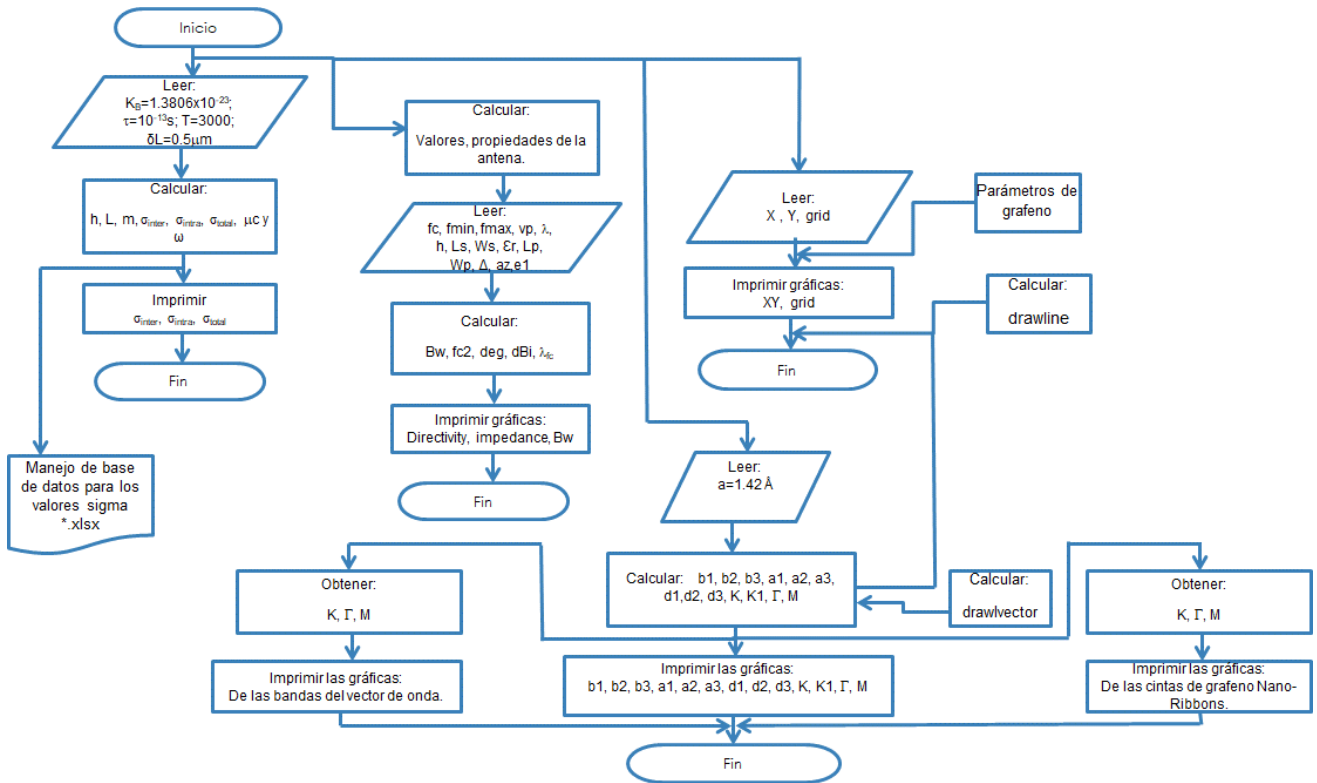


Figura 5.2 Diagrama de flujo completo usado para el diseño y simulación de la nano antena.

## 5.2 Simulación de una nano antena cuadrada a base de grafeno

Para la realización de la antena de parche cuadrada a escala nanométrica se consideraron los siguientes parámetros de diseño tanto del sustrato de dióxido de silicio como del material de la antena a base de grafeno los cuales se muestran a continuación:

Sustrato SiO <sub>2</sub>		Parche Grafeno
L <sub>s</sub> =800nm	longitud	L <sub>p</sub> = 600 nm
W <sub>s</sub> =800 nm	ancho	W <sub>p</sub> =600 nm
h= 10 nm	espesor	Δ= 0.1 μm      espesor del grafeno
ε <sub>r</sub> =4	constante dieléctrica relativa	Longitud de alimentación: 0.12 μm
		Ancho de alimentación: 0.1 μm

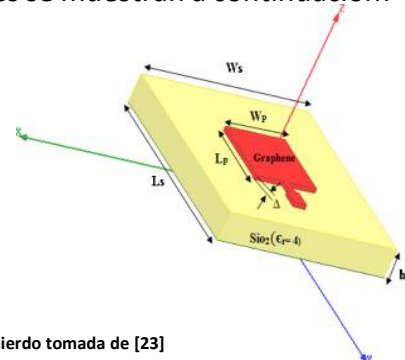


Figura 5.3 Parámetros de la antena. Imagen del lado izquierdo tomada de [23]



El diseño se tomó a partir de los datos arrojados de la programación que se realizó en MATLAB a partir de la ecuación de KUBO (Ec. 2.7), tomando en cuenta los datos iniciales del artículo [23], que fueron base para verificar los datos y poder realizar la aportación a nivel nanométrico usando el material de grafeno, considerando una frecuencia de 13 THz.

### 5.2.1 Programación de la ecuación de Kubo en MATLAB

La fórmula de Kubo-Greenwood (Ec.2.7) se basa en la teoría de respuesta lineal. Tiene como ingrediente principal la función de Green, para nuestro caso, de un Hamiltoniano de amarre fuerte. Nuestro cálculo de conductividad será para la respuesta lineal de un electrón ante un campo eléctrico [30]. La Figura 5.4 muestra el diagrama que se usó para la obtención de la conductividad intrabanda, interbanda y la total a partir de la frecuencia de resonancia propuesta de 13 THz a partir de las propiedades del grafeno.

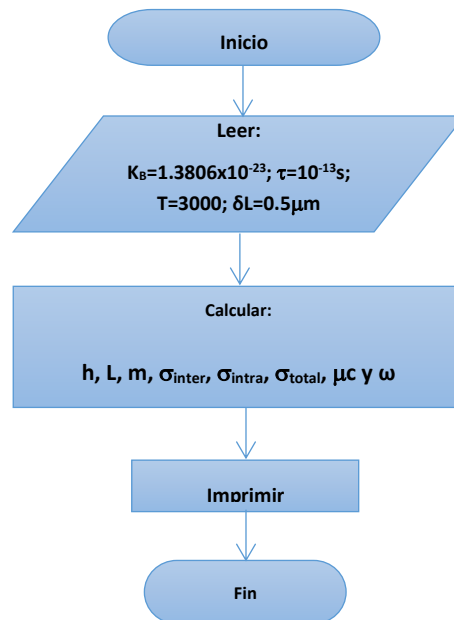


Figura 5.4 Diagrama de flujo de la ecuación de KUBO resultado en MATLAB.

## 5.3 Sustitución en MATLAB de los parámetros de la antena

La geometría y el diseño de la antena de parche cuadrado fue realizada para una frecuencia óptima de operación en los 13 THz y con un ancho de banda obtenida del diagrama de la Figura 5.6 que va desde 12.2 a los 13.8THz.

En la Figura 5.5 se muestran los parámetros de salida con los parámetros generales de la antena, mientras que los parámetros de entrada con los parámetros de las dimensiones de la antena que se consideraron para la simulación de la nano antena de parche:

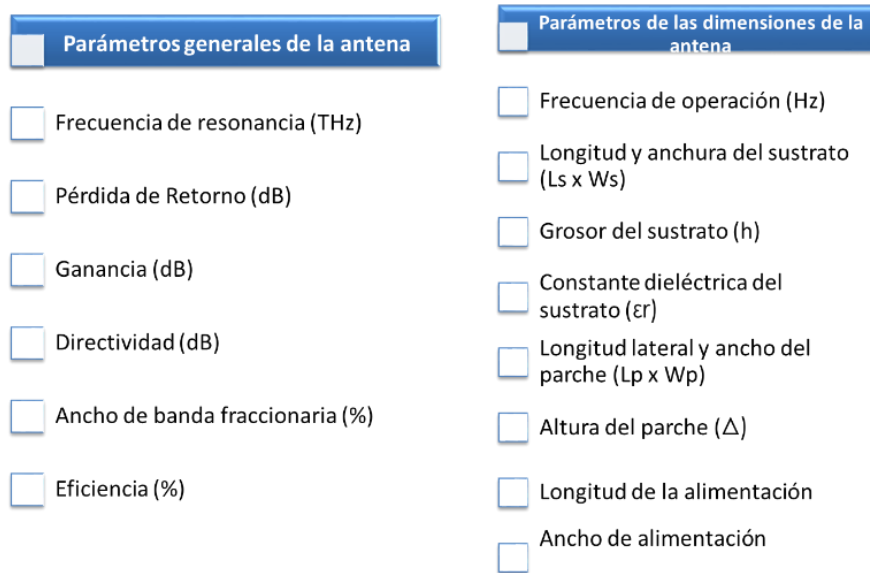


Figura 5.5 Parámetros de la nano antena de grafeno.

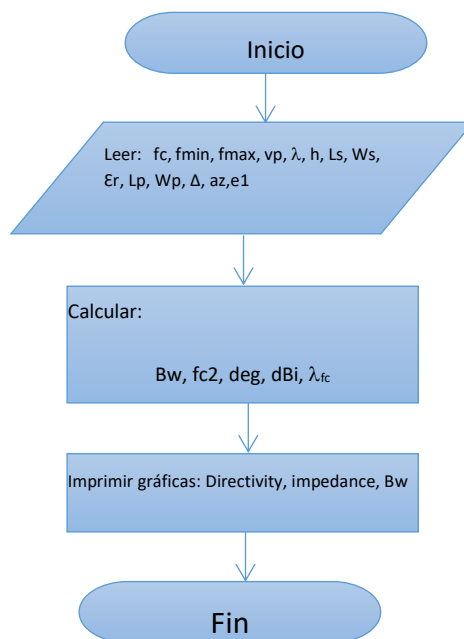


Figura 5.6 Diagrama de Flujo del programa para obtener las gráficas de directividad, impedancia y ancho de banda de la antena de parche

Considerando que la parte de conductividad ha utilizado el material de grafeno y como sustrato el dióxido de silicio con una constante dieléctrica de  $\epsilon_r=4$ , se continuó con el diseño (Figura 5.5), usando el programa de MATLAB en donde se colocaron los valores de acuerdo con los datos de entrada del diagrama de flujo de la Figura 5.6 .

