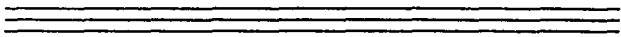




UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO



FACULTAD DE CIENCIAS

PRUEBAS DE POLARIZACIÓN EN NANOTUBOS SIMULADOS CON Y SIN QUIRALIDAD

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
F Í S I C O
P R E S E N T A
ALEJANDRO VALDERRAMA ZALDIVAR



DIRECTORA DE TESIS: DRA. CECILIA NOGUEZ



2002

DIVISION DE ESTUDIOS PROFESIONALES



FACULTAD DE CIENCIAS SECCION ESCOLAR

TESIS CON FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

Autorizo a la Direccion General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE: Alejandro Valdeaviana

FECHA: 19/Sep/2002

FIRMA: A. Valdeaviana



UNIVERSIDAD NACIONAL
DE INGENIERIA
LIMA

M. EN C. ELENA DE OTEYZA DE OTEYZA
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
"Pruebas de Polarización en Nanotubos Simulados Con y Sin Quiralidad"

realizado por Valderrama Zaldivar Alejandro

con número de cuenta 8448071-8 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

DRA. ANA CECILIA NOGUEZ GARRIDO *Chaguan S.*

Propietario

DRA. VIVIANNE MARQUINA FABREGA *V. Marquina*

Propietario

DR. RAUL ESCAMILLA GUERRERO *R. Escamilla*

Suplente

FIS. FERNANDO ANGELES URIBE *F. Angeles*

Suplente

DR. LUIS RODRIGUEZ FERNANDEZ *L. Rodriguez Fernandez*

Consejo Departamental de Física

Patricia Goldstein Menache
DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE
Coordinadora de Licenciatura en Ciencias
DEPARTAMENTO DE FISICA

T E S I S

**PRUEBAS DE POLARIZACIÓN EN
NANOTUBOS SIMULADOS
CON Y SIN QUIRALIDAD**

Alejandro Valderrama Zaldivar

T E S I S

**PRUEBAS DE POLARIZACIÓN EN
NANOTUBOS SIMULADOS
CON Y SIN QUIRALIDAD**

Alejandro Valderrama Zaldivar

Dedicatoria

"Aquellos que no pretenden suponer ni adivinar, sino descubrir y saber, y que no se proponen construir mundos ficticios ni fantásticos, sino estudiar y examinar la naturaleza de este mundo suyo, deben dirigirse hacia los propios hechos en toda ocasión."

F. Bacon, 1620.

A mis padres

Agradecimientos

A mis padres sin cuyo apoyo este trabajo hubiera sido imposible.

A mi Directora de tesis la Dra. Ana Cecilia Noguez Garrido.

A Tania.

Agradecimientos personales

Porque aún después de tanto tiempo están esperando este trabajo. A esos maestros y amigos, amigos y maestros que me han prestado su ayuda de tantas formas y me han dejado enseñanzas duraderas: Álvaro de la Paz, José Antonio Avalos, Enrique de la Paz, Mauricio Aguilar; José Ernesto Marquina, Vivianne Marquina, Ma. Luisa Marquina, Rosalía Ridauro, Raúl Gómez, Romilio Tambuti; Héctor Behm, Javier Taibo, Nuria García, Fernando Ramírez, Eduardo Peters, Roberto Morales; Enrique Macías, Cándido Martínez, Virginia Martínez; Carlos Taibo, Alfonso Vega, Jorge Zurita, Alberto Lara; Héctor Ceceña, Víctor Ortega, Alejandro Fernández; Yuri Nahamad, Elena Salazar, Sergio Hernández, Lorenzo Calzado, Abraham Pita, Javier Ballesteros, Abel Bernal, Paola Pedroza, Alberto Salazar, Carlos Ruiz, Alejandro Moreno, Cesar García, Ancelmo García, Daniel Barrón, Daniel Durini, Alfonso Bautista, Gerardo Medina, Cecilia Valencia y los compañeros del Consejo Independiente Universitario.

Agradecimientos a profesores

A aquellos profesores de física y matemáticas por los que estudiar en la facultad de ciencias es algo que realmente vale la pena:

Alberto Barajas, Leopoldo García-Colín, Juan Manuel Lozano, Rebeca Luna, Agustín Ontiveros, Gilberto Flores, León Krusner, José Ernesto Marquina, Rosalía Ridauro, Francisco Herrera, Jorge Ize, Marcos Ley Koo, Margarita Sánchez, Augusto Cabrera, Manuel Peimbert, Julieta Fierro, Marco Martos, Rodolfo Martínez, Antón María Minzoni, Octavio Novaro Peñaloza, Luis de la Peña, Pier A. Mello, Gerardo Carmona, Enrique Moreno y Carmen Vareca.

Con maestros como ellos, estudiar física es un gran placer y una verdadera aventura por el conocimiento científico.

Agradecimientos especiales

A la Facultad de Ciencias, al Instituto de Física y a la UNAM.

ÍNDICE DE CONTENIDO

Resumen _____	13
---------------	----

CAPÍTULO 1 SISTEMAS NANOSCÓPICOS

Introducción _____	16
Antecedentes _____	21
Cómputo de Sistemas Nanométricos _____	22
Cronología _____	23
Fabricación de Nanomateriales _____	25
Fabricación de Nanotubos _____	27
Métodos Teóricos de Estudio _____	29
Dinámicas Moleculares _____	29
Método de Enlace Fuerte _____	31
Método de Simulación Ab Initio _____	32
Uso de la Teoría Clásica _____	33
Aproximación de Dipolo Discreto _____	34

CAPÍTULO 2 SIMULACIÓN DE NANOTUBOS

Nanotubos de Carbono _____	38
Nanotubos Quirales _____	39
Características de los Nanotubos _____	41

Modelo Computacional de un Nanotubo	43
Algunos Ejemplos	44
Descripción del Algoritmo para Simular Nanotubos en Disposición Recta Longitudinal y con Extremos en Zig-zag	46
Simulación de Nanotubos Quirales	49
Formalismo: Teoría Microscópica	52
El Dipolo Eléctrico	52
Radiación de un Dipolo Oscilante	54
Dipolos Inducidos	56
Campo Electrostático en un Nanotubo	59
Campo Dentro y Fuera de un Nanotubo	60
Susceptibilidad Eléctrica y Constante Dieléctrica en un Nanotubo de Carbono	61
Respuesta de un Nanotubo a un Campo Electromagnético	62
Teoría Aplicada a Nanotubos de Carbono	64
Desarrollo Teórico Computacional	67
Polarización Estática Total	67
Determinación de la Polarización de un Nanotubo	71

CAPÍTULO 3 ANÁLISIS DE DATOS

Selección de Muestras	74
Muestreo de Datos	80
Resultados Obtenidos	90
Comparación Quiral	91
Análisis de los Datos Obtenidos	118

Discusión _____	123
Conclusiones _____	127
Posibles Aplicaciones _____	128

APÉNDICES

Apéndice 1 Códigos Fuente de los Programas Simuladores _____	132
Programa en Microsoft QBASIC Simulación de Nanotubos en Disposición Recta Longitudinal y con Extremos en Zig-zag _____	132
Programas en Microsoft QBASIC para la Simulación de Nanotubos Quirales _____	136
Apéndice 2 Código Fuente del Programa de Evaluación Numérica _____	139
Programa en Microsoft Visual C ++ versión 6.0 Determinación de la Polarización de un Nanotubo _____	139
Apéndice 3 Programas Adicionales _____	146
Programa en Microsoft QBASIC para la Simulación de una Malla Hexagonal _____	146
Apéndice 4 Pruebas de Convergencia _____	147
1ª Aproximación para α real _____	147
2ª Aproximación para α real _____	148
3ª Aproximación para α compleja _____	149
Apéndice 5 Pruebas de Cálculo _____	151
Caso Analítico _____	151
Caso Numérico _____	152
Apéndice 6 Comparación con un Caso Ideal _____	153
Referencias _____	155

Resumen

En este trabajo se hace una breve revisión en torno de los temas relacionados con la aplicación de las ciencias y las tecnologías en la escala espacial de 10^{-9} metros (nanómetros) que se conoce como nanoescala¹.

Se distingue, en esta revisión temática, a los objetos moleculares conocidos como nanotubos, que son mallas de hexágonos, usualmente compuestas de átomos de carbono, enrolladas cilíndricamente a manera de tubos, y de los que se describen sus características principales y su importancia general.

Se plantea el estudio y la caracterización de los nanotubos por medio de la técnica de análisis conocida como Aproximación de Fourier Discreto; y que, con ayuda del procesamiento numérico computacional, permite calcular la polarización eléctrica de los nanotubos que es una de las propiedades más importantes y con mayores aplicaciones de estos objetos moleculares.

Para ello se crearon un conjunto de programas Simuladores de Nanotubos en Microsoft QBASIC que funcionan como graficadores tridimensionales (3D) y permiten realizar:

- 1. La representación de una malla hexagonal de átomos de carbono.*
- 2. La representación de un nanotubo de carbono con disposición recta longitudinal y la determinación de las coordenadas de los átomos que conforman su estructura.*
- 3. La representación de nanotubos de carbono quirales (o con torcimiento) de diferente orden; y la obtención de las coordenadas de los átomos que conforman sus estructuras.*

Los programas Simuladores de Nanotubos permiten variar los parámetros dimensionales en un amplio margen. Así que, con ellos se pudieron establecer los tamaños de los componentes básicos de estas nanoestructuras, que son: las aristas o enlaces atómicos de los hexágonos de la malla; el radio para el enrollamiento, es decir, el número de grupos hexagonales por anillo; y también, la cantidad de anillos o la longitud de la estructura de manera precisa.

¹ Muchos de los artículos que sirvieron como material de consulta para la presente tesis fueron seleccionados de la Base de Datos Inspec que puede ser accesada desde la dirección www.fisica.unam.mx de la Biblioteca Juan B. De Oyarzabal del Instituto de Física de la UNAM.

Estos programas Simuladores de Nanotubos permiten contar y determinar los vectores posición de cada uno de los vértices de la malla hexagonal enrollada cilíndricamente que representa un nanotubo de carbono ya sea recto o con quiralidad; y además, crean los archivos de datos que registran los valores de las coordenadas de los vértices en las mallas de los nanotubos simulados, que corresponden a las posiciones de los átomos de carbono de la estructura molecular nanoscópica en cada caso.

Un programa de Evaluación Numérica desarrollado en Microsoft Visual C++ versión 6.0 lee la información de los archivos de datos y calcula la polarización de cada uno de los elementos que conforman los nanotubos. Los resultados quedan registrados en otros archivos de datos. Se presentan las listas y gráficas de la información obtenida, elaboradas con ayuda de la hoja de lectura electrónica Microsoft Excel versión 2000.

Los datos obtenidos se analizaron de la siguiente manera:

Se revisó primeramente el caso de los nanotubos con disposición longitudinal recta con extremos en zig-zag, sin torcimiento o quiralidad; contando desde 12 hexágonos por anillo hasta 150 y de 4 a 220 anillos de longitud para manejar las interacciones de hasta 9000 elementos o átomos entre sí; situados en los vértices de la malla hexagonal que simula la estructura molecular enrollada.

Teniendo la configuración atómica de cada nanotubo de carbono se calculó el momento dipolar de cada uno de los átomos y también el promedio en la estructura.

A partir de modificaciones de la estructura del prototipo recto longitudinal con extremos en zig-zag se generaron otros nanotubos similares pero con un factor de quiralidad respecto del eje longitudinal y manteniendo la apertura; se calculó su polarización y se compararon los datos.

Se obtuvo como resultado general que: si existe dependencia en la polarizabilidad de las estructuras de los nanotubos, con sus dimensiones y también con su quiralidad.

Por ello, el método empleado en ésta tesis resulta sumamente útil para la caracterización de estas singulares estructuras y para continuar el estudio de sus propiedades eléctricas y ópticas.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

CAPÍTULO 1

SISTEMAS NANOSCÓPICOS

Introducción

Actualmente la aplicación científica en diversas escalas espaciales se hace indispensable. Las estrellas se estudian en la escala "cósmica", los fenómenos que pueden ser apreciados mediante la percepción humana se encuentran en la escala macroscópica; las propiedades de los sistemas se definen muchas veces como resultado de la acción conjunta o colectiva de sus constituyentes al nivel de la mesoescala; las células de los seres vivos, los virus y las bacterias están en la microescala y finalmente, subyacente a la nanoescala, se encuentran los componentes más básicos y fundamentales de la materia en la escala atómica.

La descripción y explicación de los diferentes fenómenos de la naturaleza nos hace comprender que el universo tiene diversas interpretaciones según la escala en la que se realice cada aproximación y que deben entrelazarse para constituir un cuerpo de conocimiento general coherente sobre la realidad humana.

El estudio del universo en la escala espacial de 10^{-9} metros (nanómetros); o sea, en el mundo nanoscópico que se encuentra en medio de las interacciones de los átomos y las moléculas, donde operan las reglas de la mecánica cuántica; y la escala mesoscópica, donde las características de los materiales emergen del comportamiento conjunto de miles de millones de átomos, resulta de gran interés debido a que las estructuras moleculares correspondientes a esta escala tienen propiedades físicas y químicas inusuales y muy interesantes; ya que por lo general resultan dependientes del tamaño y de las interacciones con el medio.

Algunas estructuras nanométricas son excepcionalmente fuertes desde el punto de vista de la mecánica debido a su perfecta configuración molecular, y pueden producir comportamientos eléctricos, ópticos y químicos *exóticos*, es decir, poco conocidos.