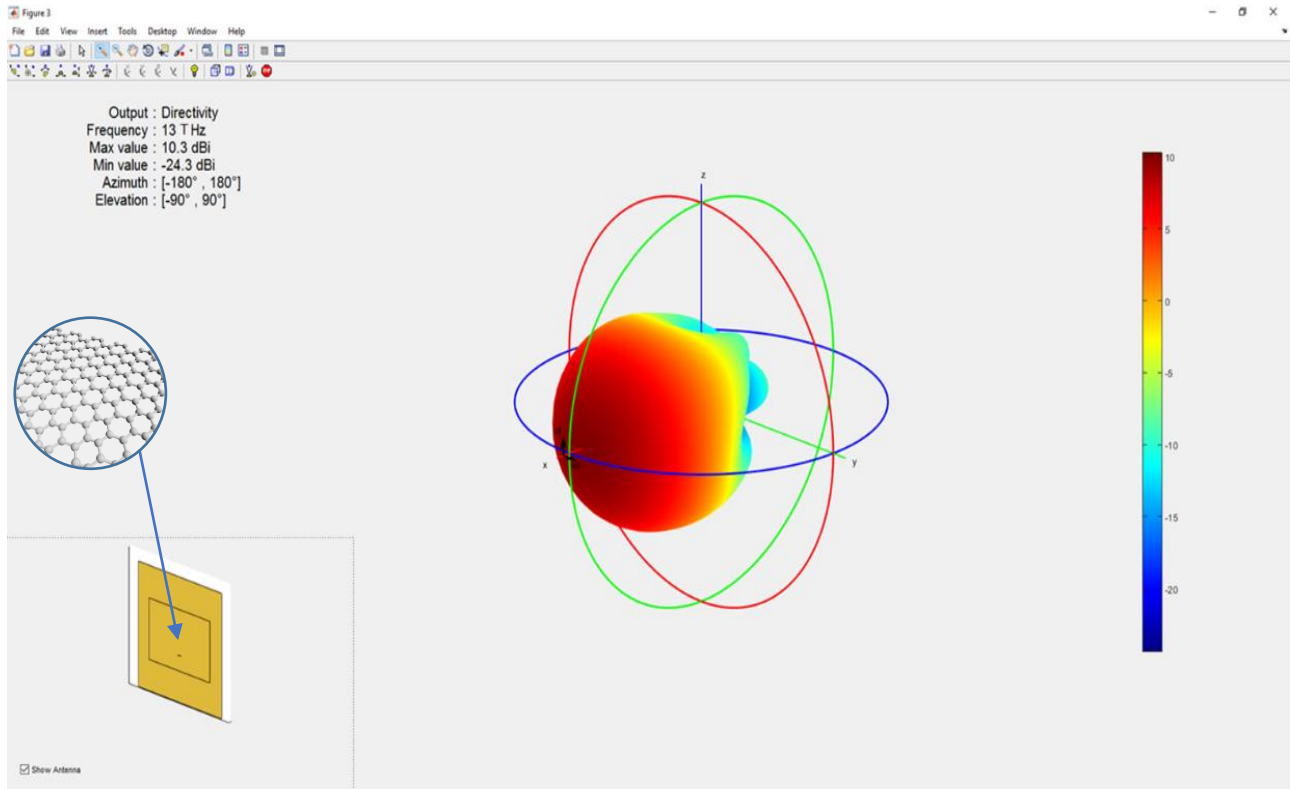


Figura 5.7 Gráfica de la directividad de la nano antena de grafeno.

El programa de parche de antena de MATLAB dio como resultado una directividad máxima como se muestra en la Figura 5.7 de 10.3 dBi y una mínima de -24.3 dBi con un azimut de  $[-180^\circ, 180^\circ]$  a una frecuencia de 13 THz el cual fue uno de los datos iniciales para la antena.

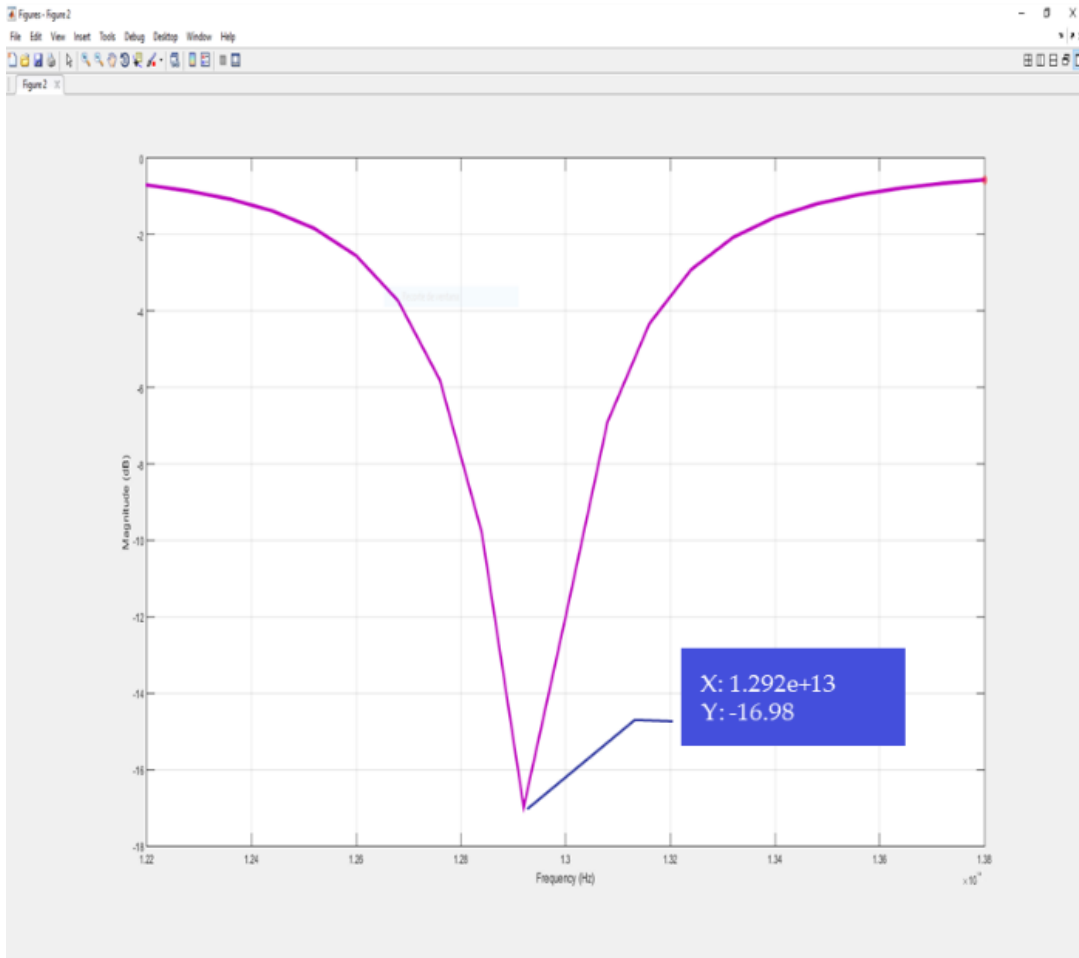


Figura 5.8 Obtención de la frecuencia de resonancia de la nano antena de grafeno.

La frecuencia de resonancia obtenida de la nano antena de grafeno, en la gráfica de la Figura 5.8 fue de 12.92 THz, la diferencia fue mínima de los 13 THz propuestos en los datos iniciales. Lo cual se considera viable al usar como material conductor el grafeno y su respuesta adecuada al poner el parche a escala nanométrica.

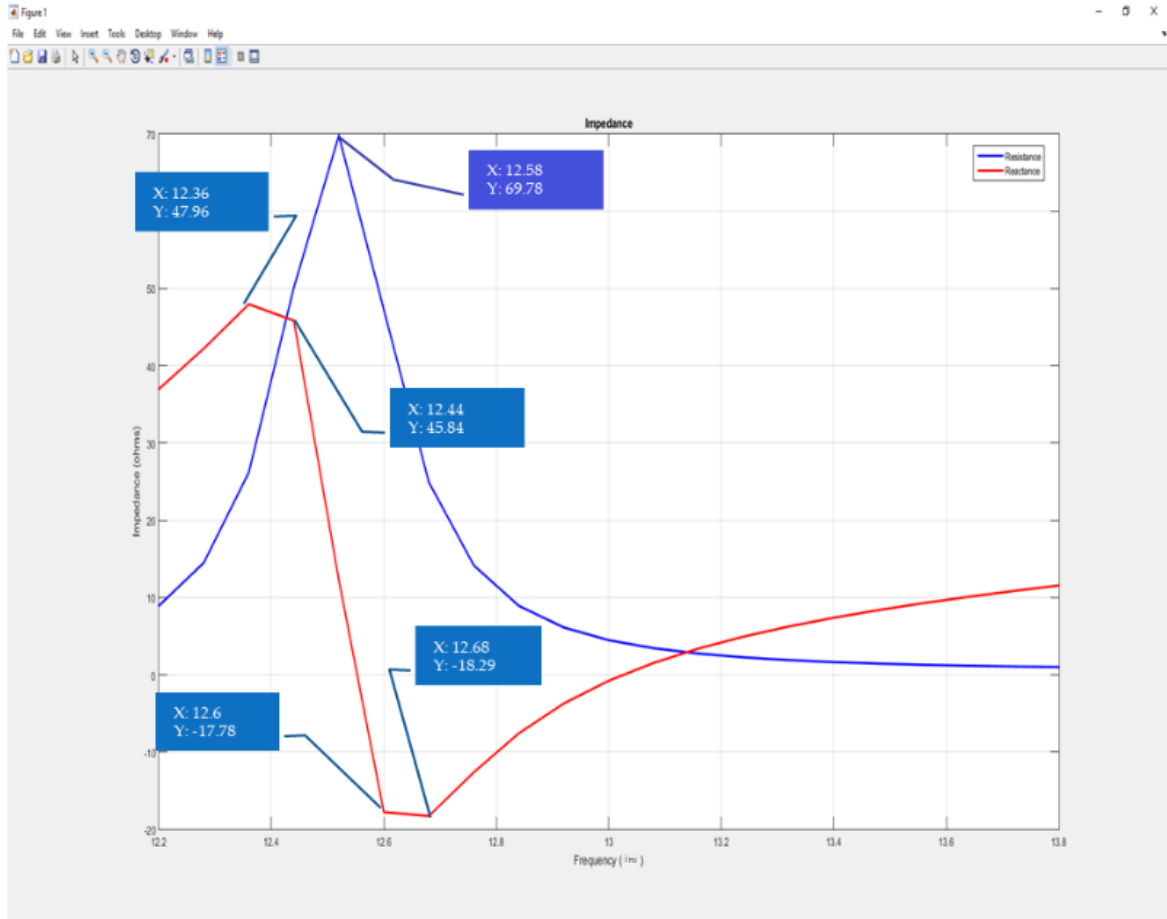


Figura 5.9 Impedancia obtenida de la nano de grafeno.

En la gráfica de la Figura 5.9 se obtuvo la impedancia de la nano antena a los 12.58 Thz, resultado que mostró la nano antena.

Una vez obtenidos los valores necesarios para la simulación de la antena, se retomó el diagrama de flujo de la Figura 5.4 y se adicionó la sección para poder guardar en una pequeña base de datos los valores de  $\sigma$  en \*.xlsx, como se muestra en el diagrama de flujo de la Figura 5.10 el cual nos ayuda a complementar la verificación de los valores obtenidos de la antena aunado a los valores de la conductividad y así poder obtener la gráfica de la frecuencia de resonancia de forma ideal y que no tenga un error considerable como se puede observar la Figura 5.11 que nos siguió dando la frecuencia aproximada de los 13 THz.

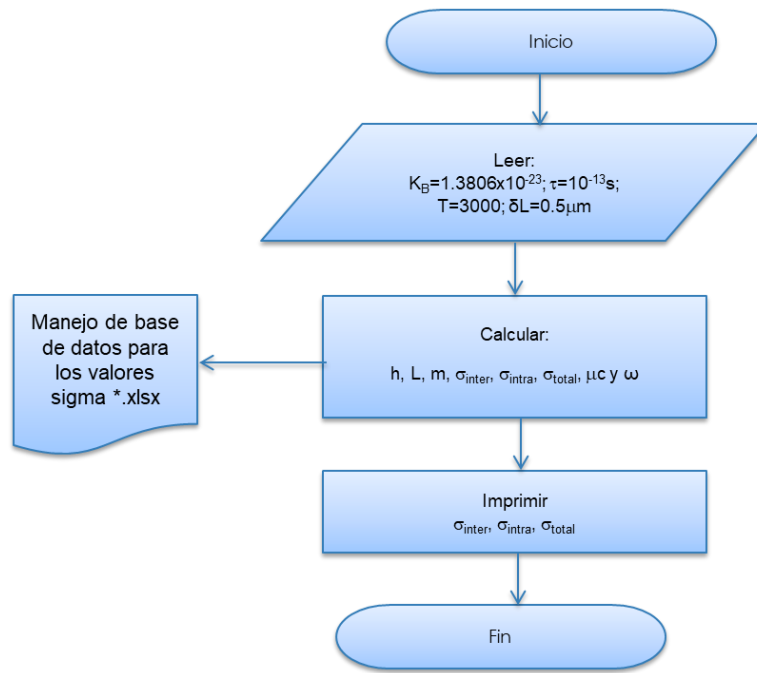


Figura 5.10 Diagrama de flujo de la ecuación de KUBO con base de datos.