Así por ejemplo, el color de una pieza de oro se mantiene dorado cuando se reduce de pulgadas a milímetros o a micras, pero el color cambia sustancialmente en el régimen de los nanómetros². La absorción y la dispersión de la luz por partículas de plata y oro nanoscópicas y sus agregados ofrecen un mecanismo poderoso para detectar moléculas importantes en una variedad de aplicaciones para todas las ciencias y en particular para la biología molecular. Similarmente, sus puntos de fusión cambian a medida que, estas partículas, ingresan en la nanoescala, donde las energías de superficie se vuelven comparables a las energías de ensamble o acoplamiento molecular.

2 K. Lance Kelly y otros han estudiado el comportamiento óptico de los materiales (oro y plata) desde el nivel macroscópico hasta las nanoescalas.

Ya que las nanoestructuras se definen con dimensiones características de uno a cientos de nanómetros (miles de nanómetros son micras) y los átomos tienen tamaños de 0.1 a 0.3 nm, entonces estas estructuras moleculares pueden contener de 10^3 a 10^{10} átomos.

Por ejemplo, supóngase un cubo de 100 nm de lado. Entonces si en un nanómetro se pueden encontrar hasta 10 átomos, se tendrían en este cubo un máximo de 1000 átomos por lado y un total de 10^9 átomos.

Tomando lados de 999 nanómetros como un límite geométrico, pues 1000 nanómetros ya es una micra ($\mu\text{m} = 10^3$ metros) y átomos de 0.3 de nanómetro, se tendrían prácticamente las 10^{10} partículas mencionadas.

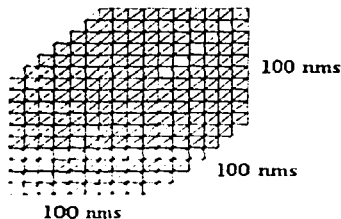


FIGURA 1-1 Espacio nanoscópico.

Así que las estructuras más grandes pertenecientes a la escala nanoscópica no pueden exceder este número de átomos o partículas componentes, ya que caerían fuera del mundo nanoscópico. Sin embargo, es importante considerar que, cuando se realiza el estudio de estructuras nanoscópicas, el término "nanoscópico" no se maneja con un límite superior rígido, sino que se toman en consideración las características físicas de los objetos, que los hacen pertenecer, en cuanto a sus propiedades e interacción con el medio, a esta escala espacial.

Por otro lado, es en esta región espacial que se encuentran las estructuras componentes básicas de la materia y no es posible construir más pequeñas ya que el tamaño de los átomos representa un límite inferior fundamental; para hacer cualquier cosa más pequeña se requeriría manipular el núcleo atómico, lo que significa esencialmente transmutar un elemento químico en otro.

Recientemente se ha despertado un enorme interés en la ciencia y la tecnología de los materiales, dispositivos y aplicaciones en nanoescalas ya que se tiene la idea de que hay superioridad en las estructuras correspondientes, en cuanto a sus propiedades eléctricas, químicas, mecánicas u ópticas; debido a que, dichas propiedades podrán controlarse con mayor precisión.

Aunque no siempre más pequeño significa mayor eficacia, para lo cual se pueden formular muchos ejemplos, las estructuras compuestas de átomos y moléculas en nanoescalas constituirán las unidades básicas o los bloques de construcción para fabricar las nuevas generaciones de materiales, dispositivos electrónicos y también de sus aplicaciones.

Algunas de las áreas más destacadas en ciencia y tecnología de nanoescalas son:

- **Computación:** desde este punto de vista las nanoestructuras tienen interés en dos direcciones diferentes.

1. Como un reto de cálculo numérico, ya que las nanoestructuras pueden contener hasta 10^3 ó 10^{10} átomos que interactúan entre sí.

Debido a que la mecánica y la electrodinámica continuas trabajan bien para materiales cuyos constituyentes básicos son apenas mayores que la escala donde se encuentran las micras el principio de correspondencia requiere que los cálculos computacionales, en ocasiones usen métodos cuánticos para reproducir las predicciones correctas en el análisis continuo.

2. Los dispositivos electrónicos, así como las herramientas con las que se calcula, ciertamente involucran estructuras en nanoescalas. En el futuro lo más seguro es que la microelectrónica se convierta en una nanoelectrónica con posibilidades de cómputo cuántico a base de interruptores moleculares, nanotubos conectores y memorias de nanopuntos magnéticos. Además, la posibilidad de usar materiales de carbono en vez de silicio en los componentes electrónicos resulta muy interesante ya que pueden facilitar la producción y aumentar las funciones en los componentes integrados.

Para la nanotecnología los modelos computacionales han jugado un importante papel en la explicación de algunas observaciones experimentales recientes en metalurgia, ciencias biomédicas y de materiales; y también para la predicción de estructuras (o propiedades) que luego pueden ser fabricadas (o medidas) en experimentos.

- **Física:** fundamentalmente incluye el estudio de las estructuras nanoscópicas que van desde unos cuantos átomos a nanoestructuras que contienen más de 10^5 átomos, para las cuales la forma y el tamaño resultan parámetros cruciales ya que estas determinan sus propiedades físicas como son: las eléctricas, las ópticas y las mecánicas.

Resulta necesario considerar que, en muchos casos, los sistemas nanoscópicos no son lo suficientemente grandes como para librarse de los efectos cuánticos. Por ello presentan comportamientos interesantes y con seguridad de gran importancia para determinar la funcionalidad que se presenta en una amplia variedad de moléculas; y que, puede emplearse en un dispositivo electrónico o bien encontrarse en alguna proteína al realizar su actividad biológica.

- **Ciencias biomédicas:** actualmente se estudian biosensores que permitan reconocer algún tipo de molécula en el interior del cuerpo³ y pretenden entender mejor a las cuatro biomáquinas fundamentales de la naturaleza:
 1. *Los ribosomas:* son el punto intermedio entre la información y la acción. Ahí se construyen las proteínas para los aminoácidos usando moléculas de RNA como mensajeros.
 2. *Los cloroplastos:* convierten los fotones en energía.
 3. *Las mitocondrias:* crean el ATP que participa en muchas reacciones biológicas.
 4. *Los flagelos de las bacterias:* descomponen el ATP para generar movimiento⁴.

También para la química y las ciencias de materia condensada resulta importante el comportamiento de las estructuras moleculares en estas dimensiones, pues entre otras cosas, amplía la gama de procedimientos para crear toda clase de compuestos.

Además, los descubrimientos de los nuevos Microscopios de Fuerza Atómica (AFM Atomic Force Microscope) y de Barrido por Tunelamiento (STM Scanning Tunneling Microscope), creado por los investigadores de IBM Gerd Binnig y Heinrich Rohrer ganadores del premio Nobel en 1981, que permiten "ver" las manifestaciones de átomos individuales y también como se mueven de un lugar a otro, abren un amplio campo de estudio para las nanociencias.

La punta del microscopio de fuerza atómica, tiene un ancho entre 2 y 30 nanómetros; y se usa para probar superficies y manipular moléculas. Hoy en día se considera el símbolo de la revolución nanotecnológica.

Para llevar a cabo el sondeo de la muestra, la punta se pone en contacto directo con la misma, la deflexión en la punta es medida por un rayo láser.

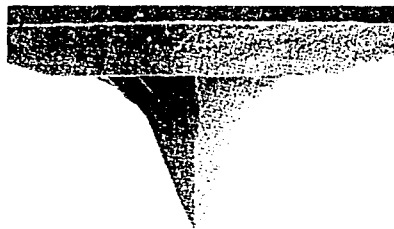


FIGURA 1-2 Punta del AFM⁵.

3 Recientemente ha adquirido interés el estudio de nanopartículas de oro y plata como componentes de sensores químicos y biológicos. Estas partículas tienen un diámetro de 1 a 100 nm.

4 Montemagno extrajo una proteína de motor rotatorio de la célula de una bacteria y lo conectó a una nanovarilla de unos 750 nm de largo por 150 nm de ancho fabricada con técnica litográfica.

5 Imagen de Felice Frankel, Scientific American, septiembre de 2001.

Esta nanopunta también puede ser usada para mover nanopartículas en superficies, o con ayuda de una corriente eléctrica como pequeña fuente de rayos de electrones, para crear rasgaduras en películas monoatómicas siguiendo algún patrón geométrico.

Las estructuras nanoscópicas pueden tener una amplia gama de aplicaciones. Actualmente, con fines médicos, se empiezan a usar nanopartículas como minúsculos sensores para estudiar las células; en la industria química se producen nanopartículas de óxido de zinc para uso en cremas protectoras del sol debido a que la crema, usualmente blanca, se ve transparente ya que las diminutas partículas no dispersan la luz visible. En el ramo energético se producen Zeolitas que son minerales con poros de tamaños menores a un nanómetro y que son catalizadores para romper moléculas largas de hidrocarburos en los procesos para formar gasolinas. En cuanto a materiales nuevos se tienen cerámicas que llevan incorporadas nanopartículas en sus componentes para darles mayor resistencia o transparencia a la luz infrarroja o ultravioleta.

Y así como éstas, hay una gran cantidad de aplicaciones que requieren un mayor conocimiento de los materiales nanoscópicos.

Antecedentes

Uno de los puntos de partida más importantes de la ciencia y la tecnología a escala nanométrica se originó con el desarrollo de la microelectrónica, primero con el descubrimiento del transistor y luego de sus agregados para constituir microprocesadores, circuitos integrados y controladores de todo tipo. Con ello llegaron los dispositivos de silicio que manipulan información usando el flujo de los electrones a través de ellos.

La microelectrónica utiliza técnicas que rutinariamente fabrican estructuras tan pequeñas como alambres con un ancho de 250 nanómetros. Con ayuda de los procesos *fotolitográficos*, que es la tecnología vigente para crear circuitos integrados y cuyo límite está cerca de los 100 nanómetros, en años recientes, los científicos, han comenzado a crear algunas nanoestructuras para usarlas como componentes electrónicos.

Los procesos fotolitográficos son una extensión de la fotografía; una vez que se tiene el equivalente del negativo de un circuito, que en este caso se conoce como máscara⁶, este se usa para copiar el patrón en metales y semiconductores y reproducirlo múltiples veces.

La fotolitografía reduce el tamaño de los patrones de circuito usando un proceso similar al usado en el cuarto oscuro de fotografía. Un rayo de luz, usualmente ultravioleta proveniente de una lámpara de mercurio, resplandece a través de la mascarará de cromo del circuito y pasa por un juego de lentes que enfocan la imagen sobre la superficie de un elemento de silicio, con una cubierta fotosensible de un polímero orgánico llamado *fotoresistor*. Las partes del fotoresistor son removidas selectivamente al reaccionar con la luz y quedan expuestas las partes que constituyen la réplica del patrón original.

Las estructuras más pequeñas creadas con métodos refinados de fotolitografía han alcanzado los 100 nanómetros, límite impuesto por la difracción de la luz ultravioleta que en distancias más pequeñas crea distorsión en los patrones de circuito, como la observada al tratar de leer letras demasiado pequeñas.

Otras estructuras electrónicas complejas han alcanzado tamaños de hasta 70 nanómetros, pero aún son demasiado grandes para el estudio de los aspectos más interesantes de la nanociencia que consisten en el estudio de las propiedades que emergen con la variación de los tamaños de las estructuras y que situaremos entre 1 y hasta 50 nm, región en la que los arreglos atómicos definen propiedades de grupo.

⁶ Un rayo láser escribe el patrón del circuito en un polímero sensible a la luz que descansa sobre una capa de cromo y sustrato de vidrio. Al contacto con la luz el cromo es removido y el resto del polímero se disuelve.

Cómputo de Sistemas Nanométricos

Desde hace 40 años la investigación, con ayuda de las computadoras, se realiza enfocada al estudio de las propiedades termodinámicas de sistemas de materia condensada con métodos basados en aproximaciones analíticas, que sólo son válidas para el caso en que los constituyentes interactúan débilmente y sean infinitos. Pero un nuevo tipo de esquema de aproximación se empieza a utilizar y está siendo de gran utilidad hoy en día, se conoce como "Procesamiento Numérico Exacto" y consiste en el uso de un mayor número de cifras significativas en los cálculos que las que pueden manejarse experimentalmente. Cuando se utiliza para el estudio de las propiedades de sistemas finitos se obtienen excelentes resultados predictivos. Por otro lado, el aumento en la rapidez de procesamiento de los sistemas de cómputo ha incrementado la posibilidad de hacer buenas predicciones en las simulaciones para sistemas que consisten en grandes cantidades de átomos, como en el caso de las nanoestructuras que van de 10^3 hasta 10^6 . Para ello, después de establecer la configuración del sistema nanoscópico, se pueden investigar los comportamientos electrónicos, ópticos, químicos o mecánicos.

Desde hace 20 años los modelos computacionales han usado potenciales simples para describir gases inertes en sistemas con fase de condensación o en materiales que tienden a formar estructuras de empaquetamiento; y tan sólo en los últimos 10 años se han venido usando métodos numéricos para describir sistemas de fase condensada más complejos, como metales y semiconductores con funciones de *campo de fuerza*.

Actualmente la nanotecnología computacional se ha convertido en una herramienta de análisis indispensable para la ingeniería ya que permite desarrollar el diseño de los sistemas en las cuatro áreas fundamentales:

1. *Escala molecular*: materiales ultraligeros, extremadamente fuertes, funcionales o inteligentes.
2. *Nanoelectrónica*: a escala molecular y con posibilidades al cómputo cuántico.
3. *Sensores y actuadores*: como dispositivos moleculares altamente eficientes.
4. *Motores biomoleculares*: o nanomáquinas de materiales sintéticos.

Como elementos básicos de construcción para los sistemas en los cuatro casos anteriores se tienen las estructuras conocidas como nanotubos, de átomos de carbono o de algún otro material molecular, y que pueden ser fabricados con procesos químicos o de ingeniería.

Estas estructuras, los nanotubos, han adquirido gran interés debido a que sus propiedades, facilitan la construcción de diferentes estructuras y posibilitan amplias aplicaciones.

Cronología

La siguiente es una breve cronología relacionada con el mundo nanoscópico:

- Hace 3.5 miles de millones de años aparecieron las células vivas que pueden considerarse compuestas de nanomáquinas biológicas y que realizan tareas como manipular el material genético y producir energía.
- En el año 400 A. C. Demócrito acuñó la palabra *átomo* que significa "indivisible" en griego antiguo.
- En 1905 Albert Einstein, publicó un artículo, como parte de su trabajo doctoral, con el cual calculó el tamaño de una molécula de azúcar a partir de datos experimentales sobre la difusión de azúcar en agua. Su trabajo muestra que cada molécula mide como un nanómetro de diámetro.
- En 1931 Max Knoll y Ernst Ruska desarrollaron el Microscopio Electrónico que permite obtener imágenes subnanométricas [4].
- En 1959 Richard Feynman dió su famosa plática "*There is a Plenty of Room at the Bottom*" relativa a la prospección de la miniaturización.
- En 1968 Alfred Y. Cho y John Arthur de los Laboratorios Bell y sus colegas inventaron la "*Epitaxial Rayo Molecular*", técnica que permite depositar capas de un sólo átomo de espesor en una superficie.
- En 1974 Norio Taniguchi concibe el mundo de la nanotecnología que es el de las máquinas con dimensiones menores que una micra.
- En 1981 Gerd Binnig y Heinrich crean el Microscopio de Barrido por Tunelamiento (STM Scanning Tunneling Microscope) que puede dar una imagen indirecta de átomos individuales.
- En 1985 Robert F. Curl, Harold W. Kroto y Richard E. Smalley descubrieron unas estructuras nanométricas conformadas por la agrupación de átomos de carbono (*buckminsterfullerenes, buckyballs*).
- En 1986 Eric Drexler publica "*Engines of Creation*" obra futurista que popularizó la nanotecnología.
- En 1989 Donal M. Eigler de la compañía IBM (International Business Machine) escribe las siglas de su compañía manipulando átomos individuales de Xenón.

- En 1991 Sumio Iijima de la compañía NEC (National Electronics Corporation) en la ciudad de Tsukuba Japón descubrió los nanotubos de carbono.
- En 1993 Warren Robinett de la Universidad del Norte de Carolina y R. Stanley Williams de la Universidad de California en los Ángeles conciben un sistema de realidad virtual con base en un Microscopio de Barrido por Tunnelamiento STM que les permite a los usuarios “ver” y “tocar” átomos [4].
- En 1998 el grupo de Cees Dekker en la Universidad de Tecnología en Delft Holanda crea un transistor a partir de un nanotubo de carbono.
- En 1999 James M. Tour, ahora en la Universidad de Rice y Mark A. Reed de la Universidad de Yale muestran que algunas moléculas pueden actuar como interruptores (switches).
- En el año 2000 la administración del Presidente Clinton en los Estados Unidos anunció su Iniciativa Nacional de Tecnología (NNI National Nanotechnology Initiative) que pretende impulsar, mediante una fuerte inversión, los desarrollos en las áreas de investigación científica y tecnológica relacionadas con los objetos nanoscópicos.
- También en el año 2000, Eigler y otros investigadores divisan una nueva perspectiva cuántica. Colocan un átomo magnético en el foco de un anillo elíptico de átomos y crean la *imagen* del mismo átomo en el otro foco lo cual constituye una manera de transmitir información sin cables.

7 La documentación de la NNI se puede consultar en Internet en la dirección www.nano.gov

Fabricación de Nanomateriales

Una de las familias más importantes de nanomateriales es la constituida por átomos de carbono. Estos materiales son ideales en el nivel molecular y para el diseño, fabricación e implementación de aplicaciones.

Desde el punto de vista estructural y de la funcionalidad de los materiales, el carbono es el único elemento que existe en una variedad de formas que tienen diferentes propiedades físicas y químicas.

La variedad de propiedades que pueden presentar los materiales y estructuras moleculares de carbono es amplísima. Así se tiene desde el grafito, que puede ser usado en los lápices para embarrarlo en el papel y con él escribir; hasta el diamante que constituye una forma cristalina perfecta; pasando también por los anillos aromáticos (de benceno) indispensables en la química orgánica y de la vida.

Todas las formas básicas para construir cualquier arquitectura molecular compleja pueden ser llevadas a cabo a partir del carbono; es por ello que el estudio de las estructuras nanoscópicas basadas en este elemento resulta de mayor importancia. Sin embargo, esto no excluye la investigación de nanomateriales basados en otros elementos o compuestos químicos.

Actualmente, para la fabricación de los nanomateriales se pueden utilizar toda clase de herramientas; y para su diseño y estudio, con el punto de vista de la física se pueden hacer extensiones de los métodos clásicos para obtener buenas predicciones sobre su posible comportamiento.

Los investigadores pueden, de una manera relativamente sencilla y no muy costosa, ir ensamblando átomos y moléculas en pequeñas nanoestructuras⁸ (nanotubos y puntos cuánticos) con dimensiones entre 2 y 10 nanómetros [5].

Además de hacerlo con carbono se pueden fabricar nanoestructuras con otros elementos. Por ejemplo, se pueden controlar cuidadosamente las reacciones químicas de algunos metales iónicos (como el cadmio) con moléculas capaces de ceder un ión (como el selenio) para crear cristales (de cadmio selenio) nanoscópicos; el *truco* radica en no permitir que los cristales se junten entre sí durante su crecimiento, quedando en suspensiones o depositados sobre diferentes superficies.

⁸ Procesos de crecimiento catalítico.

En cuanto a la parte ingenieril, se utilizan tanto los métodos de "arriba hacia abajo" con moléculas grandes o agregados moleculares; como los de "abajo hacia arriba" que construyen nanoestructuras a partir de átomos y moléculas. También se pueden usar las puntas de los Microscopios de Fuerza Atómica, para arrastrar átomos en superficies y ubicarlos en posiciones específicas o bien sobre alguna molécula en particular colocada entre dos puntas⁹. Así se pueden fabricar diodos y transistores a partir de moléculas orgánicas.

Hacer un arreglo de átomos uno a uno requiere sujetarse a los principios fundamentales que rigen sus enlaces, casi siempre se pueden colocar de alguna manera aunque pueden resultar químicamente inestables. De acuerdo a la práctica del microscopio se pueden mover átomos de un lugar a otro pero esta habilidad no confiere inmediatamente la capacidad de construir estructuras moleculares complejas.

En lo que se refiere a la electrónica los métodos de miniaturización de los circuitos constan de una gran variedad de pasos que incluyen efectos eléctricos, ópticos y químicos. Una variante interesante de los métodos de fotolitografía consiste en la *Litografía de Electrones* [5] en la que el patrón de un circuito se escribe en una película delgada de polímero usando un rayo de electrones que no se difracta en la escala atómica.

Esta técnica permite escribir líneas de tan sólo unos cuantos nanómetros de grosor en la capa del fotoresistor o del sustrato de silicio, y aunque ya está disponible resulta muy costosa y además es poco práctica para la manufactura a gran escala. Este proceso resulta similar a copiar un texto a mano, línea por línea.

También se usa la *Litografía de Rayos X* [5] con longitudes de onda entre 0.1 y 10 nanómetros, o luz ultravioleta extremadamente energética con longitudes entre 10 y 70 nanómetros. Debido a que estas formas de radiación tienen longitud de onda mucho menor minimizan los efectos borrosos causados por la difracción.

Sin embargo, estas tecnologías tienen sus propios problemas. Por ejemplo, los lentes convencionales no son transparentes a la luz ultravioleta extrema y no enfocan los rayos X; y además resulta que, la radiación es tan energética que rápidamente daña muchos de los materiales usados en las máscaras y los lentes.

Otro método llamado de *Micromoldes Capilares* [5], permite replicar estructuras menores que 10 nanómetros, y es ideal para crear dispositivos ópticos de sublongitud de onda, guías de onda y polarizadores ópticos. Permite producir nanoestructuras en un amplio rango de materiales incluyendo complejas moléculas orgánicas.

⁹ Las Puntas se desarrollan con una técnica basada en el control del estiramiento de un alambre finísimo (midiendo una corriente a través de él) y hasta el punto de ruptura en que solo un átomo mantiene juntos ambos lados.

La técnica puede imprimir o moldear patrones en superficies curvas o planas, aunque no es ideal para crear las estructuras requeridas para la nanoelectrónica. Todos los circuitos integrados consisten en componentes a base de capas de diferentes materiales en los que los patrones deben constar con una exactitud que esta técnica no puede reproducir.

Por otro lado, en los últimos años han cobrado un interés significativo el uso de nanopartículas de plata y oro como componentes de sensores químicos y biológicos. Estas partículas miden de 1 a 100 nanómetros y pueden ser preparadas desde un coloide (partículas en suspensión) para esparcirlas en una superficie o en una máscara litográfica por depositación al evaporarse el solvente.

Los artesanos han usado el método de partículas coloidales desde el medioevo para la creación de vitrales (las partículas nanométricas de plata hacen al vidrio amarillo y las de oro de color rojo). Lo que sí es nuevo es el control que se tiene del grado de agregación, forma y tamaño¹⁰ de las partículas, lo cual permite definir sus propiedades ópticas; y el manejo de lo que hay en sus superficies, de modo que puedan interactuar selectivamente.

Sin embargo, no es sino hasta el descubrimiento de los nanotubos que se abrió realmente la investigación respecto a las estructuras nanométricas.

Fabricación de Nanotubos

Los nanotubos fueron descubiertos accidentalmente en 1991 por Sumio Iijima quien los observó por primera vez en los extremos de los electrodos de grafito usados en los arcos de descarga y consisten en estructuras de mallas hexagonales de carbono enrolladas cilíndricamente.

Para su fabricación se han introducido especies catalíticas (Fe, Co) en un plasma de carbono. Durante el arco aparecen estas estructuras en forma de red alrededor del cátodo acompañadas de algunas otras nanopartículas. Pero de este modo no se consiguen con demasiada eficiencia pues sólo se encuentran de 5 a 100 nanotubos individuales.

¹⁰ Se puede seleccionar el tamaño de las nanopartículas controlando el tiempo de reacción de los compuestos que dan lugar a su formación.

Otra manera efectiva de producir nanotubos es usando la técnica, que apareció hace sólo tres años, de evaporación láser que permite la fabricación de nanotubos de carbono con menos del 10 % de impurezas. Los nanotubos así obtenidos presentan diámetros entre 1 y 2 nm típicamente y longitudes de hasta 50 μm . La purificación se completa con sistemas de filtración, dispersión de los nanotubos con solventes polares asistidos por surfactantes, ultracentrifugado y microfiltración. Y sus aspectos dimensionales se han podido evidenciar mediante difracción de rayos X.

Recientemente han aparecido otros métodos de fabricación de nanotubos muy eficientes, como es el caso del método por Deposición de Vapor Químico (CVD Chemical Vapor Deposition) que puede controlar mejor sus dimensiones. A través de los poros de membranas inorgánicas de aluminio, se puede controlar el diámetro y dependiendo de la cantidad de vapor de alimentación su largo.

Este método permite ensamblarlos directamente en una amplia variedad de orientaciones predeterminadas sobre sustratos de silicio recubierto por una capa de óxido SiO_2 de unos 100 nm e inclusive en arreglos de una, dos o tres dimensiones.

La preferencia de los nanotubos de crecer sobre y perpendicular a las superficies de silicio los fuerza a seguir algún patrón topológico en el sustrato practicado mediante fotolitografía. Esto permite controlar los puntos de nucleación y las direcciones de crecimiento.

También con estas técnicas se han estado consiguiendo nanotubos de paredes múltiples con diámetros de 20 a 30 nm [16] y distancias entre planos de 0.34 nm. Así los costos de fabricación no son muy elevados, lo que permite una mayor utilización de estas estructuras en diferentes arreglos experimentales.

Es de notarse que la aplicación de los nanotubos como cables cuánticos y pequeños dispositivos electrónicos ha recibido la mayor atención por parte de la comunidad científica.

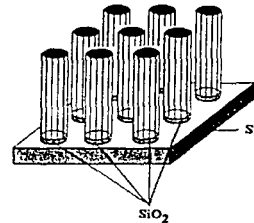


FIGURA 1-3 Ensamble organizado de nanotubos.

Métodos Teóricos de Estudio

Dinámicas Moleculares

Las diferentes técnicas de cálculo computacional usadas, como son las simulaciones, han resultado indispensables para el estudio de las estructuras en nanoescalas a través de lo que se conoce como Dinámicas Moleculares, de las que se tienen dos tipos:

1. **Dinámicas Moleculares Clásicas:** describen sistemas donde conjuntos de muchas partículas, ya sean átomos o moléculas, se mueven mientras interactúan entre sí. La evolución dinámica de un sistema está gobernada por la ecuación clásica del movimiento de Hamilton basada en la segunda ley de Newton:

$$d^2\mathbf{R}_i/dt^2 = \mathbf{F}_i = -dV/d\mathbf{R}_i \quad (1)$$

Donde \mathbf{R}_i representa el vector de posición de cada partícula, t al tiempo y \mathbf{F}_i la fuerza asociada. Tratándose de campos conservativos como el gravitacional o el electromagnético la fuerza puede derivarse directamente del potencial V del campo en cada punto del espacio. Así puede entonces plantearse el Hamiltoniano del sistema como:

$$H = \sum \mathbf{P}_i^2/2M_i + \Sigma V(\{\mathbf{R}_i\}) \quad (2)$$

Donde cada átomo actúa como una partícula simple que se mueve en el campo de fuerza de muchos cuerpos o partículas similares $\mathbf{F}(\{\mathbf{R}_i\})$.