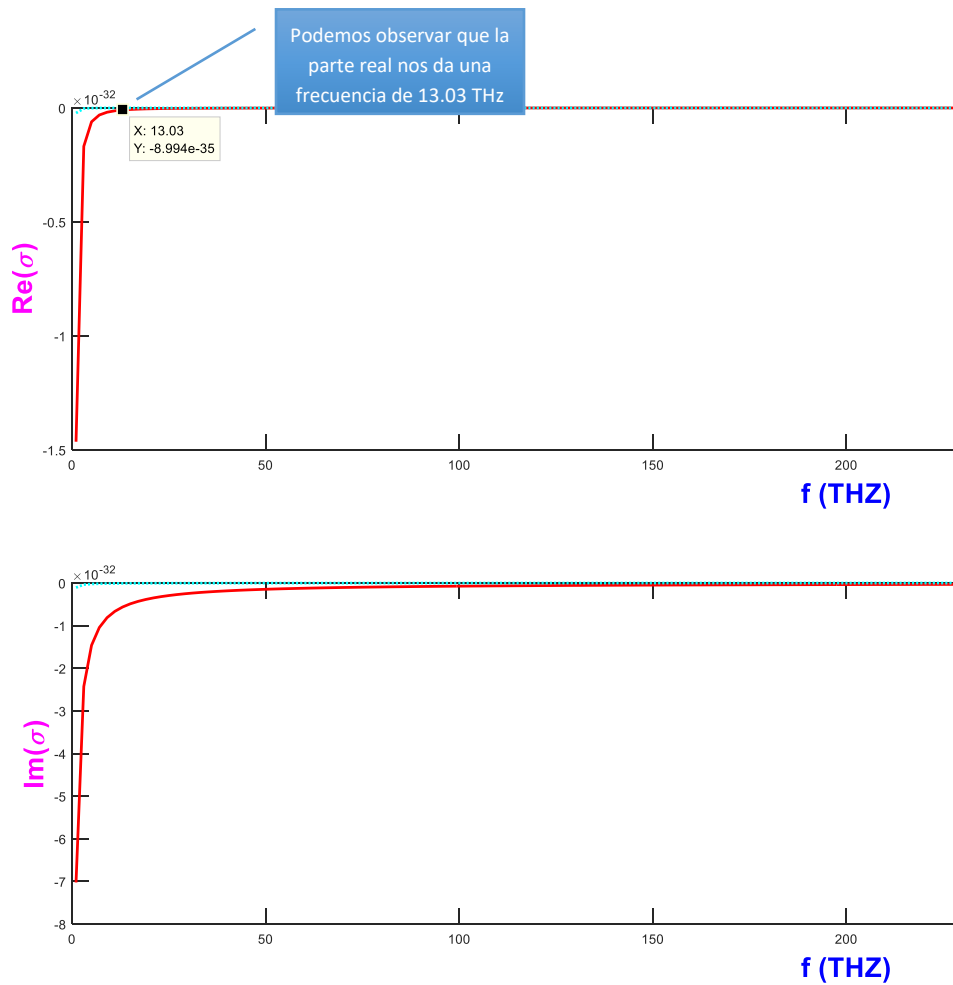


Figura 5.11 Gráfica de impedancia y reactancia de la ecuación de KUBO.

## 5.4 Simulación de un parche peano fractal con iteración n=1

A continuación, se muestra en la Figura 5.14 la simulación del parche Peano Fractal con iteración n=1 a partir de la relación  $n = \frac{f_2}{f_1}$ . Como se muestra en la Figura 2.13 se tomó el siguiente diseño de la Figura 5.12 donde  $f_2 = 300\text{nm}$  y  $f_1 = 129\text{nm}$ , tomando como base el artículo [31]:

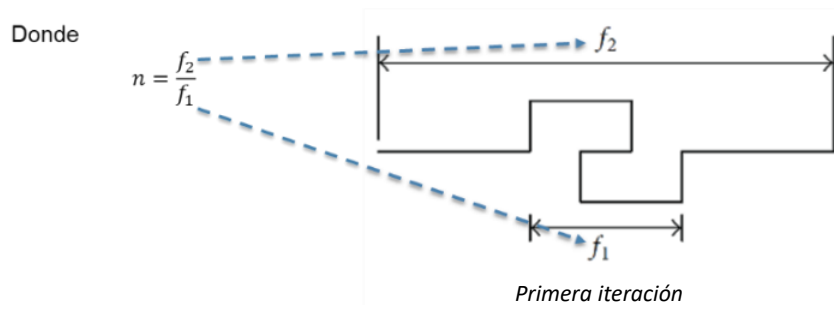


Figura 5.12 Primera iteración de la antena peano fractal.

Al realizar la geometría del peano fractal en Matlab el parche se muestra en la Figura 5.13, en donde se muestra el parche sin el enrejado del grafeno.

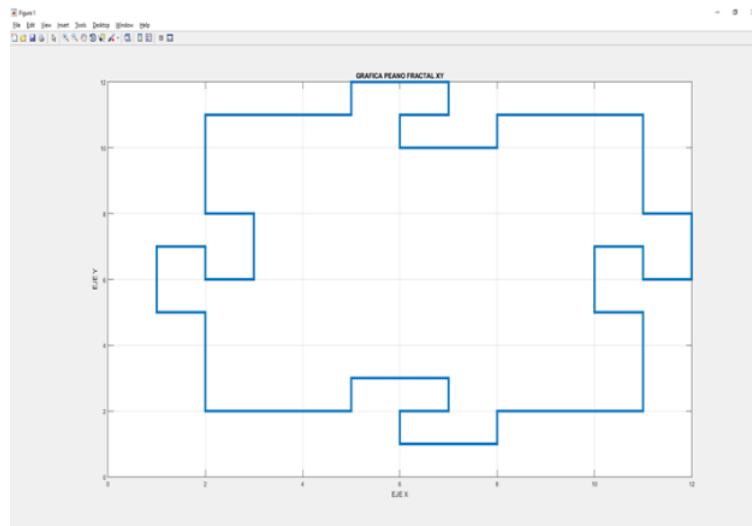


Figura 5.13 Gráfica del parche peano fractal iteración n=1 sin malla de grafeno.

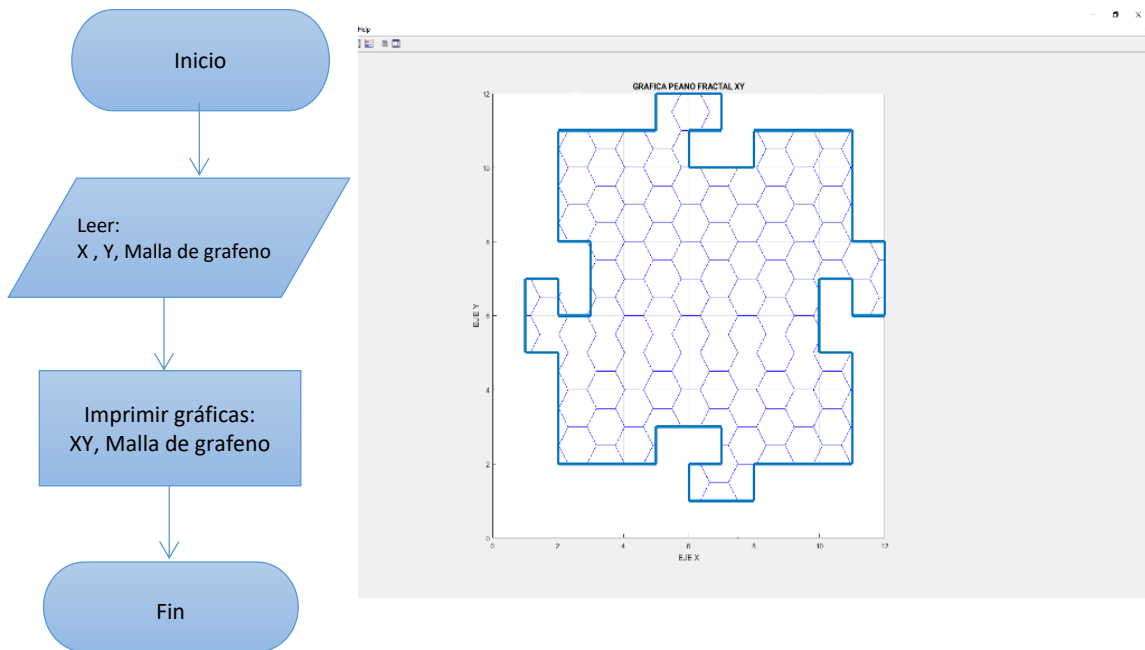


Figura 5.14 Diagrama de flujo del parche peano fractal Giuseppe n=1 en una malla de hexagonal (izquierda) y geometría del parche peano fractal (derecha).

Se obtuvo la gráfica de un parche peano fractal n=1 con la malla hexagonal del grafeno, la cual se muestra en la Figura 5.14:

## 5.5 Obtención de los coeficientes, vectores primitivos y los vecinos más cercanos del grafeno

En MATLAB se obtuvieron los datos para la simulación de los vectores primitivos y sus vecinos, para obtener la primera zona de Brillouin. Esto nos ayuda a verificar de forma visual el adecuado comportamiento de las propiedades del grafeno al momento de que entrara como conductor en la antena. Por lo tanto, se diseñó para qué analizara solamente una zona, la cual sería la zona de Brillouin como se muestra en la Figura 3.6. La zona de Brillouin está definida por una celda primitiva de la red recíproca en el dominio de frecuencias. La importancia de la zona de Brillouin radica en la descripción de las ondas que se propagan en un medio periódico y que pueden ser descritas a partir de ondas de Bloch dentro de la zona de Brillouin.



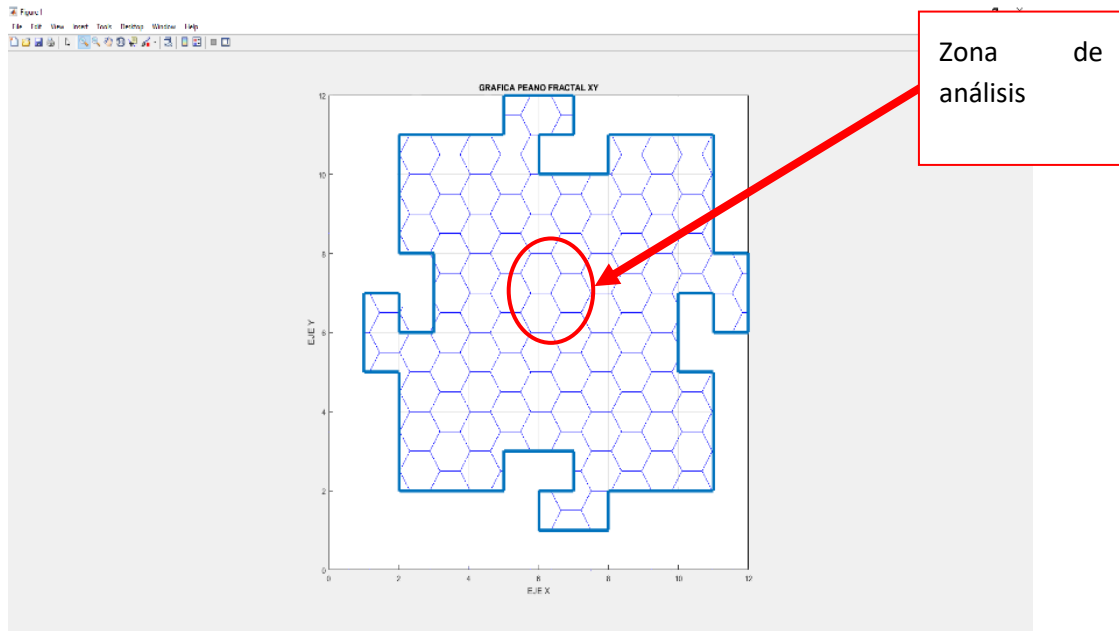


Figura 5.15 Zona de análisis de la malla de grafeno para la obtención de la zona de Brillouin y sus vecinos.