Las interacciones atómicas y moleculares describen la dinámica mediante funciones clásicas de campo de fuerza; y se puede escribir entonces, la función de la energía potencial del sistema como la suma de todos los potenciales $V(\{\mathbf{R}_i\})$ asociados a cada una de las partículas en términos de los pares de interacciones que dependen de las distancias relativas entre los diferentes átomos.

2. **Dinámicas Moleculares Cuánticas:** se usan para el estudio de sistemas con átomos muy ligeros, a muy bajas temperaturas y con potenciales cuánticos.

En estas se determina el Hamiltoniano H del sistema, se proponen las funciones de probabilidad $\{\psi_i\}$ y se calcula la energía $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$.

Usualmente las dinámicas moleculares se aplican a conjuntos de átomos con funciones de energía potencial bien definidas; y con ecuaciones de movimiento que resultan numéricamente integrables en un número finito de pasos [2].

Y aunque la mecánica y la electrodinámica continuas trabajan bien para elementos materiales del orden de las micras, el principio de correspondencia requiere que en muchos casos los cálculos computacionales también usen métodos cuánticos para reproducir las predicciones correctas del análisis continuo.

Sin embargo, en años recientes muchos esquemas de dinámicas moleculares cuánticas, usando la aproximación de Bohr-Oppenheimer [2], han calculado las fuerzas entre los átomos y han reforzado la idea de que las posiciones iónicas siguen estando gobernadas por la mecánica Newtoniana o Hamiltoniana¹¹.

Como el costo computacional, en términos de la cantidad de memoria requerida y velocidad de procesamiento necesaria para poder realizar el cálculo de las interacciones de muchos cuerpos es relativamente alto en comparación con los métodos que calculan únicamente interacciones reactivas y sin cambios; y que tienen formas funcionales mucho más simples, se suelen usar los métodos de interacción de corto y largo alcance, que son comparables en costo, al de aquellos que miden las interacciones de Vander Waals; es decir, que toman en consideración sólo las interacciones más significativas entre las partículas y que por lo mismo requieren de una menor cantidad de recursos computacionales.

En general, para el estudio de cualquier objeto nanoscópico primeramente conviene investigar su estructura atómica y, una vez, que es conocida la configuración de los átomos, se pueden estudiar las propiedades electrónicas.

Los estudios sobre el transporte de cargas resultan de gran importancia para el diseño de nanodispositivos, donde las características de operación usualmente quedan determinadas por la transferencia de señales electrónicas, térmicas, acústicas o químicas a través del sistema.

Estos métodos computacionales además permiten encontrar los mínimos termodinámicos de energía y también pueden extenderse hasta predecir el comportamiento químico o la transferencia de cargas cuando se ponen en contacto dos estructuras nanoscópicas, lo cual es de gran interés por el gran ahorro de trabajo experimental que pueden llegar a representar.

¹¹ Dinámicas Moleculares de Car-Parrinello.

Método de Enlace Fuerte

El método de Enlace Fuerte (*Tight-Binding*) considera a los átomos como grupos de partículas mecánico cuánticas, núcleo y electrones gobernados por la ecuación de Schrödinger:

$$H\Phi[\{\mathbf{R}_i, \mathbf{r}_i\}] = E_{\text{tot}}\Phi[\{\mathbf{R}_i, \mathbf{r}_i\}]. \quad (3)$$

Con el operador Hamiltoniano cuántico completo que incluye las interacciones entre cada uno de los pares de partículas en el sistema:

$$H = \sum \mathbf{P}_I^2/2M_I + \sum Z_I Z_J e^2 / R_{IJ} + \sum \mathbf{p}_i^2/2m_e + \sum e^2 / r_{ij} - \sum Z_I e^2 / |\mathbf{R}_I - \mathbf{r}_i| \quad (4)$$

donde \mathbf{R}_I y \mathbf{r}_i son las coordenadas del núcleo y de los electrones respectivamente. Las Z_I , Z_J representan el número atómico de cada par de partículas y las \mathbf{P}_I , \mathbf{p}_i sus momentos respectivamente.

Usando la aproximación de Born-Oppenheimer se supone que los grados de libertad electrónicos siguen adiabáticamente las posiciones nucleares y las coordenadas del núcleo se convierten en variables clásicas [2]. Esta aproximación usada primero por Walter Kohn y Lu Sham, reduce el problema total cuántico de muchos cuerpos al problema cuántico de muchos electrones únicamente.

$$H[\mathbf{R}_I]\psi[\mathbf{r}_i] = E_{e1}\psi[\mathbf{r}_i] \quad (5)$$

donde:

$$H = \sum \mathbf{P}_I^2/2M_I + H[\mathbf{R}_I] \quad (6)$$

Con el método de Enlace Fuerte se considera, por ejemplo, que en los cristales los potenciales son lo suficientemente grandes como para que un ion capture a un electrón durante algún tiempo largo, al moverse este por la red del cristal. El electrón permanece bastante tiempo antes de ligarse a otro ion o bien experimentar un efecto de Tunneling¹².

Durante el intervalo de captura, el electrón orbita primeramente alrededor de un sólo ion; esta función de estado es esencialmente del tipo de orbital atómico. Usualmente el electrón se encuentra fuertemente enlazado a su átomo

En resumen, este método consiste en llevar a cabo combinaciones lineales de los orbitales atómicos de los electrones de los átomos del cristal; y se puede restringir para tomar en cuenta sólo las interacciones a primeros vecinos, segundos e incluso hasta terceros.

12 Rebasar cuánticamente una barrera de potencial, aumentando el valor de su función de probabilidad.

Método de Simulación Ab Initio

El método Ab Initio –de primeros principios– es otro método de simulación para resolver ecuaciones de Schrödinger de muchos cuerpos con algoritmos numéricos y posee una fundamentación matemática rigurosa.

La expansión usando orbitales atómicos, en el método de Enlace Fuerte, es aproximadamente 1000 veces más eficiente que el método Ab Initio. Sin embargo, este método es útil debido a que permite obtener información más precisa del comportamiento de las propiedades mecánicas de los materiales.

Desde este punto de vista de las dinámicas moleculares, los métodos de Enlace Fuerte y Ab Initio forman un conjunto complementario de herramientas de simulación para estudiar procesos diversos en la escala atómica y para el modelaje de nanodispositivos.

Con el método Ab Initio la energía del estado base E_{el} , de muchos sistemas de electrones es una función de la densidad de electrones $\rho(\mathbf{r})$, en vez de la función de onda electrónica total.

$$E_{el}(\Psi[\mathbf{r}_i]) = E_{el}(\rho(\mathbf{r}_i)) \quad (7)$$

El operador Hamiltoniano y la ecuación de Schrödinger entonces están dados por:

$$H = \sum p_i^2/2m_e + \sum e^2/r_{ij} - \sum Z_I e^2/|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}_i| + \sum Z_I Z_J e^2/R_{IJ} \quad (8)$$

y por:

$$H[\mathbf{R}_I]\Psi[\mathbf{r}_i] = E_{el}\Psi[\mathbf{r}_i]. \quad (9)$$

donde \mathbf{R}_I y \mathbf{r}_i son las coordenadas atómicas y de los electrones respectivamente.

Walyter Kohn y Lu Sham han reformulado la Teoría de Función de Densidad, (DFT Density Functional Theory) tomando el problema de un sólo electrón con un potencial efectivo que incluye todas las interacciones electrónicas:

$$H_1 = p_i^2/2m_e + V_{ii}(r) + V_{XC}[\rho(r)] + V_{ion-el}(r), \quad (10)$$

$$H_1 \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r), \quad i = 1, \dots, N_{tot} \quad (11)$$

$$\rho(r) = \sum |\psi_i(r)|^2. \quad (12)$$

Esta ecuación de Schrödinger para un electrón se conoce como ecuación de Kohn-Sham o Aproximación de Densidad Local (LDA Local Density Aproximation) y se usa para calcular un potencial desconocido.

Estos métodos combinados permiten predecir las propiedades de los materiales sin utilizar información experimental que no sea la de los constituyentes atómicos, y pueden ser implementados con una aproximación de pseudopotencial y una expansión de funciones de onda plana para las funciones de un electrón.

Las aproximaciones sistemáticas reducen el problema de la estructura electrónica al problema de diagonalizar una matriz autoconsistente. Aunque, en las últimas tres décadas los métodos de simulación rápidamente han pasado de la diagonalización iterativa usado en las Dinámicas Moleculares de Car-Parrinello, al método de minimización de gradiente conjugado, que en muchos casos permite mejorar la precisión por un factor adicional de dos o tres cifras significativas.

Uso de la Teoría Clásica

Para la teoría electromagnética clásica las nanopartículas son suficientemente grandes (de tamaños comparables con las longitudes de onda de la luz visible) como para permitir su correcta aplicación, de modo que se puede extraer mucha información de los modelos teóricos de las nanoestructuras basados en esta teoría. Aun que los cálculos asociados pueden requerir amplios recursos computacionales.

Sin embargo, algunos códigos son tan eficientes, que permiten su procesamiento en computadoras personales, facilitando, el estudio de las nanopartículas.

Para resolver las ecuaciones de Maxwell se utilizan métodos numéricos. Los investigadores han desarrollado una gran cantidad de estos métodos en los últimos años motivados por problemas tales como la *dispersión en biomoléculas* o el estudio del *medio interestelar*.

Los sistemas de cálculo numérico usados para describir nanoestructuras pueden incluir la aplicación de los siguientes métodos:

- **Aproximación de Dipolo Discreto (DDA):** divide las partículas en numerosos cubos que pueden contener un dipolo puntual polarizado. Las polarizaciones de dipolo inducidas en estos cubos se determinan de manera autoconsistente. Se pueden evaluar estos campos usando métodos de Fourier que presentan una dependencia con el tiempo de cálculo computacional de $N \log(N)$ sobre el número total de cubos.
- **Método de Múltiples Multipolos (MMP):** dividen las partículas en dominios o grupos con patrones que permiten dar soluciones de expansión en series de potencias a las ecuaciones de Maxwell. Se pueden determinar los coeficientes en estas expansiones haciendo coincidir las condiciones de frontera de las ecuaciones con la interface de los dominios de partículas.

- **Métodos de Diferencias Finitas de Dominio de Tiempo (FDTD):** resuelven las ecuaciones de Maxwell en función del tiempo, en vez de a una frecuencia dada como lo hacen otros métodos, y usando una malla cartesiana tridimensional para expresar las derivadas espaciales.
- **Métodos de Matriz T (T-Matrix):** expresan los campos dentro y fuera de los objetos, y si la simetría lo permite, con expansiones en vectores armónicos esféricos. Las condiciones de frontera (superficies de los objetos) permiten determinar los coeficientes en esta expansión.

Aproximación de Dipolo Discreto

Las ecuaciones de Maxwell que describen los campos electromagnéticos en presencia de materia son las siguientes:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_f \quad \text{Ley de Gauss Eléctrica} \quad (13)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad \text{Ley de Gauss Magnética} \quad (14)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t \quad \text{Ley Faraday} \quad (15)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_f + \partial \mathbf{D} / \partial t \quad \text{Ley de Ampere con la corrección de Maxwell.} \quad (16)$$

Donde \mathbf{E} y \mathbf{H} son los campos eléctrico y magnético, \mathbf{D} es el desplazamiento eléctrico, \mathbf{B} es la inducción eléctrica y \mathbf{J}_f es la densidad de corriente asociada a la carga libre.

Se puede calcular una solución numérica aproximada a las ecuaciones de Maxwell para un cuerpo de cualquier forma con un campo eléctrico incidente \mathbf{E}_{inc} , usando la representación de la configuración discreta. Así, para aproximar la respuesta de una red cúbica interactuando con dipolos eléctricos en un campo eléctrico representado por una onda plana donde cada dipolo tiene la polarización \mathbf{P}_i se tiene que:

$$\mathbf{P}_i = \alpha_i \cdot \mathbf{E}_{loc,i} \quad (17)$$

donde α_i es la polarizabilidad de los dipolos. El campo eléctrico local en cada dipolo es entonces:

$$\mathbf{E}_{loc,i} = \mathbf{E}_{inc,i} + \mathbf{E}_{dip,i} \quad (18)$$

$$\mathbf{E}_{loc,i} = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) - \sum_{j \neq i} \mathbf{A}_{ij} \cdot \mathbf{P}_j \quad (19)$$

ya la matriz de interacción dipolar es:

$$\mathbf{A}_{ij} \cdot \mathbf{P}_j = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}) / r_{ij}^3 \cdot \left\{ \mathbf{k}^2 \mathbf{r}_{ij} \times (\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{P}_j) + \frac{(1 - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \left[r_{ij}^2 \mathbf{P}_j - 3\mathbf{r}_{ij} (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{P}_j) \right] \right\} \quad (20)$$

donde $\mathbf{k} = \omega/c$, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, y $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$.

Una vez encontrada la polarización \mathbf{P}_j de las secciones transversales, la extinción y la absorción C_{ext} y C_{abs} son:

$$C_{\text{ext}} = \frac{4\pi k}{|\mathbf{E}_0|^2} \sum_{i=1}^N \text{Im}(\mathbf{E}_{\text{inc}} \cdot \mathbf{P}_i) \quad (21)$$

$$C_{\text{abs}} = \frac{4\pi k}{|\mathbf{E}_0|^2} \sum_{i=1}^N \{ \text{Im}[\mathbf{P}_i \cdot (\alpha_i^{-1}) \cdot \mathbf{P}_i] - 3k^3 |\mathbf{P}_i|^2 \} \quad (22)$$

Este método de Aproximación de Dipolo Discreto es válido para un material con índice de refracción complejo m , cuando $|m| k d \ll 1$.