El volumen definido por la primera zona de Brillouin se determina tomando las superficies a la misma distancia entre un elemento de la red y sus vecinos como se muestra en la Figura 5.16.

Como se muestra en la Figura 5.16 el comportamiento del material de grafeno en el parche conservó sus propiedades de grafeno.

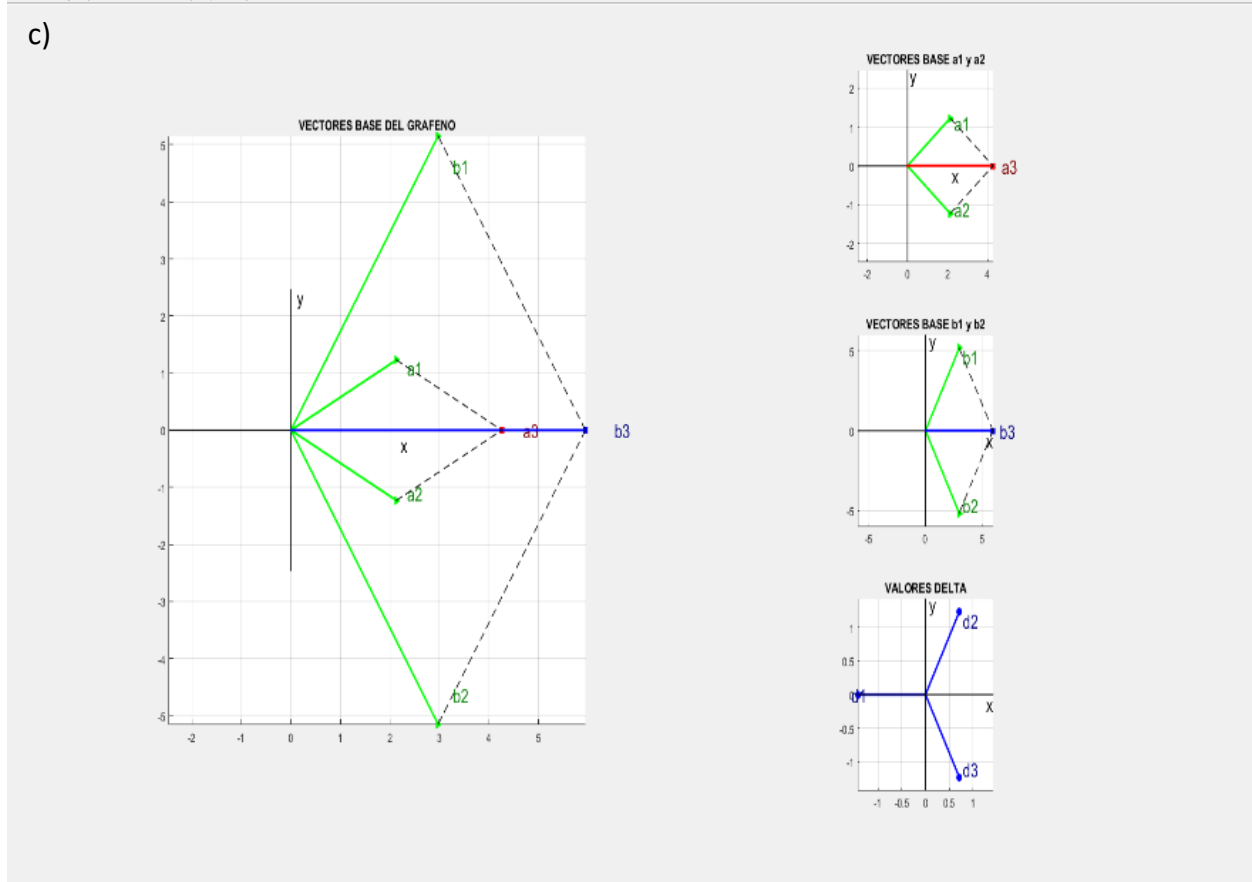
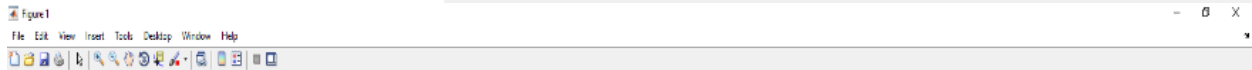
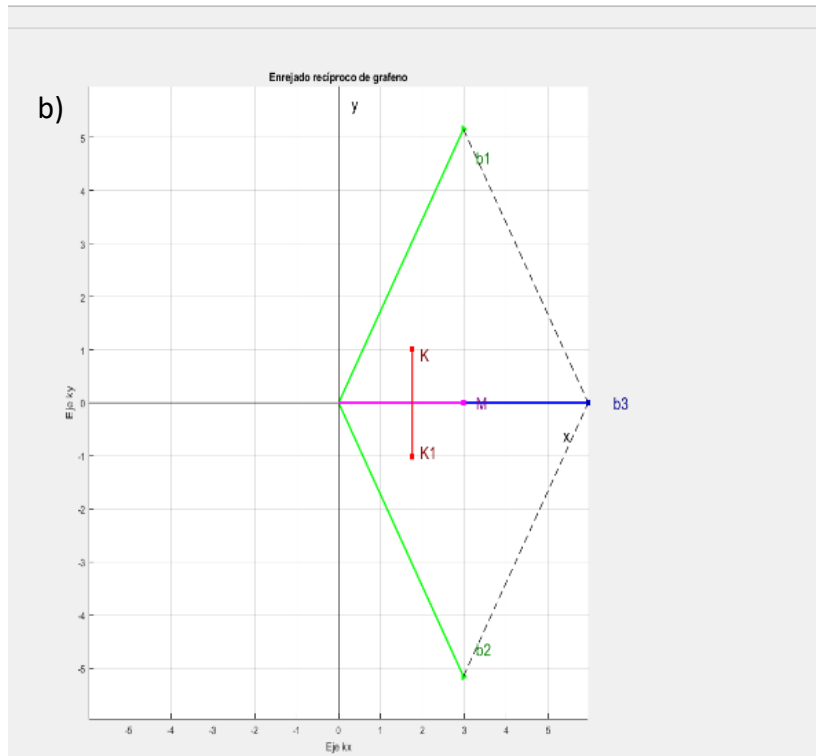
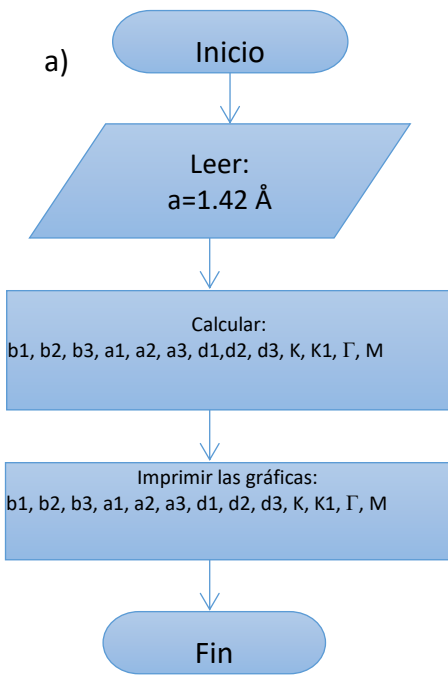


Figura 5.16 a) Diagrama de flujo del programa de los vectores primitivos y la primera zona Brillouin usado en MATLAB. b) gráficas de los vectores primitivos, c) vecinos de la primera zona de Brillouin.

## 5.6 Obtención y simulación de los puntos de Dirac y Nanocintas del grafeno por medio de MATLAB

En la Figura 5.17 se muestra la gráfica obtenida de la programación de la estructura de bandas a lo largo de las direcciones cristalográficas del grafeno, usando la aproximación de amarre fuerte, el cual nos apoya también para visualizar el adecuado funcionamiento del material. Las 8 bandas permiten 16 estados por celda unitaria, a causa de la degeneración de espín. En cada celda unitaria hay 8 electrones para llenar las bandas, por lo tanto, se encuentran 4 bandas totalmente llenas localizando la energía de Fermi del grafeno puro justo a la mitad, cruzando exactamente los puntos K que corresponden a las esquinas de la primera zona de Brillouin.

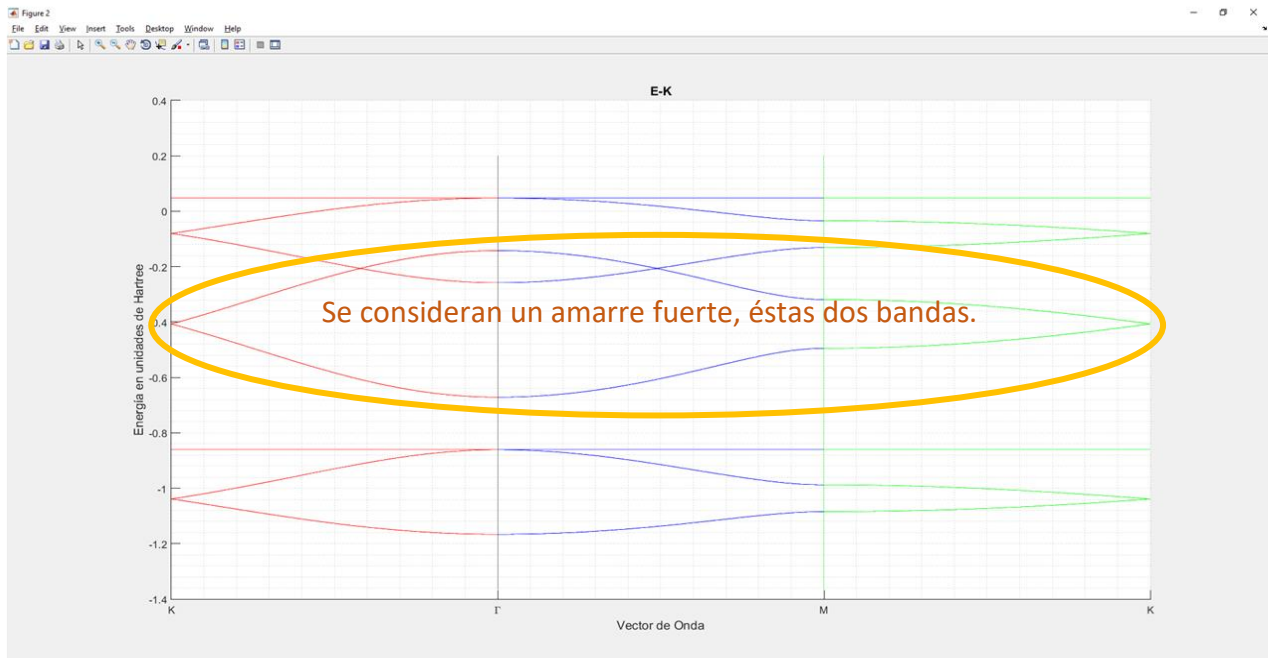


Figura 5.17 Gráfica de la estructura de bandas a lo largo de las direcciones cristalográficas, usando la aproximación de amarre fuerte, se muestran las 8 bandas.

En la Figura 5.18 las nanocintas (NanoRibbons) de grafeno (GNR, también llamadas cintas de nano grafeno o cintas de nano grafito) son tiras de grafeno con un ancho inferior a 50 nm.

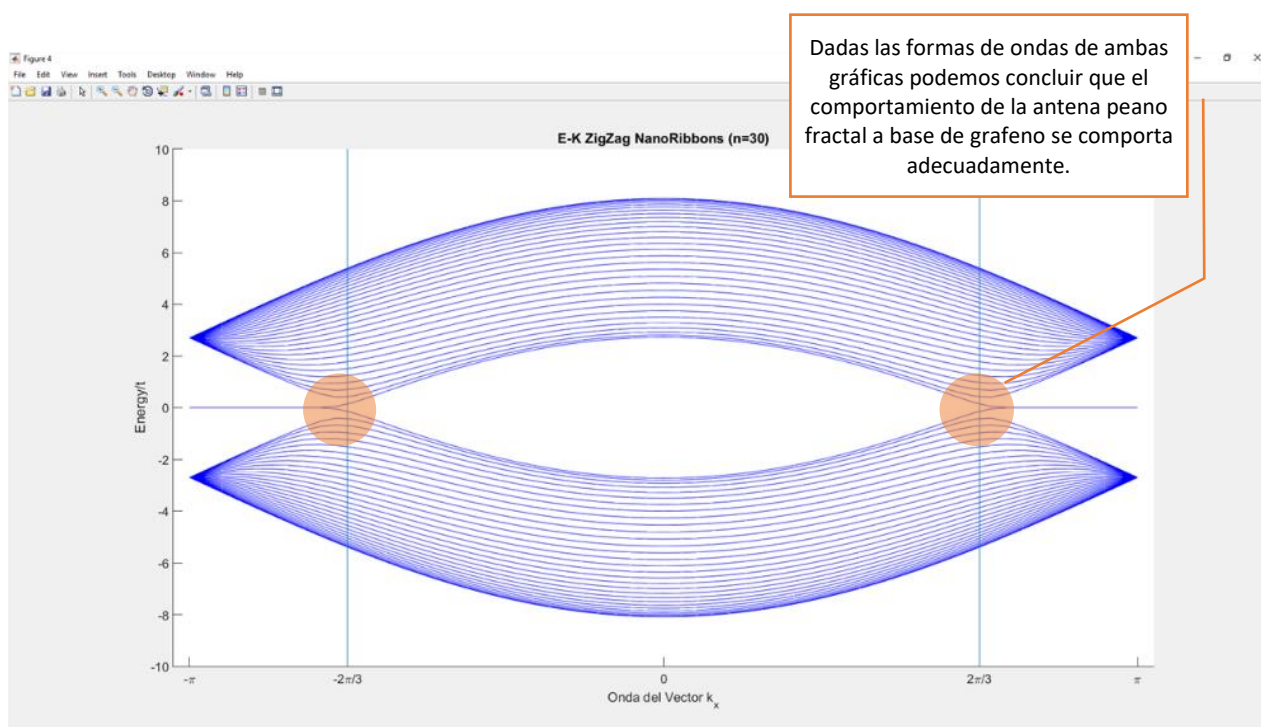


Figura 5.18 Gráfica de las nanocintas (NanoRibbons).

Los bordes en zigzag proporcionan el estado localizado en el borde con orbitales moleculares que no se unen cerca de la energía de Fermi. Se espera que tengan grandes cambios en las propiedades ópticas y electrónicas de la cuantificación .

Los nanocintas (NanoRibbons) en zigzag son semiconductores y presentan bordes polarizados por rotación. Su brecha se abre gracias a un inusual acoplamiento anti ferromagnético entre los momentos magnéticos en los átomos de carbono del borde opuesto. Este tamaño de espacio es inversamente proporcional al ancho de la cinta y su comportamiento se remonta a las propiedades de distribución espacial de las funciones de onda de estado de borde, y al carácter principalmente local de la interacción de intercambio que origina la polarización de espín. Por lo tanto, el confinamiento cuántico, el super intercambio entre los bordes y las interacciones de intercambio directo dentro del borde en zigzag GNR son importantes por su magnetismo y banda prohibida. El momento magnético del borde y el espacio de banda del zigzag GNR son inversamente proporcionales a la concentración de electrón/agujero y pueden ser controlados por adición de átomos alcalinos.

En la Figura 5.18 nos muestra una aproximación de los valores, cabe mencionar que se tomaron valores aleatorios de diferentes zonas del enrejado del grafeno para la gráfica.

## 5.7 Uso de GUI (interfaz gráfica usuario)

En la siguiente etapa del desarrollo del trabajo se hizo el uso de las GUI (interfaz gráfica de usuario) de los programas propuestos hasta este nivel los cuales nos van ayudar proporcionar un entorno visual sencillo para la comunicación entre los programas que se realizaron con el usuario. Las gráficas GUI se muestran a continuación.

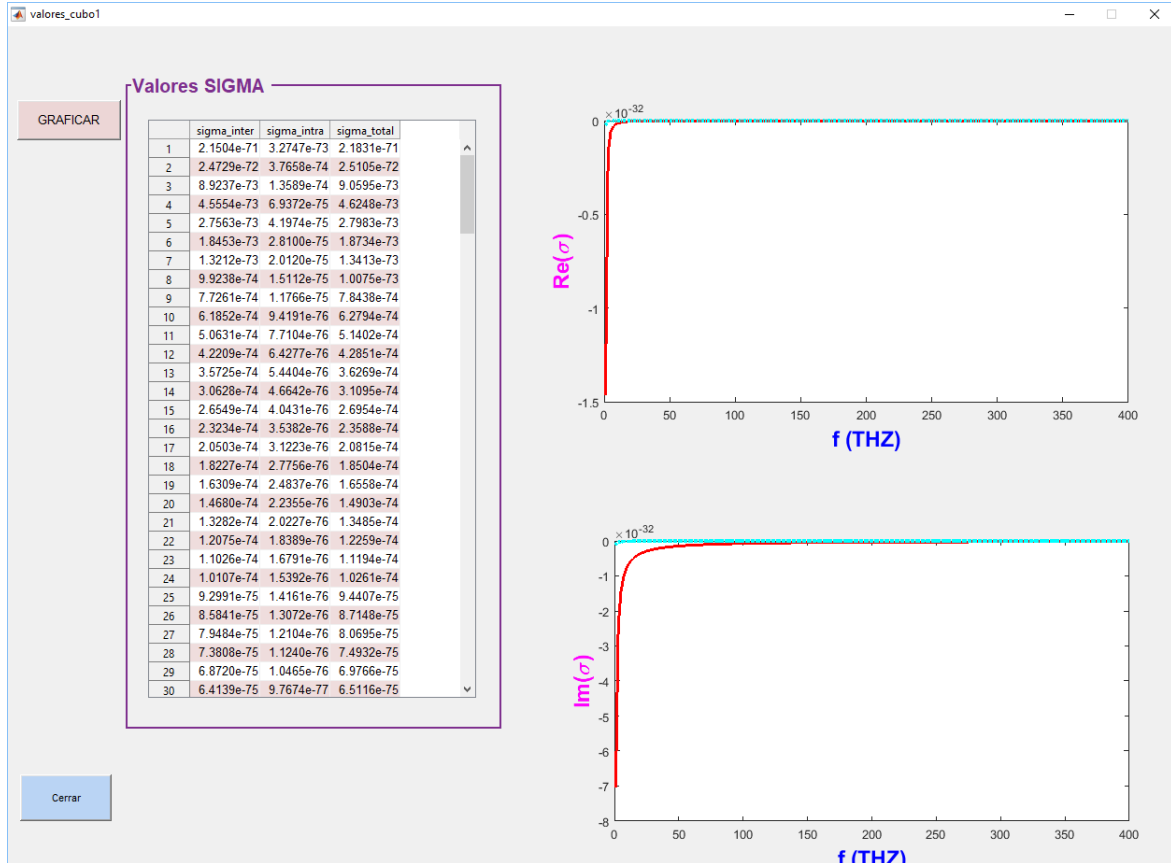


Figura 5.19 GUI (Interfaz Gráfica de Usuario) de los valores de la conductividad del grafeno.

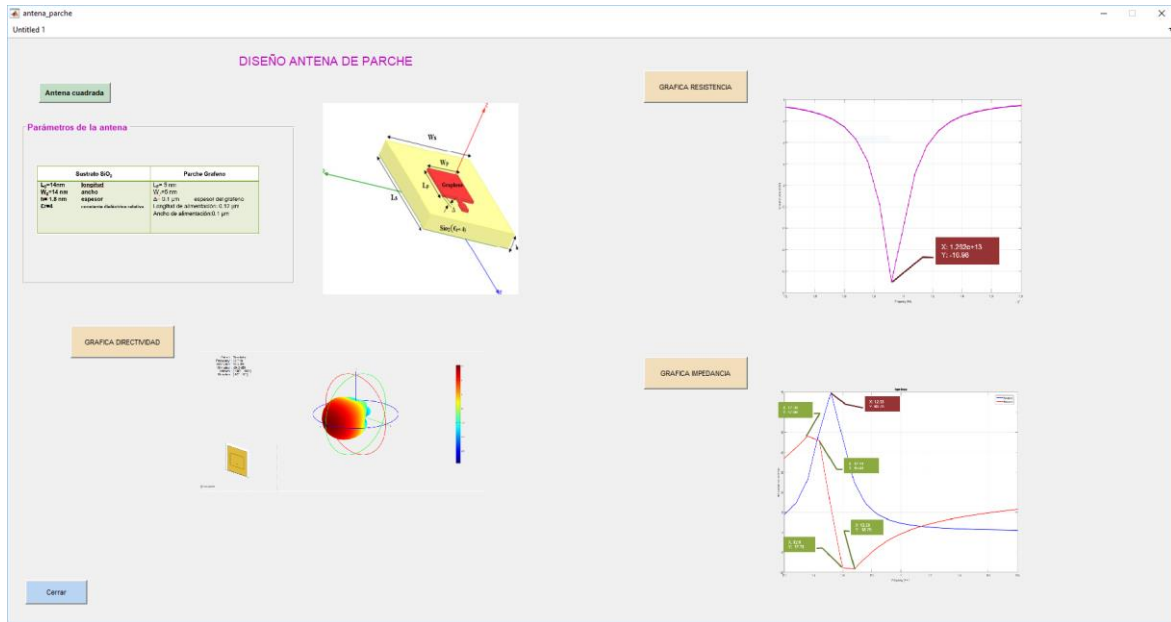


Figura 5.20 GUI de la simulación de la nano antena de parche cuadrado.