Los requerimientos computacionales de este método son proporcionales a $N \log(N)$, donde N es el número total de los dipolos.

Absorción y Dispersión por Agregados de Nanopartículas

Una descripción rigurosa de la respuesta óptica de sistemas de agregados nanoscópicos requiere una investigación del efecto de cada partícula sobre las demás, interpretando su espaciamiento respecto del resto de las partículas en el sistema. Afortunadamente, las restricciones experimentales limitan muchos de los parámetros en juego lo que se traduce en un decrecimiento del esfuerzo computacional en muchas circunstancias.

Un tratamiento electrodinámico completo de las partículas en interacción que constituyen un agregado nanoscópico puede requerir que cada partícula sea descrita por una expansión de armónicos esféricos o en series de potencias dependiendo de la simetría. Cuando muchas partículas están presentes, como en el caso de objetos agregados nanoscópicos, se encuentra experimentalmente que el sistema de multipolos describe con todo rigor la aproximación del espectro de extinción y absorción.

Sin embargo, el esfuerzo computacional asociado con esta aproximación puede ser sustancial, pues va en proporción a la máxima potencia del orden multipolar incluido en los cálculos. Usando parejas de multipolos, suele ser necesario sólo el primer término –dipolar– de la expansión para lograr una buena descripción de la respuesta óptica.

Entonces, se puede simplificar el problema a parejas de dipolos. Si además se considera que las partículas se encuentran en una malla cúbica, se puede evaluar aún más eficientemente las sumas de los dipolos.

CAPÍTULO 2



SIMULACIÓN DE NANOTUBOS

Nanotubos de Carbono

Las estructuras moleculares de tipo Fullerenes¹³ fueron descubiertas por Harold Kroto y Richard E. Smalley por lo que ganaron el premio nobel de Química de 1996; y son "enrejados" moleculares que contienen redes atómicas con patrones hexagonales o pentagonales¹⁴ únicamente. Se usan tanto para fabricar nanotubos, como otros elementos (nanoconos, nanoresortes o nanotoroides) y básicamente consisten enteramente de átomos de carbono.

Hoy en día se construyen dos tipos de nanotubos:

1. De pared simple (SWNTs Sigle Walled Nano Tubes) que básicamente consisten de una hoja con un patrón hexagonal de carbono enrollada a modo de cilindro.

Conviene notar que la malla o pared hexagonal puede ser enrollada cilíndricamente en dos orientaciones distintas, de modo que, en los extremos del tubo queden expuestos los vértices  de la malla, enrollando de izquierda a derecha como se muestra en la figura; o bien, se tengan las aristas de los hexágonos  enrollando de arriba hacia abajo.

En el primer caso se habla de nanotubos con extremos en *zig-zag* y en el segundo de *descansabrazo* (armchair).

2. De múltiples paredes (MW NTs), que son más comunes. Dos o más mallas enrolladas de modo concéntrico con una separación típica de 0,34 nm generan estos objetos compuestos.

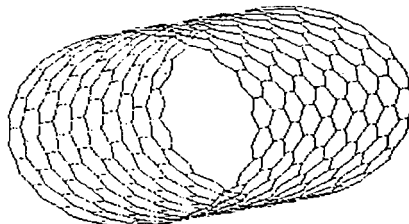
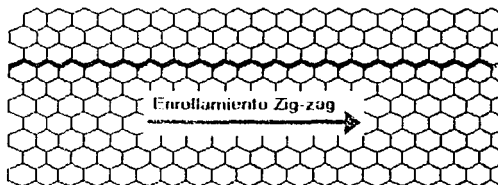


FIGURA 2-1 Malla o pared hexagonal sin enrollar y enrollada cilíndricamente con simetría de extremos en zig-zag.

¹³ Toman el nombre de su creador el arquitecto R. B. Fuller que presentó en la Exhibición Mundial en Montreal en 1967 un edificio esférico usando hexágonos y algunos pentágonos.

¹⁴ Siguiendo las leyes de Euler que gobiernan el número de pentágonos en cualquier cavidad cerrada.

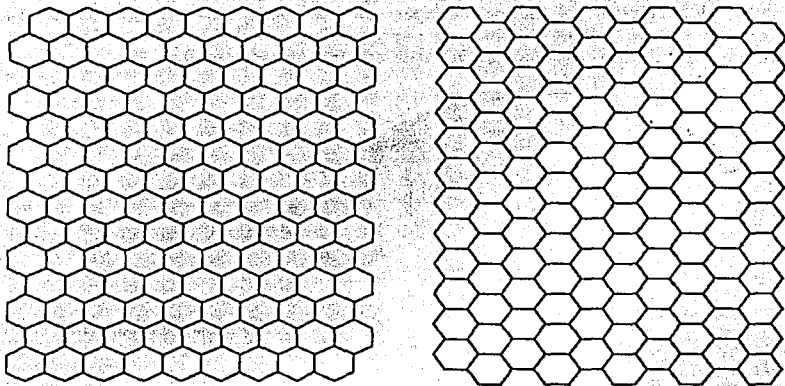


FIGURA 2-2 Paredes hexagonales en disposiciones útiles, enrollando a lo ancho, para la obtención de un nanotubo con simetría de extremos en zig-zag y de descansabrazo¹⁵.

Es claro que al enrollar estas mallas hexagonales en sentido horizontal (dando al eje de los "nanotubos" la dirección vertical) se obtienen nanotubos con simetría en los extremos de zig-zag y de descansabrazo respectivamente.

Nanotubos Quirales

Los tubos quirales, pueden considerarse variantes del enrollamiento de los que tienen la simetría de zig-zag.

Para identificar cada tubo simple se utiliza la nomenclatura (n, m) que relaciona las unidades de los vectores de la malla con el número de hexágonos en cada anillo y el índice o factor de torsión; y se conoce como vector de quiralidad. Los nanotubos (n, n) usualmente se conocen como de descansabrazo por tener todos los hexágonos la misma simetría perpendicular respecto del eje. En cambio se conocen como zig-zag aquellos que tienen vector $(n, 0)$. Todos los otros son nanotubos quirales¹⁶.

¹⁵ Una manera de entender mejor las cuestiones de enrollamiento consiste en fotocopiar en acetato las hojas hexagonales de esta página y llevar a cabo, en la práctica el enrollamiento de uno de estos "nanotubos".

¹⁶ La palabra quiralidad se refiere a objetos que son diferentes a sus imágenes en el espejo.

Se puede detallar el estudio de la simetría en los nanotubos y la manera de enrollar las mallas hexagonales de modo que aparezcan diferentes quirralidades según se muestra en la siguiente figura, en la que se aprecia con facilidad la manera de generar plegamientos cilíndricos distintos de la malla con patrón hexagonal.

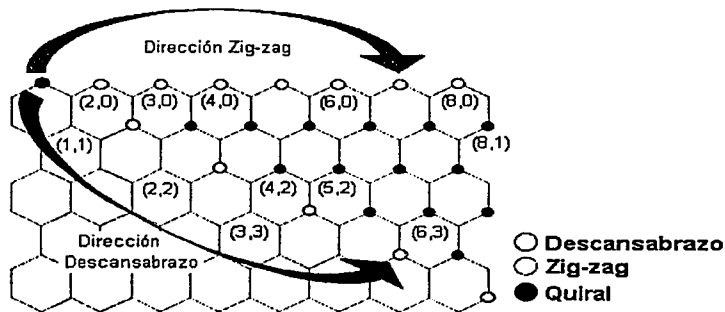


FIGURA 2-3 Puntos de coincidencia en el enrollamiento de una pared o malla hexagonal para la obtención de nanotubos con diferentes relaciones de simetría¹⁷.

Al llevar el punto señalado en el extremo superior izquierdo a una de las posiciones marcadas el nanotubo que se obtendrá será del tipo de extremos de descansabrazo, zig-zag o quiral según corresponda.



FIGURA 2-4 Nanotubos generados con diferentes enrollamientos de una pared hexagonal.

¹⁷ Este diagrama fue obtenido en la sección de Educación de la página de internet www.nano.gov y su uso es de dominio público.

Algunas de las propiedades de los nanotubos pueden depender de la quiralidad. Por ejemplo, un tubo simple puede ser metálico o semiconductor dependiendo de su vector de quiralidad (n, m) .

La regla es que cuando la diferencia $n - m$ es un múltiplo de 3, se obtiene un nanotubo metálico. Si la diferencia es otra se obtiene un superconductor [2].

La quiralidad también es útil al juntar nanotubos diferentes para crear conexiones heterogéneas: éstas forman una variedad de componentes que sirven como dispositivos electrónicos moleculares.

Características de los Nanotubos

Desde su descubrimiento en 1991, los SWNT y los MWNT han mostrado tener una estructura excepcional con una gran resistencia mecánica a lo largo del eje del tubo y de flexibilidad en la dirección perpendicular, debido a que la estructura bidimensional constituida por los enlaces de los átomos mantiene la malla extraordinariamente fuerte en caso de la aplicación de distorsiones o fracturas.

Los investigadores han tratado de explotar la "fuerza" de los nanotubos para reforzar la composición de fibras de polímeros o para ser usados como pequeños contenedores de átomos simples o como cables conductores [25].

Los nanotubos de carbono pueden tener diferentes propiedades eléctricas dependiendo de su vector de quiralidad, yendo desde de metales hasta semiconductores.

Recientemente algunos experimentos han demostrado que los nanotubos simples son extremadamente sensibles a las moléculas de algunos gases como son lo de Potasio (K), Bromo (Br) y Yodo (I_2).

Adicionalmente se ha visto en los experimentos que la conductividad de un nanotubo semiconductor cambia a medida que el nanotubo es expuesto a una minúscula cantidad de ciertas moléculas de gas. Las moléculas son absorbidas por la superficie del nanotubo hasta que se puede considerar un semiconductor dopado con portadores de carga del tipo p .

Por el fuerte acoplamiento de las propiedades electrónicas, ópticas y mecánicas de los nanotubos ofrecen una gran oportunidad de desarrollar dispositivos novedosos.

Reconocimiento de los Nanotubos

Para conocer las características estructurales en los nanotubos de carbono se utilizan diferentes métodos, algunos son meramente computacionales, pero requieren ser corroborados experimentalmente.

Uno de los métodos más importantes hoy en día es la espectroscopía Raman, que ha resultado una herramienta poderosa para caracterizar los materiales de carbono [25]; y ha sido utilizada satisfactoriamente para conocer el diámetro y la helicidad o quiralidad de los nanotubos.

Los picos observados en la espectroscopía Raman tienen una fuerte dependencia con el diámetro de los nanotubos y por tanto con sus modos normales de vibración [24]. Variaciones pequeñas de los modos de vibración son asociadas con isómeros estructurales; es decir, con variantes quirales.

Modelo Computacional de un Nanotubo

El nanotubo con disposición recta longitudinal y extremos en zig-zag¹⁸, que se muestra en la figura 2-5, ha sido generado en un programa de Simulación creado en lenguaje de programación Microsoft QBASIC, como uno de los objetivos de esta tesis. Los algoritmos del código fuente, que puede ser consultado en el Apéndice 1, son trasladables a cualquier otro lenguaje con la finalidad de llevar a cabo la simulación aprovechando un mayor poder de procesamiento de algún otro equipo, aunque no es necesario ya que el programa simulador permite contar más de 10 mil puntos en el espacio (correspondientes a los vértices en la malla) y por la simetría del problema, extenderse, mediante una simple traslación, a tantos puntos como se desee; de modo que se podrían localizar ¡cientos de miles de elementos!

El programa hace las veces de un graficador 3D y obtiene los vectores de posición de cada uno de los vértices de una malla de hexágonos enrollada cilíndricamente y que simula un nanotubo de carbono, los arreglos forman grupos hexagonales similares a las moléculas de benceno de 6 átomos, pero como los hexágonos comparten lados o aristas, en realidad se tiene que las unidades básicas corresponden a los simples átomos de carbono con dos enlaces dirigidos mediante vectores de posición a 120 grados entre sí.

El programa puede controlar los siguientes parámetros: tamaño de los hexágonos, radio del cilindro generado, número de hexágonos por anillo y número de anillos; y todos en un amplio rango.

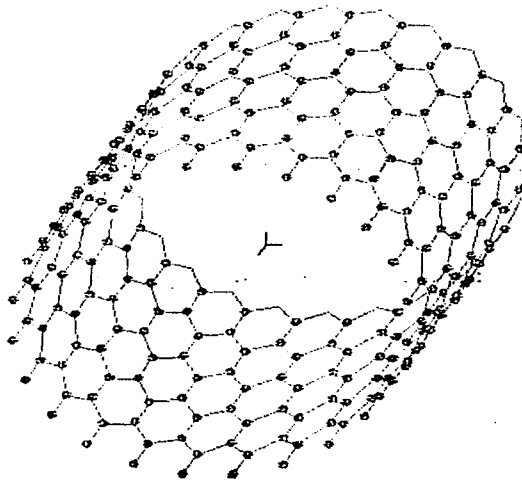


FIGURA 2-5 Estructura molecular de un nanotubo simulada en un programa graficador 3D.

¹⁸ Los nanotubos con extremos en Zig-zag son más estables y permiten la realización de experimentos con facilidad.

Algunas rutinas del programa que grafica este nanotubo de carbono incluyen consideraciones de geometría analítica vectorial en tres dimensiones. Con el desarrollo de un algoritmo de geometría espacial se generan los vectores posición de cada uno de los vértices de la malla hexagonal enrollada cilíndricamente y con esta información se crea un archivo de datos para registrar los valores de sus coordenadas, es decir, de los puntos que ocupan los átomos de carbono en el nanotubo.

Algunas variantes del programa que genera la simulación del nanotubo con disposición longitudinal recta y extremos en zig-zag permiten generar nanotubos quirales con diferentes índices de torsión o factores de quiralidad, para su estudio subsecuente.

Otro programa complementario realizado en Microsoft Visual C++ versión 6.0 lee la información de los archivos de los datos (con las coordenadas de los vértices de cada uno de los nanotubos) y evalúa la polarización de cada uno de los átomos componentes del nanotubo. Los resultados obtenidos se registran de nuevo en otro archivo de datos para ser graficados con la ayuda de la hoja de lectura electrónica Microsoft Excel 2000, y dar paso al análisis por comparación de las propiedades de polarización de estos objetos.

Algunos Ejemplos

El programa para la simulación de nanotubos puede ser usado para realizar la representación de nanotubos de carbono de diferentes dimensiones; desde los pequeños que pueden constar de unos cuantos átomos dispuestos en algunos anillos,



FIGURA 2-6 Simulación del nanotubo recto (12, 0) de 4 anillos.

Nota: en la pantalla se muestra el número de Hexágonos por anillo y el tamaño del Lado del hexágono, lo que determina el diámetro de la estructura; el Número de anillos determina la longitud y un conteo rápido da el Número de vértices o átomos.

u otros más grandes con digamos más de 1000 elementos.

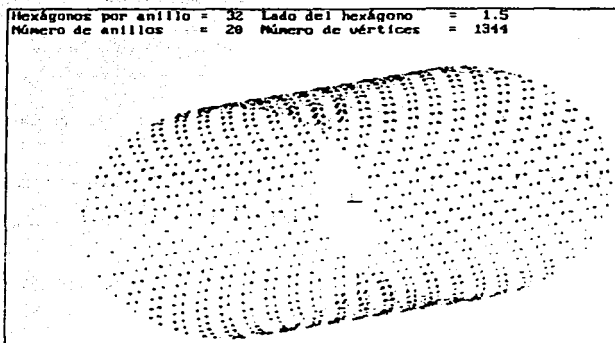


FIGURA 2-7 Simulación del nanotubo recto (32, 0) de 20 anillos.

y hasta algunos de gran tamaño y con más de una docena de miles de átomos.

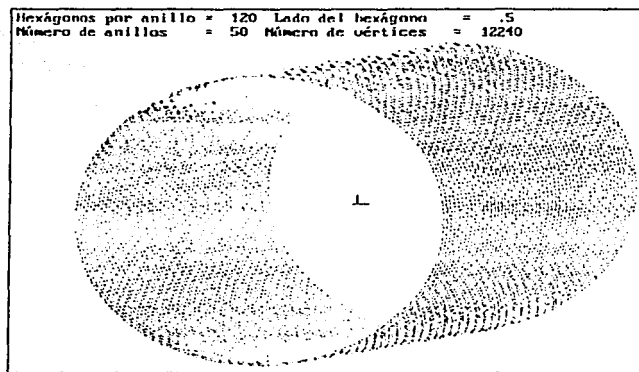


FIGURA 2-8 Simulación del nanotubo recto (120, 0) de 50 anillos.

El programa soporta tubos aún más grandes y aprovechando su gran simetría con ayuda de una traslación se pueden generar los vectores posición de los elementos constituyentes de nanotubos de longitud y radio casi ilimitados, que por supuesto ya corresponden a estructuras pertenecientes a escalas mayores que las nanométricas.

Descripción del algoritmo para Simular Nanotubos en Disposición Recta Longitudinal y con Extremos en Zig-zag

El código fuente del programa para la simulación de nanotubos de carbono se muestra en el Apéndice 1.

Es importante hacer notar que este programa tiene tres funciones básicas que son:

1. Generación y representación tridimensional de un nanotubo en el plano de la pantalla.
2. Cálculo de los vectores posición de los vértices de la malla hexagonal enrollada cilíndricamente.
3. Generación de un archivo de datos con los valores de todas las coordenadas de todos los elementos que constituyen el nanotubo.

Y algunas otras adicionales relacionadas con el desempeño de las operaciones de cálculo y acoplamiento de la parte gráfica con la numérica.

En total el programa consta de 16 subrutinas reconocibles por los grupos de párrafos que tienen títulos en mayúsculas terminados en " : " (dos puntos) y cuya última línea contiene la orden RETURN. La manera de entender los procedimientos de este programa es simple y es de la siguiente manera:

El programa se lee de arriba hacia abajo y en él se van encontrando los llamados a subrutinas, que se encuentran en la parte inferior del programa.

Un conjunto de comentarios, distinguibles por las letras cursivas, documentan el programa.

Las funciones del programa y las subrutinas son las siguientes:

El programa inicia con el llamado a la subrutina INICIO: con la cual se limpia la pantalla y se asigna la resolución del área de gráficos (que ocupará toda la pantalla).

El siguiente paso es el llamado de la subrutina CONSTANTES: que da valores numéricos al factor de escala (que se usará para la visualización tridimensional), al tamaño unitario, a la constante matemática π y al centro de la pantalla también. Adicionalmente da nombres a los números asociados con los colores de trazado gráfico de los píxeles (picture element) o puntos de la pantalla.

A continuación se invoca la subrutina **CONSTANTESDELPROG**: que inicializa algunos contadores importantes, como son el número total de elementos en la malla del nanotubo y otros relacionados con el funcionamiento del programa.

La subrutina **PRESENT**: simplemente despliega durante unos segundos una pantalla de presentación con el título del programa e invoca a su vez a la subrutina **SONIDO**: que emite un tono de aviso de que el programa comenzará.

A continuación se ejecuta la subrutina **MARCO**: que traza un margen rectangular en la pantalla para delimitar el área de trabajo.

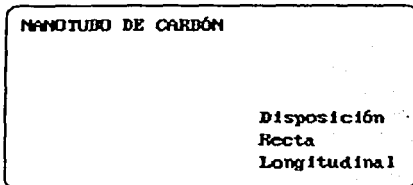


FIGURA 2-9 Pantalla de presentación.

Hasta este punto sólo se ha preparado el sistema para la ejecución del programa de graficación que, en realidad, se establece con el llamado de la subrutina **S0**: que define los vectores unitarios i, j, k , en el centro de la pantalla. Una técnica simple permite dar componentes (proyecciones) horizontales y verticales a cada uno de estos tres vectores de modo que resulta fácil la representación tridimensional en dos dimensiones; es decir en la pantalla, de cualquier punto en el espacio R^3 con coordenadas en un sistema de referencia $S1$.

Entonces el programa comienza dando valores a los parámetros del nanotubo que se va a simular, el número de lados o hexágonos que habrá en cada anillo del nanotubo, el número de anillos para el nanotubo y el tamaño de los lados de los hexágonos; esta cantidad sirve como unidad básica de la estructura molecular¹⁹; es decir, de los enlaces entre átomos.

Es necesario resaltar que el nanotubo que representa esta simulación está en disposición recta longitudinal (con extremos en zig-zag) lo cual puede verse como si hubiese sido "armado" con anillos de hexágonos.

Para la construcción del nanotubo se utiliza un método geométrico que usa un módulo especial para crear un hexágono en posición normal (centrado en el plano XY) en un cierto sistema de referencia $S1$. Este módulo invoca la subrutina correspondiente siempre con las variantes de traslación y rotación de manera que se van colocando hexágonos, uno tras otro, acomodados de modo que forman un cilindro. El programa lo único que hace es calcular la posición del origen del sistema $S1$ y el ángulo de rotación manteniendo constante la orientación respecto de un eje principal (en este caso X) y ahí dibujar un hexágono.

¹⁹ Usualmente coincide con el doble del radio iónico, que para el carbono es de .077 nm.

Las subrutinas S1 : y HEXAGONO : son las encargadas de generar el hexágono en posición normal sobre el sistema de referencia con origen y orientación móviles S1. Un conjunto de condicionantes eligen cuando marcar un vértice y una arista y cuando omitir su representación (para evitar una duplicación de elementos por causa del traslape de hexágonos, por ejemplo).

La subrutina ESFERA : tiene por cometido crear una bola en cada uno de los vértices de la malla para representar de manera tridimensional a los átomos. Esta subrutina simula el radio de electrones de coraza de cada uno de los átomos, al rededor de .05 nm (similar al radio de Bohr), por tanto corresponde a la estructura mecánica del nanotubo y no a la parte que responde a la influencia de los campos electromagnéticos del medio.

Finalmente se encuentran las subrutinas RESULTADOS : , CUENTA : , ESCRIBIR : y LEER : encargadas de dar la cuenta del número total de los vértices en la malla o posiciones atómicas, crear un archivo de datos ASCII con el conjunto de coordenadas y leer el archivo de datos generado para verificar la correcta escritura por parte del equipo de cómputo.

Es importante notar que el enrollamiento cilíndrico de la malla genera una deformación en los hexágonos, que al no poder abandonar el plano sufren de una pequeña distorsión en uno de sus lados que los hace apartarse ligeramente del patrón original. En general despreciamos este factor de error en el programa debido a que, además de hacerse pequeño, en la medida que los radios y el número de hexágonos por anillo aumenta; resulta realista, pues las mallas de carbono también sufren distorsión estando enrolladas.

Simulación de Nanotubos Quirales

Algunas variantes practicadas al programa que simula nanotubos con disposición recta longitudinal y extremos en zig-zag permiten generar nanotubos quirales. Los algoritmos pueden consultarse en la parte correspondiente del Apéndice I.

Puede decirse en este punto que, aunque se ha hablado del enrollamiento de una malla de hexágonos todo el tiempo, el programa simulador no genera una malla para luego enrollarla. El programa construye el nanotubo calculando cada una de las posiciones de los vértices, una a una, siguiendo un algoritmo geométrico.

A continuación se presentan las primeras variantes quirales del nanotubo (32,0) recto longitudinal con extremos en zig-zag:

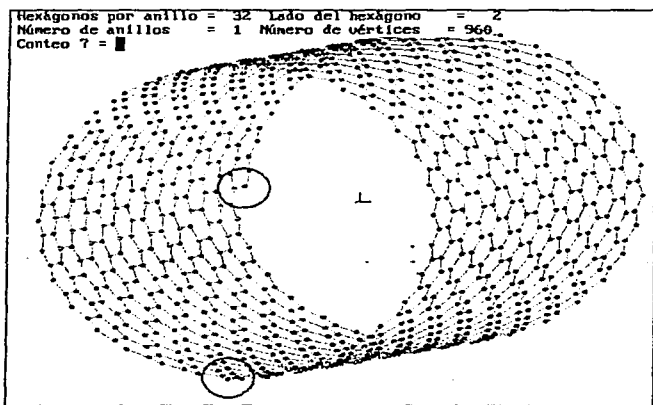


FIGURA 2-10 Simulación de un nanotubo Q1 con 960 vértices (32, 1).

Este nanotubo tiene 32 hexágonos por cada anillo, y 14 anillos que están secuenciados de uno en uno dando así un factor de quiralidad 1, los círculos muestran los lugares donde empieza y donde termina el enrollamiento de la "única cinta" de hexágonos que conforma este nanotubo.

Nota: la opción Conteo: que se muestra en pantalla permite al usuario verificar el número de vértices en la estructura corriendo un algoritmo diferente que el usado por la función de cálculo Número de vértices. Así se puede confirmar que la cuenta de vértices o átomos en el nanotubo de carbón es la correcta.

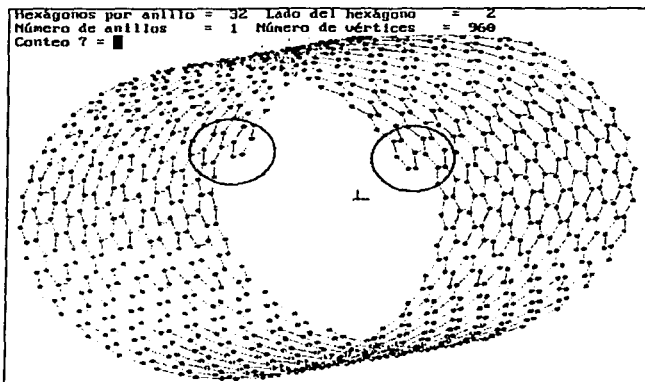


FIGURA 2-11. Simulación de un nanotubo Q2 con 960 vértices (32, 2).

Este nanotubo tiene 32 hexágonos por anillo, y 15 anillos secuenciados de dos en dos dando un factor de quiralidad 2, los círculos muestran los lugares donde empieza y termina el enrollamiento de la "cinta doble" que conforma este nanotubo.

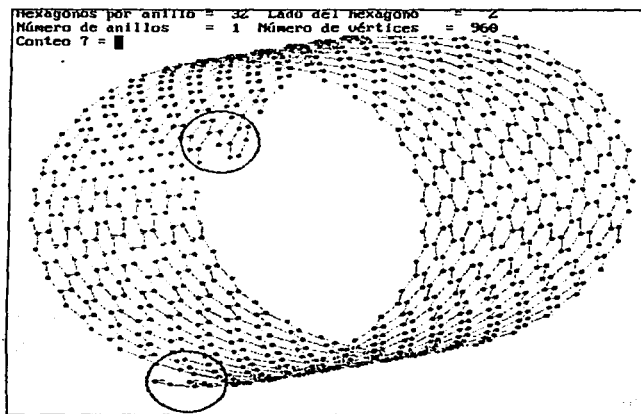


FIGURA 2-12 Simulación de un nanotubo Q3 con 960 vértices (32, 3).