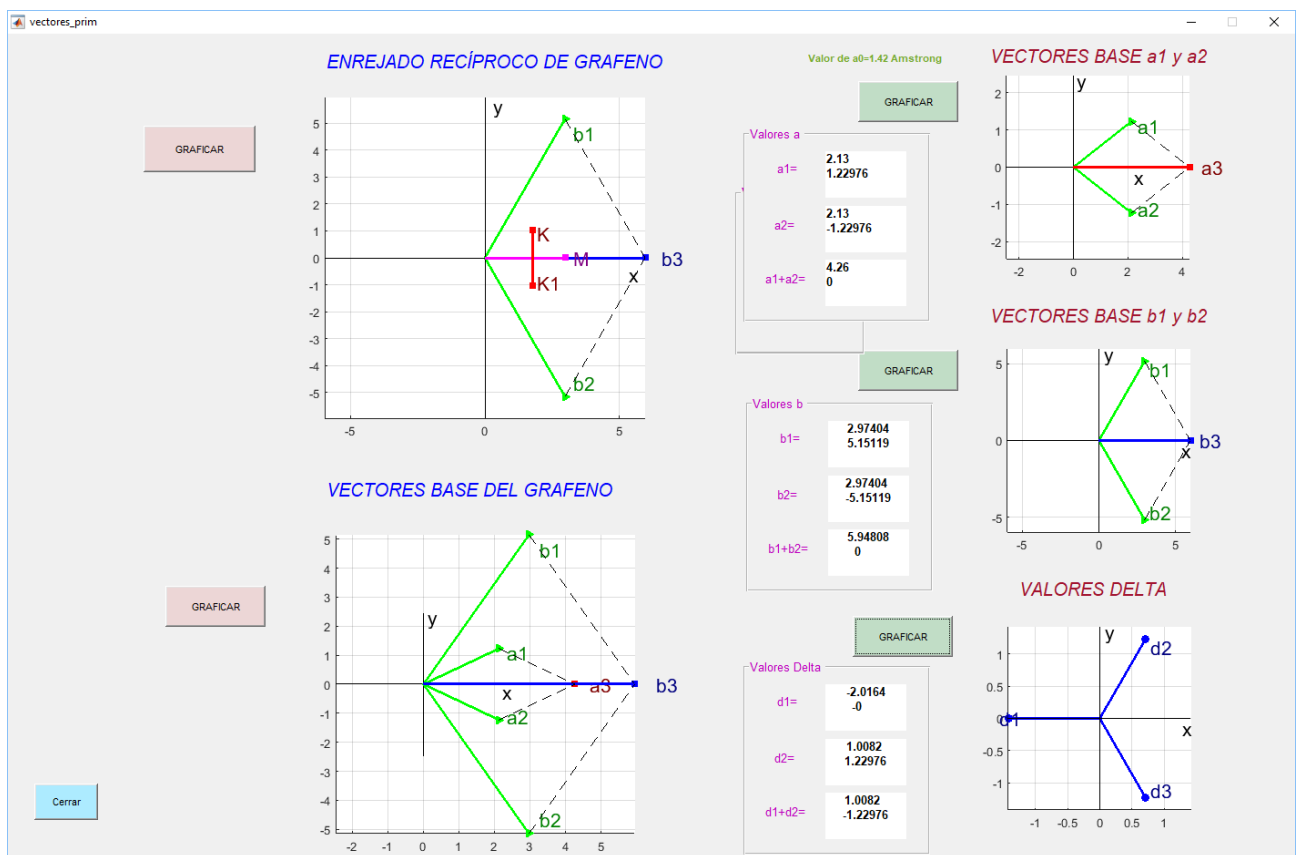


Figura 5.21 GUI de las gráficas de los vectores primitivos y vecinos de la primera zona de Brillouin con valores

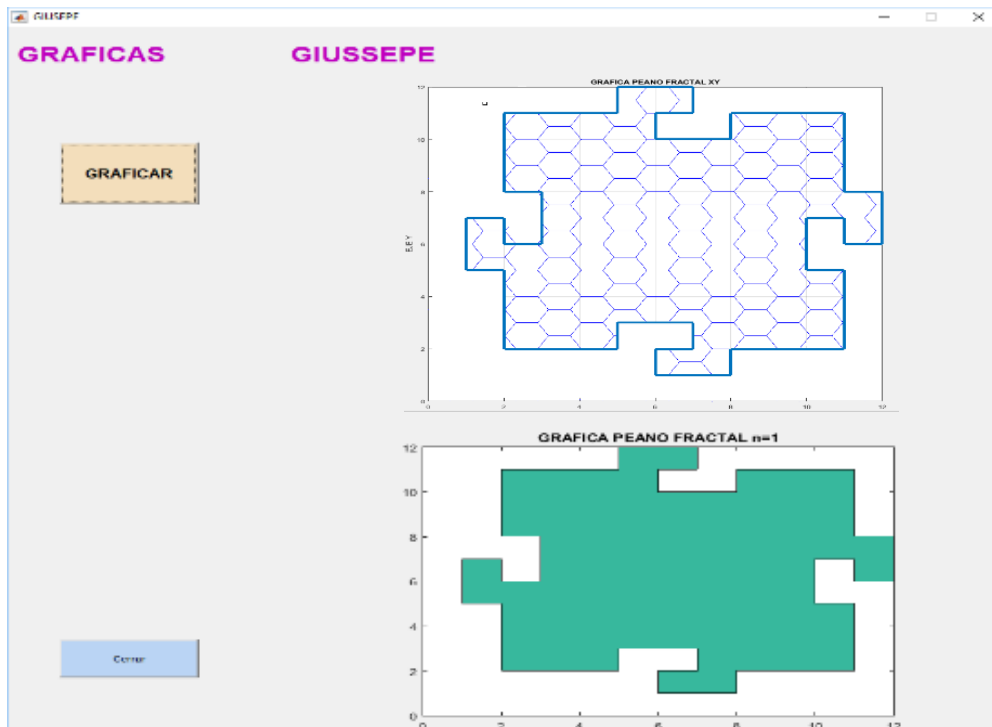


Figura 5.22 GUI gráficas del parche peano fractal n=1 con enrejado y sin enrejado

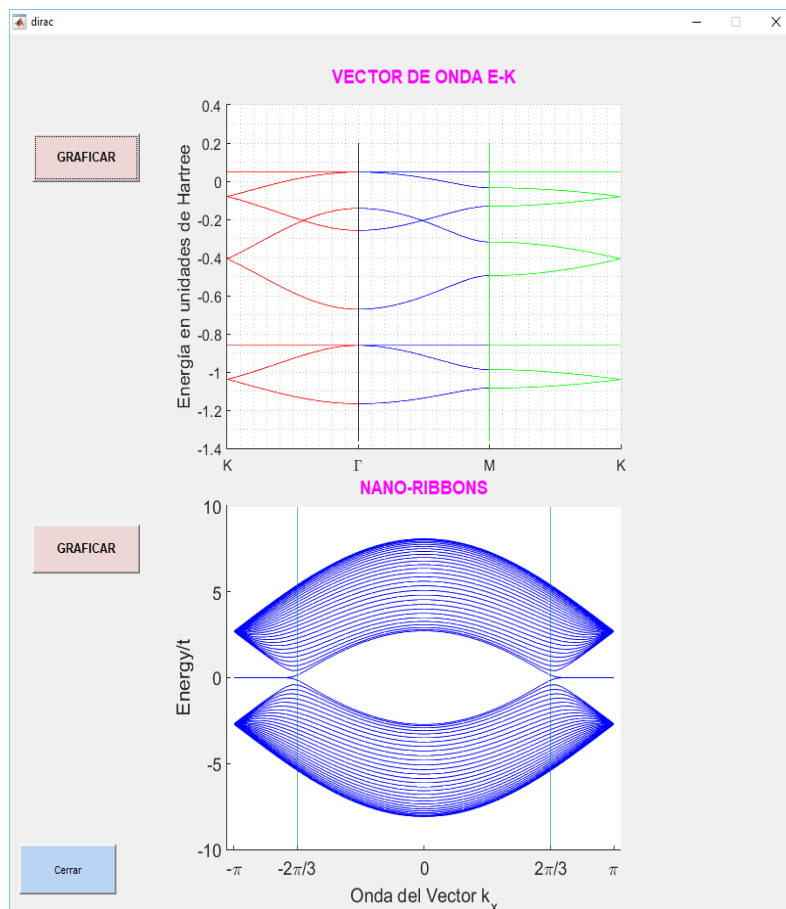


Figura 5.23 GUI gráficas vector de onda y nano ribbons.

## 5.8 Simulación de la antena peano fractal n=1 en Comsol Multiphysics 5.2

Se hizo uso del software de COMSOL Multiphysics 5.2 debido a la alta demanda de computo del fractal una vez diseñado como antena en MATLAB. Dadas las características del COMSOL fue más viable realizar la simulación y tomando el modelo de dispersión de Drude-Lorentz para la simulación del material de grafeno [26] [32] [33].

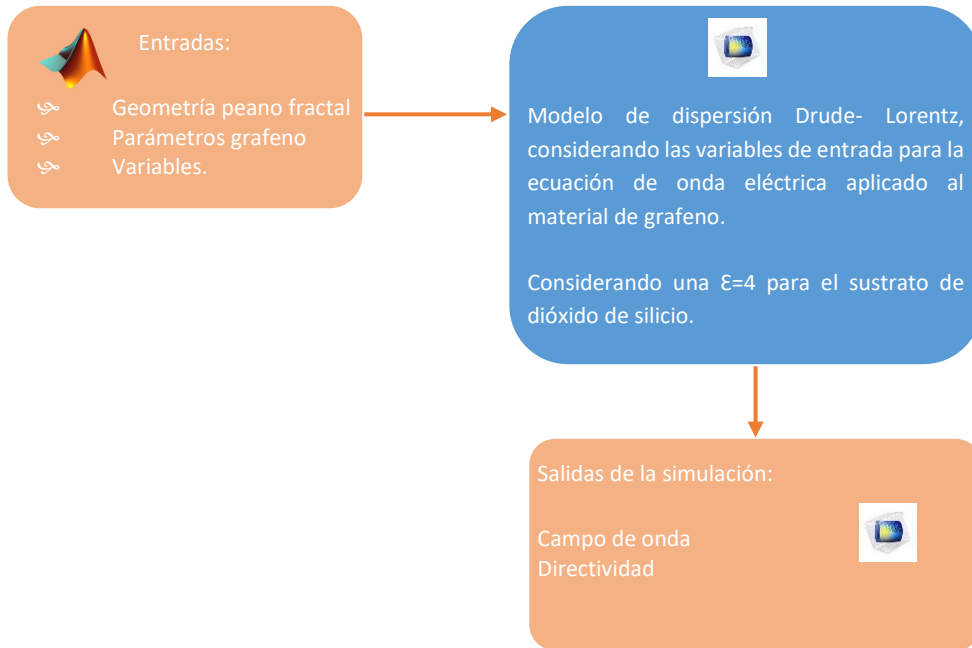


Figura 5.24 Diagrama de bloques de la simulación de la nano antena peano fractal.

De acuerdo con el diagrama de bloques se realizó una interfaz de MATLAB a COMSOL Multiphysics para obtener la geometría del peano fractal diseñado en MATLAB (Figura 5.13) y poder realizar la simulación de la antena en COMSOL Multiphysics.

Tomando en cuenta los valores del parche peano fractal de la Figura 5.12 se diseñó la geometría del parche en COMSOL que se muestra en las Figura 5.25 y Figura 5.26.



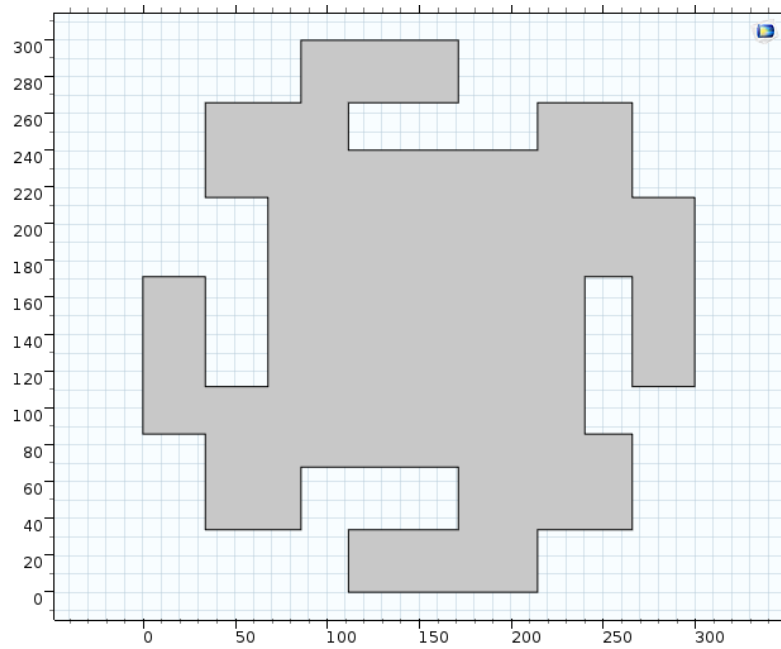


Figura 5.25 Geometría de la nano antena peano fractal 2D

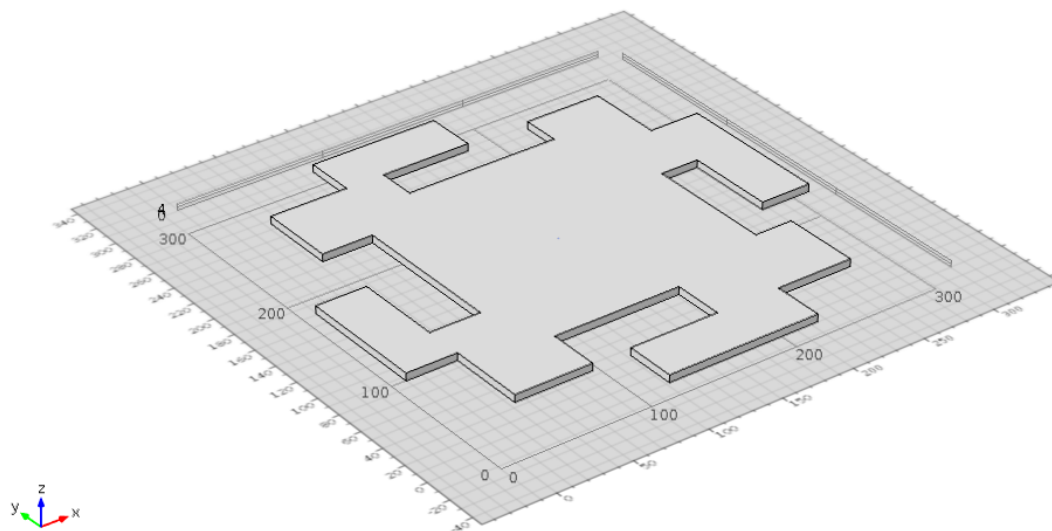


Figura 5.26 Geometría de la nano antena peano fractal 3D

Una vez realizada la geometría del parche peano fractal tomando en cuenta el modelo Drude-Lorentz del software COMSOL para el material de grafeno se realizaron los siguientes pasos:

- 1) Se especificaron los parámetros y las variables (Figura 4.4) de la antena, los cuales se guardaron en un archivo \*.txt.
- 2) Se dibujó la geometría (Figura 5.26) de la antena en base al artículo [26].
- 3) Se selecciona para el campo eléctrico el modelo de Drude-Lorentz [26].

- 4) Se prosigue a la simulación indicando en la sección frecuencia de la antena y el barrido.
- 5) Obtención de los resultados.

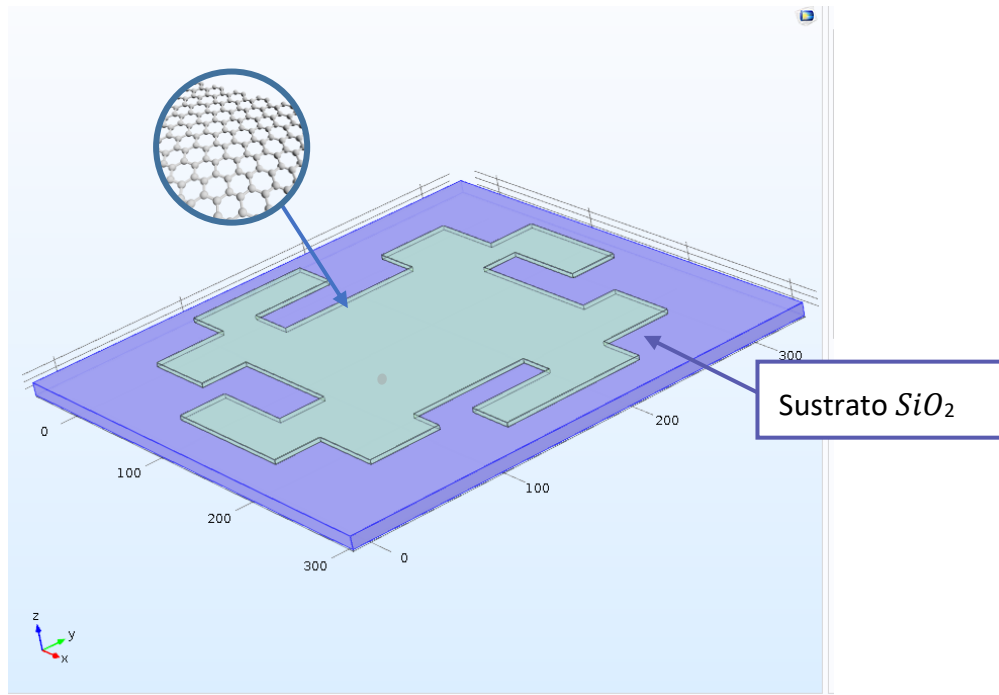


Figura 5.27 Diseño de la antena a base de grafeno sobre un sustrato de dióxido de silicio.

La Figura 5.28 muestra la geometría del área de la nano antena peano fractal iteración 1 sobre un sustrato de dióxido de silicio con una constante dieléctrica relativa de 4, el radio de la esfera de propagación del aire es de 250nm.

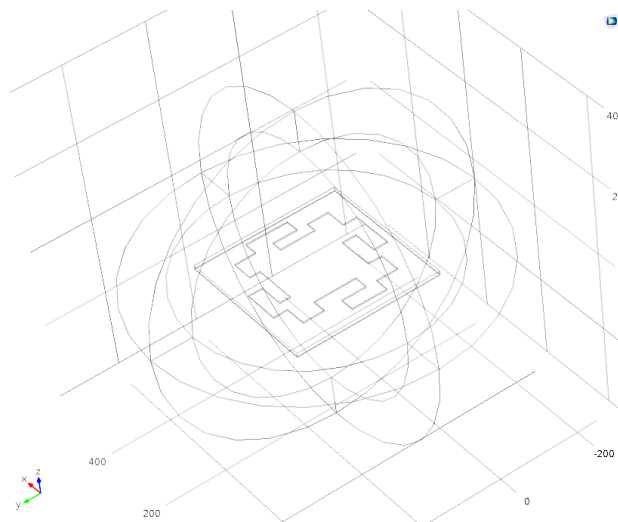


Figura 5.28 Geometría del área de la antena de parche peano fractal n=1

Una vez obtenida la geometría de la antena peano fractal en su espacio de radiación se realizó el cómputo del estudio para la obtención de los resultados arrojando la siguiente descripción general en el dominio de la longitud de onda como resultado de la simulación:

**General**

Description	Value
Defined by study step	<a href="#">Wavelength Domain</a>

**Computation information**

CPU	AMD A9-9410 RADEON R5, 2 cores
Operating system	Windows 8

**Log**

```

Stationary Solver 1 in Study 1/Solution 1 (sol1) started at 1-ago-
2018 12:52:41.
Linear solver
Number of degrees of freedom solved for: 40668834.
Symmetric matrices found.
Scales for dependent variables:
Electric field (comp1.E): 2.5e+005
S-parameter (comp1.Sparam1): 0.026
S-parameter (comp1.Sparam2): 0.026
Sparse null-space function used.
Stationary Solver 1 in Study 1/Solution 1 (sol1): Solution time: 53117 s (14
hours, 45 minutes, 17 seconds)

Physical memory: 29.13 GB
Virtual memory: 93.5 GB
    
```

En la Figura 5.29 a) se obtuvo la directividad en 3D a una  $\text{freq}(1)=1.711\text{E}12$  Hz Far Field: Far-field norm (V/m), obteniendo como resultado una frecuencia dentro del rango de los terahercios con una ganancia máxima de 0.17 dBi y una mínima de 0.04 dBi.

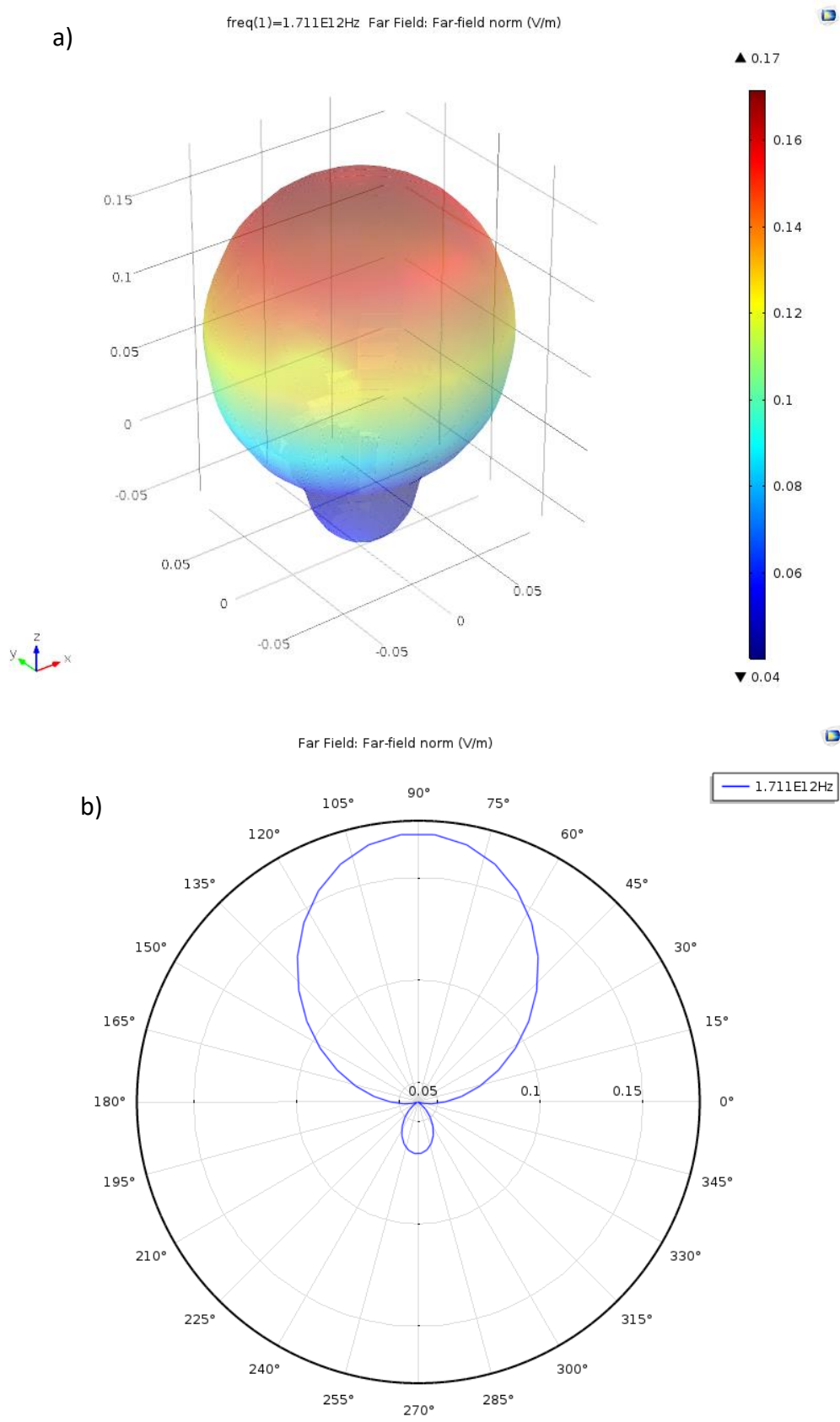


Figura 5.29 a) Directividad en 3D y b) Directividad en forma polar de la nano antena peano fractal n=1.