Este nanotubo tiene 32 hexágonos por anillo, y 14 anillos secuenciados de tres en tres dando un factor de quiralidad 3, los círculos muestran los lugares donde empieza y termina el enrollamiento de la "cinta triple" que conforma este nanotubo.

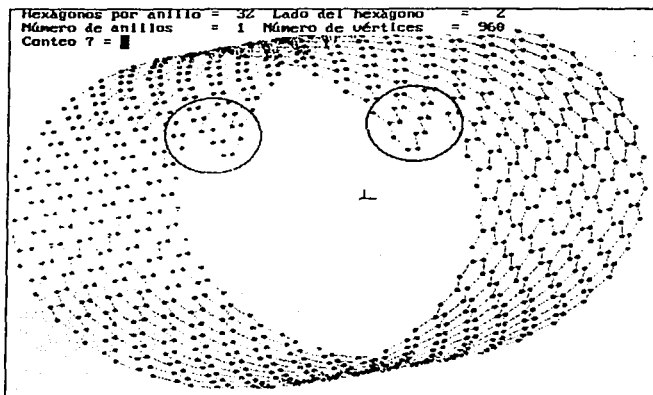


FIGURA 2-13 Simulación de un nanotubo Q4 con 968 vértices (32, 4).

Este nanotubo tiene 32 hexágonos por anillo, y 13 anillos secuenciados de cuatro en cuatro dando un factor de quiralidad 4, los círculos muestran los lugares donde empieza y donde termina el enrollamiento de la "cinta cuádruple" que conforma este nanotubo.

Hasta aquí el algoritmo del programa de simulación lo que hace es generar una cinta múltiple QN y enrollarla, para lo cual modifica el número de anillos y su separación, además de la profundidad de la figura.

El caso para QN grande se considera menos importante debido a que, desde algún punto de vista, los casos de quiralidad más interesantes son los primeros ya que son aquellos en donde se evidencian los cambios más sutiles de las propiedades de estas estructuras.

Nota: en los cálculos de las propiedades de las estructuras quirales se hará una corrección para evitar los efectos de "punta" generados por los hexágonos salientes del cilindro que se observan precisamente señalados con los círculos.

Formalismo: Teoría Microscópica

El Dipolo Eléctrico

Dos cargas iguales y de signo contrario forman un dipolo eléctrico, el campo eléctrico y la distribución de potencial producido por esta configuración en el espacio puede analizarse con la ayuda de las conocidas fórmulas:

$$\mathbf{E} = \lim_{q \rightarrow 0} \sum_{i=0}^n \frac{\mathbf{F}_{iq}}{q} \quad (1)$$

y

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla \phi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

Suponiendo que una carga $-q$ está ubicada en el punto \mathbf{r}' y que una carga q está en el punto $\mathbf{r}' + \mathbf{l}$, como se muestra en la figura 2-14; entonces, el campo eléctrico en un punto arbitrario \mathbf{r} del espacio, debido a estas cargas, puede escribirse como:

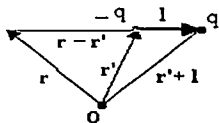


FIGURA 2-14
Dipolo Eléctrico.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{l}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{l}|^3} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \right\} \quad (3)$$

Si se considera que la distancia l entre cargas es pequeña en comparación con la diferencia $r - r'$, entonces se puede desarrollar la ecuación (3) conservando sólo el primer término que no se anula. La dificultad en el desarrollo se debe al denominador del primer término de la ecuación (3). El inverso de este denominador puede expresarse como:

$$\begin{aligned} |\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{l}|^{-3} &= [(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 - 2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{l} + l^2]^{-3/2} \\ &= |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-3} \left[1 - \frac{2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{l}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} + \frac{l^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \right]^{-3/2} \end{aligned} \quad (4)$$

Es fácil desarrollar esta última ecuación por el teorema del binomio, conservando sólo los términos lineales en l . El resultado de este desarrollo es:

$$|r - r' - l|^{-3} = |r - r'|^{-3} \left\{ 1 - \frac{3(r - r') \cdot l}{|r - r'|^2} + \dots \right\} \quad (5)$$

Sustituyendo en la ecuación (3), y conservando nuevamente sólo los términos lineales en l , se tiene:

$$E = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{3(r - r') \cdot l}{|r - r'|^3} (r - r') + \frac{l}{|r - r'|^3} + \dots \right\} \quad (6)$$

Esta ecuación da la parte del campo eléctrico, debida a un dipolo eléctrico finito, que es proporcional a la separación de las cargas. Hay otras contribuciones proporcionales al cuadrado, al cubo y a potencias más altas de la separación. Sin embargo, si la separación es pequeña, estas potencias mayores contribuyen muy poco. En el límite, mientras l tiende a cero, todos los términos se anulan a menos que la carga se vuelva infinita.

En el límite, en el que el producto ql permanece constante, todos los términos excepto el término lineal en l se anulan. En este límite se forma un *dipolo puntual*. Un dipolo puntual no tiene carga neta, ni extensión en el espacio, y se caracteriza completamente por su momento dipolar que es el límite de ql cuando l tiende a cero. Se utiliza el símbolo p para representar el momento dipolar eléctrico, y se escribe:

$$p = ql \quad (7)$$

En términos del momento dipolar, la ecuación (6) puede expresarse como:

$$E = \frac{l}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{3(r - r') \cdot p}{|r - r'|^3} (r - r') + \frac{p}{|r - r'|^3} \right\} \quad (8)$$

La distribución de potencial producida por un dipolo puntual también es útil y puede encontrarse buscando una función cuyo gradiente sea igual al lado derecho de la ecuación (8). Sin embargo, es más fácil aplicar la siguiente ecuación de potencial electrostático para cargas puntuales.

$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=0}^n \frac{q_i}{|r - r'_i|} \quad (9)$$

Empleando la notación de la ecuación (3), la distribución de potencial está dada por:

$$\varphi(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{|r - r' - l|} - \frac{1}{|r - r'|} \right\} \quad (10)$$

Desarrollando el primer término exactamente en la misma forma en que se hizo para el primero en la ecuación (3) y conservando sólo el término lineal en l , la ecuación (10) puede ponerse en la forma:

$$\varphi(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{(r - r') \cdot l}{|r - r'|^3} \quad (11)$$

Esta ecuación es válida para la misma aproximación que (6); es decir, los términos proporcionales a l^2 y las potencias mayores de 1 se desprecian. Para un dipolo puntual, p , la ecuación (11) es exacta, sin embargo, es mejor expresarla como:

$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{p \cdot (r - r')}{|r - r'|^3} \quad (12)$$

La ecuación (12) da el potencial $\varphi(r)$ producido por un dipolo eléctrico localizado en el punto r' y a partir de ese potencial puede determinarse el campo eléctrico (8).

Radiación de un Dipolo Oscilante

Quizás, el mecanismo más sencillo de producción de una onda electromagnética es el dipolo oscilante, de dos cargas opuestas que vibran en la dirección que las une.

En la figura 2-15 se muestra esquemáticamente la distribución del campo eléctrico en el espacio producido por un dipolo oscilante.

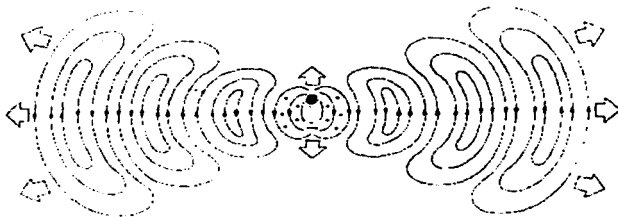


FIGURA 2-15 Campo E de un dipolo oscilante.

En esta configuración simplificada, una carga negativa oscila linealmente en un movimiento armónico simple alrededor de una carga positiva estacionaria igual.

Si la frecuencia angular de la oscilación es ω , el momento dipolar dependiente del tiempo $p(t)$ tiene la forma:

$$p(t) = p_0 \cos \omega t \quad (13)$$

y puede representar el momento colectivo de la distribución de carga oscilante a escala atómica.

A $t = 0$, $p = p_0 = qd$ donde d es la separación inicial máxima entre los centros de las dos cargas.

El momento dipolar es un vector en la dirección de $-q$ a $+q$. Según se da el desplazamiento, la magnitud del momento dipolar también varía de cero, cuando ambos centros de carga coinciden; hasta su valor máximo. Cuando las cargas se superponen $p_0 = 0$ y las líneas del campo deben cerrarse.

Muy cerca del átomo, el campo E tiene la forma de un dipolo eléctrico estático. Un poco más afuera, en la región donde se forman las curvas cerradas, no hay ninguna longitud de onda específica. El tratamiento detallado muestra que el campo eléctrico se compone de cinco términos diferentes [26]. Lejos del dipolo, en lo que se llama onda o *zona de radiación*, la configuración del campo es mucho más simple. En esta zona, ha sido establecida una longitud de onda determinada; E y B son transversales, mutuamente perpendiculares y están en fase. Más concretamente:

$$E = \frac{p_0 k^2 \sin \theta \cos(kr - \omega t)}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (14)$$

y $|B| = |E|/c$. Donde los campos están orientados según la figura 2-16, y la constante $(4\pi)^{-1}$ aparece solo en el sistema de unidades MKSC.

El vector de Poynting $S = E \times B / \mu_0$ siempre apunta radialmente y hacia afuera de la zona de la onda. Ahí las líneas del campo B son círculos concéntricos con el eje del dipolo y en un plano perpendicular al mismo. Esto es comprensible ya que se puede considerar que B surge de la corriente del oscilador variable en el tiempo.

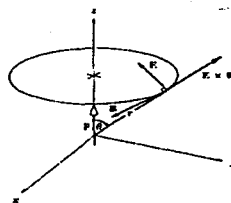


FIGURA 2-16 Orientaciones de los campos eléctrico y magnético para un dipolo eléctrico oscilante.

Se puede demostrar que la irradiancia (emitida radialmente hacia afuera de la fuente) se puede expresar como:

$$I(\theta) = \frac{p_0^2 \omega^4}{32\pi^2 c^3 \epsilon_0} \frac{\sin^2 \theta}{r^2} \quad (15)$$

De nuevo una dependencia con la ley del inverso del cuadrado de la distancia. La distribución de la densidad de flujo angular es toroidal. El eje en el que se produce la aceleración es el de simetría de la distribución de radiación.

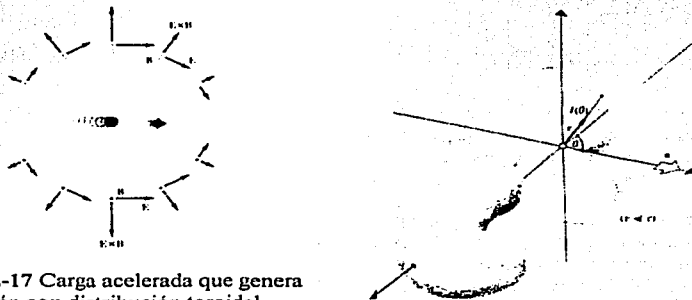


FIGURA 2-17 Carga acelerada que genera una radiación con distribución toroidal.

De la dependencia de la irradiancia en ω^4 , se tiene que *cuanto más elevada sea la frecuencia, más intensa será la radiación.*

Dipolos Inducidos

Las moléculas pueden clasificarse en polares y no polares. Una *molécula polar* es aquella que tiene un momento dipolar permanente, aún en ausencia de un campo polarizante E_m .

Así que, se pueden estudiar dos casos, la respuesta de un material polar a un campo eléctrico externo y uno más sencillo en que intervienen *moléculas no polares* y en el que los centros de gravedad de las distribuciones de carga positivas y negativas coinciden normalmente.

Como un ejemplo importante de molécula polar se tiene la del agua, H_2O ; en la que la asimetría contribuye a ampliar su "funcionalidad". En cambio, las moléculas simétricas, tales como H_2 , N_2 , O_2 , C_6 o las que son monoatómicas tales como He, En y Ar, se encuentran en la categoría de moléculas no polares.

La aplicación de un campo eléctrico provoca un desplazamiento relativo de las cargas positivas y negativas en las moléculas no polares, y los dipolos moleculares así formados se llaman *dipolos inducidos*.

Es posible construir un modelo clásico sencillo para el átomo y de este modelo obtener una expresión para el momento dipolar inducido y, en consecuencia, para su polarizabilidad; y aunque, diseñado específicamente para tratar con moléculas monoatómicas, el modelo puede utilizarse para moléculas simétricas, aplicándolo por separado a cada uno de los átomos de la molécula para obtener las polarizabilidades atómicas. *La polarizabilidad molecular es entonces la suma de la polarizabilidad atómica*, siempre y cuando no se reacomoden las cargas por la presencia del otro átomo.

Un átomo está formado por un núcleo extremadamente pequeño cargado positivamente, rodeado por electrones orbitales que están en un estado de movimiento continuo. Como los electrones recorren sus órbitas en un tiempo sumamente corto, del orden de 10^{-15} segundos, es evidente que en el átomo "estático" equivalente cada carga electrónica está "repartida" sobre su órbita.

Aún que la mecánica cuántica nos dice que, los electrones no se localizan realmente en órbitas, sino que tienen una probabilidad finita de estar situados en cualquier parte del átomo. Puede tomarse la respuesta de un átomo a un campo electrostático o a campos eléctricos que varíen lentamente considerando que el electrón está distribuido sobre su órbita en el átomo y que cada órbita está extendida sobre una parte del volumen atómico. Un modelo clásico compatible es una carga positiva puntual (el núcleo) rodeada por una nube esféricamente simétrica de carga negativa en la cual la densidad es esencialmente uniforme hasta el radio R_0 y cero a radios mayores.