En la Figura 5.29 b) se muestra la directividad en forma polar en donde se puede observar el comportamiento de la directividad de la potencia de radiación como una antena direccional a una  $\text{freq}(1)=1.711\text{E}12$  Hz donde la ganancia está en dB en el plano de azimuth de  $90^\circ$ .

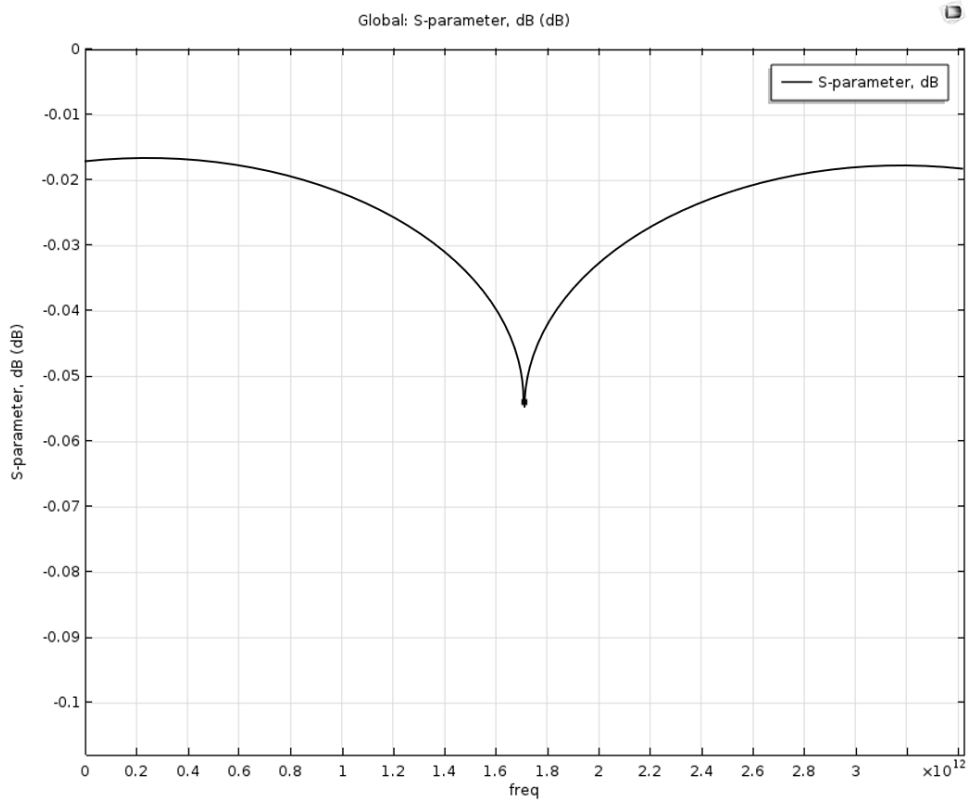


Figura 5.30 Obtención de la frecuencia de resonancia de la nano antena peano fractal n=1.

En la Figura 5.30 se muestra la frecuencia de resonancia a  $1.711 \text{ E}12$  Hz de la nano antena de parche. En el cual también se logra observar que se encuentra dentro del rango de los terahercios.

## Capítulo 6 CONCLUSIONES

Mediante el uso del lenguaje computacional de COMSOL Multiphysics 5.2 se pudo determinar la simulación de la antena fractal una vez diseñada en MATLAB, y dadas las características del COMSOL se simuló la nano antena peano fractal a la frecuencia de resonancia de los terahertz con las propiedades del grafeno. Se logró observar y corroborar las ventajas que se tiene con el uso del grafeno a niveles nanométricos en comparación de sus homólogos metálicos. También se puede considerar que las antenas fractales para la transmisión de información son multibanda. En el presente trabajo se logró obtener la frecuencia de resonancia en el rango de los Tera Hertz teniendo en cuenta el uso del grafeno como material conductor sobre un sustrato el dióxido de silicio.

En la realización de la simulación de la antena de parche peano fractal  $n=1$  a base de grafeno sobre un sustrato de dióxido de silicio, se obtuvieron las gráficas de enganche del grafeno para verificar la eficiencia de acuerdo con la variación de la cantidad de nanocintas de grafeno y en los cuales se comportó de manera correcta, y así poder verificar su viabilidad una vez que se unió correctamente a la malla de grafeno. En las gráficas de Vector de Onda así como la de Nano-Ribbons, podemos observar que el comportamiento de la antena fractal se comporta adecuadamente en los puntos K de Dirac, que son los puntos de mayor energía en el momento de la conducción. La antena fractal simulada en COMSOL Multiphysics tomando las variables y los parámetros para el modelo de Drude-Lorentz para la conductividad del material, tuvo una frecuencia de 1.711 Thz así como una directividad máxima de 0.17 dBi y una mínima de 0.04 dBi dando el uso de la antena fractal en el rango de los terahercios en un radio de propagación de 500 nm.

En la segunda etapa del trabajo se desarrollaron interfaz gráfica de usuario, el cual resultó con versatilidad para el desarrollo de los programas desarrollados en el transcurso de la maestría, para que la comunicación que se tiene con los mismo sea mejor visiblemente y más rápido.

En la primera parte del trabajo se realizó una recreación matemática de la ecuación de la conductividad del grafeno para diseñar la antena de parche nivel nanométrico, alimentado a base de grafeno sobre el material de sustrato de dióxido de silicio con una constante dieléctrica  $\epsilon_r = 4$ , que con ayuda de MATLAB (MATrix LABoratory) se logró obtener los parámetros para la antena de grafeno a partir de la ecuación de "KUBO", la cual obtuvo los valores intrabanda, interbanda y de conductividad total requerida para el material de grafeno. Cabe mencionar que los parámetros de la antena de parche grafeno se optimizaron para el funcionamiento en la banda de frecuencias en el rango

de 12,2 a 13,8 THz para poder comparar el adecuado comportamiento del material en el rango de los nanómetros.

En un trabajo futuro se contemplaría el diseño de una nano antena fractal con un mayor número de iteraciones para lograr una mayor área de radiación, manteniendo el rango de los terahercios aumentando así la velocidad y la bidireccionalidad para el envío y recepción de información de forma simultánea a diferentes frecuencias dentro del rango y poder lograr la resonancia múltiple en el mismo rango de los terahertz.

## Capítulo 7 BIBLIOGRAFÍA

---

- [1] C. Balanis, *Antenna Theory Analysis and Design*, 2nd ed., John-Wiley and Sons Publications, 1997.
- [2] I. A. J.M. Jornet, «Graphene-based nano-antennas for electromagnetic nano communications in the terahertz band,» de *Proceedings of the Fourth European IEEE Conference*, 2010.
- [3] «Avances de nanotecnología,» [En línea]. Available: <http://www.nanotecnologia.cl/que-es-nanotecnologia/>.
- [4] «El grafeno: propiedades y aplicaciones,» Graphenano. *Nanotechnologies*, Julio 2017. [En línea]. Available: <http://www.graphenano.com>.
- [5] «Graphene,» 2010.
- [6] K. V. O. Rodríguez G. Claramaria, «Propiedades y aplicaciones del grafeno,» Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, UANL, 2008.
- [7] B. V. J. Eduardo, «Grafeno puro,» de *Transporte electrónico en grafeno con desorden*, Instituto de Física, 2012.
- [8] A. Vakil, «Transformation Optics Using Graphene: One-Atom-Thick Optical Devices Based on Graphene,» *University of Pennsylvania*, 2012.
- [9] R. Bala, «Characterization of graphene for performance enhancement of patch antenna in THz región,» *Anupma Marwaha Dept. of ECE*, 2015.
- [10] R. P. Francisco, *Radiocomunicaciones*, Barcelona, España: Marcombo, 2007.
- [11] P. A. Anguera Jaume, «Teoría de antenas,» Ingeniería La Salle (Estudios Semipresenciales), España, 2008.
- [12] «Enciclopedia de Clasificaciones,» 2017. [En línea]. Available: <https://www.tiposde.org/general/845-tipos-de-antenas/>.



- [13] D. Paul, «Zur Elektronentheorie der Metalle; II. Teil. Galvanomagnetische und thermomagnetische Effecte,» *Annalen der Physik*, p. 369, 1976.
- [14] D. Paul, «Zur Elektronentheorie der metalle,» *Annalen der Physik*, p. 566, 1900.
- [15] S. M. Razavizadeh, «Simulation of Graphene in CST Microwave v2015 and COMSOL Multiphysics 5.2a,» *Researchgate*, January 2017.
- [16] e. a. I. Llatser, «Graphene-based nano-patch antenna for terahertz radiation,» *ELSEVIER*, 2012.
- [17] «COMSOL INC.,» [En línea]. Available: <https://www.comsol.com/>. [Último acceso: 2017].
- [18] «Mathworks,» [En línea]. Available: <https://la.mathworks.com/discovery/object-oriented-programming.html>. [Último acceso: 2017].
- [19] T. L. L. L. Moseley, *American Journal of Physics*, p. 676, 1978.
- [20] S. H. Homayoon Oraizi, «Miniaturization of Microstrip Antennas by the Novel Application of the Giuseppe Peano Fractal Geometries,» *IEEE TRANSACTIONS ON ANTENNAS AND PROPAGATION*, vol. 60, nº 8, 2012.
- [21] Llatser, «Radiation characteristics of tunable graphennas in the terahertz band,» *Radio Eng. 21 (4)*, p. 946–953, 2009.
- [22] J. Horng, «Drude conductivity of Dirac fermions in graphene,» *Phys. Rev. B* 83, 2011.
- [23] C. L. PETERSON, «Nanotechnology: From Feynman to the Grand Challenge of Molecular Manufacturing,» nº 0278-0079/04/\$20.00©2004IEEE, 2004.
- [24] K. N. A. Geim, «The rise of graphene,» *Nat. Mater.*, p. 183–191, 2007.
- [25] M. M. A. B. A. Azarbar, «A new terahertz microstrip rectangular patch array antenna,» *Int. J. Electromagn. Appl.*, pp. 25-29, 2014.

- [26] A. D. P. Dawar, «Bandwidth enhancement of RMPA using 2 segment labyrinth metamaterial at THz,» *Mater. Sci. Appl.*, p. 4579–4588, 2013.
- [27] S. S. J. S. P. G. M. C. F. V. M. S. D. V. Y. C. M. Jahan Dawlaty, «Measurement of the optical absorption spectra of epitaxial graphene from terahertz to visible,» *Am. Inst. Phys. Lett.* 93, pp. 1-3, 2008.
- [28] S. S. J. C. V. Gusynin, «Magneto-optical conductivity in graphene,» *J. Phys. Condens. Matter* 19, 2007.
- [29] G. Hanson, «Dyadic green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene,» *J. Appl. Phys.* 103 (6), 2008.
- [30] A. M. R. Bala, «Development of computational model for tunable characteristics of graphene based triangular patch antenna in THz regime,» *Springer: J. Comput. Electron.*, nº ISSN-1569-8025, pp. 1-6, 2015.
- [31] D. S. K. R. J. W. M. C. S. Anand, «Graphene nanoribbon based terahertz antenna on polyimide substrate,» *Optik, Science Direct* 125, 2014.
- [32] J. P. C. J. S. Gomez-Diaz, «Microwave to THz properties of graphene and potential antenna applications,» de *International Symposium on Antennas and Propagation*, Nagoya, Japan, 2012.
- [33] I. A. J. M. Jornet, «Graphene-based nano-antennas for electromagnetic nano communications in the terahertz band,» de *Proceedings of the Fourth European IEEE Conference*, 2010.
- [34] H. Ibach y H. Lüth, «Solid-State Physics, An Introduction to Principles of Materials Science (Second edición),» *Springer-Verlag*, nº ISBN 3-540-58573-7, 1996.
- [35] Xueyao Ren, «A Stacked Microstrip Antenna Array with Fractal Patches,» *Hindawi Publishing Corporation*, nº ID 542953, 2014.