Para calcular la polarizabilidad de este "átomo" se asigna la carga Ze al núcleo, siendo e el valor absoluto de la carga electrónica y Z el número atómico. Como el átomo es eléctricamente neutro, la carga total de la nube electrónica es $-Ze$. Al colocar el átomo en un campo polarizante E_m el núcleo se desplazará respecto al centro de la nube de carga una distancia que llamaremos x . Este desplazamiento se da en la dirección E_m .

Supondremos que la nube de carga se mueve rígidamente, es decir, no hay distorsión de la nube por el campo polarizante. El desplazamiento x puede determinarse a partir del equilibrio de fuerzas sobre el núcleo: la fuerza ZeE_m actúa en la dirección del campo, mientras que una fuerza electrostática entre el núcleo y la nube de carga tiende a restaurar la configuración inicial. Por la ley de Gauss, la carga negativa que atrae al núcleo es la parte dentro de la esfera de radio x , y si la densidad electrónica en la nube es uniforme, entonces esta carga es Zex^3/R_0^3 , dado que la proporción entre ambos volúmenes es simplemente x^3/R_0^3 .

En consecuencia, se tiene que:

$$\frac{(Ze)(Zex^{-1} / R_0^3)}{4\pi\epsilon_0 x^2} = ZeE_m \quad (16)$$

o bien

$$Zex = 4\pi\epsilon_0 R_0^3 E_m \quad (17)$$

En unidades MKSC. Como el dipolo atómico formado en este proceso es: $p_m = Zex$, la última ecuación puede tomarse como:

$$p_m = \alpha E_m \quad (18)$$

La razón del momento dipolar de una molécula al campo polarizante se llama *polarizabilidad molecular* α . Con $\alpha = 4\pi\epsilon_0 R_0^3$ en unidades de volumen [27].

Aplicación de un Campo Eléctrico en Moléculas Polares

Una molécula polar tiene un momento dipolar permanente y está formada por al menos dos especies distintas de átomos. Durante la formación de moléculas, algunos de los electrones pueden transferirse completa o parcialmente de una especie atómica a otra; la disposición electrónica resultante es tal que los centros de carga positivos y negativos no coinciden en la molécula. En ausencia de un campo eléctrico, una porción macroscópica de un material polar no está polarizada, ya que los dipolos individuales están orientados al azar.

Definiendo la polarización del material polar como:

$$P = \frac{1}{\Delta V} \sum p_m \quad (19)$$

Donde la suma se efectúa sobre todas las moléculas del elemento de volumen Δv . Cuando los p_m se orientan al azar, la suma se anula.

Si el material polar se somete a un campo eléctrico, los dipolos experimentan momentos de rotación que tienden a alinearlos con el campo. Si el campo es suficientemente intenso, los dipolos pueden alinearse por completo y la polarización alcanza el valor de saturación.

$$P = Np_m \quad (20)$$

Donde N es el número de moléculas por unidad de volumen. Este efecto de orientación se suma a los efectos dipolares inducidos, que generalmente también están presentes.

Campo Electrostático en un Nanotubo

Supóngase ahora, un nanotubo de carbono inmerso en un campo eléctrico constante. Este nanotubo no tiene cargas libres. Sin embargo, se compone de átomos de carbono C^6 y éstos a su vez de entidades cargadas (núcleos atómicos y electrones) que son afectadas por la presencia del campo eléctrico.

El campo eléctrico produce una fuerza que se ejerce sobre cada partícula cargada, empujando las partículas positivas en la dirección del campo y las negativas en sentido opuesto, de modo que las partes positivas y negativas de cada átomo de carbono se desplazan de sus posiciones de equilibrio en sentidos opuestos, “los átomos de carbono del nanotubo se polarizan”, formando dipolos eléctricos.

Sin embargo, estos desplazamientos en las cargas ligadas están limitados, en la mayoría de los casos, a fracciones muy pequeñas de un diámetro atómico (que para el carbono es de 0.154 nm), por intensas fuerzas recuperadoras que se forman al cambiar la configuración de las cargas de los átomos. El término “carga ligada”, en contraste con el de “carga libre” de un conductor, se usa a veces para poner énfasis en el hecho de que tales cargas atómicas no son libres para moverse muy lejos o ser extraídas del material del nanotubo.

Un nanotubo polarizado por la presencia de un campo eléctrico, aún cuando sea eléctricamente neutro en promedio, produce indudablemente un campo eléctrico en los puntos exteriores e interiores del mismo.

La polarización del nanotubo depende del campo eléctrico total en el medio, pero una parte del campo eléctrico es producida por el propio nanotubo.

Campo Local en un Nanotubo de Carbono

El campo eléctrico responsable de la polarización de un átomo de carbono en un nanotubo se llama campo local, E_m , y es el campo eléctrico en una posición especificada del nanotubo, donde se encuentre un átomo. Es producido por todas las fuentes externas y por todos los átomos polarizados en la estructura *con excepción* del que está en el punto en consideración.

Polarización de un Nanotubo de Carbono

En presencia de un campo eléctrico, en un nanotubo, se produce una separación de cargas positivas y negativas en cada átomo que se caracteriza por un momento dipolar eléctrico p_i .

El momento dipolar $p_i(x_i, y_i, z_i)$ es una cantidad vectorial ya que, en cada átomo del nanotubo, tiene una dirección dada, que es la del desplazamiento de la carga positiva con respecto a la negativa.

Puesto que la interacción entre los átomos polarizados de un nanotubo no son idénticas para cada átomo y varía según la posición relativa de cada átomo respecto de todos los demás en la estructura, conviene hablar del momento dipolar eléctrico p , de cada uno de los átomos de la malla hexagonal cilíndrica que conforma el nanotubo.

Campo Dentro y Fuera de un Nanotubo

Consideremos un nanotubo de carbono polarizado, es decir, que está caracterizado en cada punto r_i donde se encuentra un átomo, por una polarización $p_i(r_i)$. La polarización da origen a un campo eléctrico en un punto r que no pertenece al nanotubo. Para calcularlo resulta conveniente calcular primero el potencial $\phi(r)$ y luego obtener el campo eléctrico como menos el gradiente de ϕ .

Entonces, cada átomo del nanotubo se caracteriza por un momento dipolar p , y, como la distancia entre $r = (x, y, z)$ y $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ es grande comparada con las dimensiones de los átomos, este momento dipolar determina completamente la contribución de la carga al potencial total en el punto r .

$$\phi(r) = \frac{p_i \cdot (r - r_i)}{4\pi\epsilon_0 |r - r_i|^3} \quad (21)$$

Aquí $r - r_i$ es el vector, dirigido hacia afuera desde el elemento "i" del nanotubo.

$$|r - r_i| = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2} \quad (22)$$

El potencial total en el punto r se obtiene sumando las contribuciones de todos los elementos del nanotubo es entonces:

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum \frac{P(r_i) \cdot (r - r_i)}{|r - r_i|^3} \quad (23)$$

El campo eléctrico E puede obtenerse como menos el gradiente de esta ecuación.

Susceptibilidad Eléctrica y Constante Dieléctrica en un Nanotubo de Carbono

El grado de polarización de los átomos de un nanotubo ocurre como respuesta al campo eléctrico en el medio y depende también de las propiedades de las moléculas que forman el material del nanotubo.

Desde el punto de vista macroscópico, el comportamiento del material está completamente especificado por una relación, que se determina en forma experimental, llamada *ecuación constitutiva*, $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{E})$, donde \mathbf{E} es el campo eléctrico macroscópico total. Esta expresión es una relación puntual, y si \mathbf{E} varía de un punto a otro; entonces, el momento dipolar por unidad de volumen, \mathbf{P} varía igualmente.

Para la mayoría de los materiales de carbono, \mathbf{P} se anula cuando \mathbf{E} se anula, lo cual es el comportamiento más común. Además, si la estructura es isótropa, la polarización deberá tener el mismo sentido que el campo eléctrico que lo provoca.

$$\mathbf{P} = \chi \mathbf{E} \quad (24)$$

Donde la cantidad χ se llama *susceptibilidad eléctrica* del nanotubo²⁰.

El comportamiento eléctrico de un nanotubo queda ahora especificado completamente por la susceptibilidad eléctrica χ . Sin embargo, puede usarse una cantidad adimensional K definida como:

$$\epsilon = K\epsilon_0 \quad (25)$$

Donde K es el coeficiente dieléctrico, o simplemente *constante dieléctrica*. La constante ϵ_0 es la permitividad del vacío y ϵ la de los átomos que forman el nanotubo y se relacionan por la expresión:

$$\epsilon(\mathbf{E}) = \epsilon_0 + \chi \quad (26)$$

Si el campo eléctrico en un nanotubo se hace muy intenso, podrá sacar electrones de las moléculas y el nanotubo se convertirá en un conductor durante cierto tiempo. El máximo campo eléctrico que un nanotubo puede soportar sin romperse se llama *rigidez dieléctrica* del nanotubo.

²⁰ Gran variedad de materiales son eléctricamente isótropos; esta categoría incluye fluidos, sólidos policristalinos, sólidos amorfos y algunos cristales.

Respuesta de un Nanotubo a un Campo Electromagnético

Los átomos de carbono constituyentes de un nanotubo pueden reaccionar a la luz de dos maneras distintas:

1. Resonando a la frecuencia de incidencia y emitiendo sólo esa frecuencia. Los átomos "esparcirán" la luz, dándole otra dirección pero sin alterarla.
2. Absorbiendo los fotones entrantes con la energía ($E = h\nu$) de alguna de las transiciones electrónicas y emitiendo los colores de su espectro de emisión. En este caso los átomos también absorberán la luz.

Entonces, si la energía es pequeña como para producir transiciones a cualquiera de los estados excitados, que es el primer caso; a pesar de ello, puede suponerse que el campo electromagnético lleve a las nubes de electrones a oscilar. Si no resulta ninguna transición atómica; los átomos permanecen en su estado fundamental mientras que las nubes vibran muy débilmente a la frecuencia de la luz incidente.

Una vez que las nubes de los electrones empiezan a vibrar con respecto a los núcleos positivos, el sistema constituye un conjunto de *dipolos oscilantes* y, empezarán inmediatamente a radiar a la misma frecuencia. La luz dispersa resultante consta de fotones que salen disparados hacia alguna dirección llevando la misma cantidad de energía que los fotones incidentes —el esparcimiento es elástico—. Si la luz incidente no está polarizada los átomos constituyentes del nanotubo, como osciladores atómicos esparcirán al azar.

Respuesta de los Átomos de un Nanotubo

Como la mayoría del comportamiento químico y óptico de los átomos está supeditada a los electrones exteriores o de valencia. La parte restante de la nube está normalmente formada por capas cerradas, esencialmente sin respuesta, colocadas alrededor y estrechamente ligadas al núcleo. Estas capas cerradas o llenas están formadas por un número determinado de pares de electrones.

Cuando se da una cantidad suficiente de energía a un átomo (normalmente a los electrones de valencia), sea cual fuere su causa, el átomo puede reaccionar pasando de un nivel más bajo de energía a uno más elevado. El electrón dará lugar a una transición muy rápida, *un salto cuántico*, desde su configuración orbital de estado fundamental hasta uno de los estados excitados bien definidos.

La cantidad de energía que se absorbe en un proceso es igual a la diferencia entre los estados iniciales y finales, por eso se dice que la energía que un átomo puede absorber está cuantizada (es decir, limitada a cantidades específicas).

Este fenómeno de excitación atómica es un fenómeno de resonancia de breve duración. Por lo general, después de aproximadamente 10^{-8} o 10^{-9} s, el átomo excitado se relaja espontáneamente volviendo a un estado inferior, en la mayoría de los casos el estado fundamental. Este reajuste de energía puede producirse mediante emisión de luz.

Si la transición atómica es acompañada de emisión de luz, *la energía del fotón corresponderá exactamente con la reducción de energía cuantificada del átomo*. Esto equivale a una frecuencia específica, mediante $\Delta E = h\nu$, una frecuencia asociada tanto con el fotón como con la transición atómica entre esos dos estados particulares. Esto se denomina *frecuencia de resonancia*, y es uno de los mecanismos en que los átomos absorben y emiten eficazmente energía.

Se puede pensar que el electrón orbital lleva a cabo su transición gradualmente amortiguada a la frecuencia de resonancia específica. La luz emitida así, puede entonces, imaginarse de manera semiclásica como si fuera emitida en un pulso direccional oscilante breve, o *tren de ondas*, que dura menos de 10^{-8} segundos.

Cuando un nanotubo es sometido a una onda electromagnética armónica incidente, la estructura de su carga interna experimenta fuerzas y/o torsiones variables en el tiempo, proporcionales a la componente del campo eléctrico de la onda

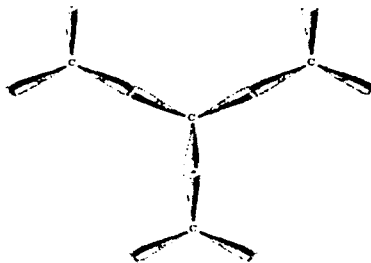
Las fuerzas que surgen de la componente magnética del campo tienen la forma $F_M = qv \times B$ en comparación con $F_E = qE$ para la componente eléctrica; pero $v \ll c$, por consiguiente se deduce que F_M es, por lo general despreciable.

Resumiendo parcialmente, en la región visible del espectro la polarización electrónica es el mecanismo operativo que determina el índice de refracción en función de la frecuencia. Clásicamente imaginamos que los osciladores electrónicos vibran a la frecuencia de la onda incidente. Cuando la frecuencia de ésta es sensiblemente distinta a la natural o característica, las oscilaciones son pequeñas y hay poca absorción disipativa. En la resonancia, sin embargo, las amplitudes de los osciladores aumentan y el campo desarrolla un mayor trabajo sobre las cargas. La energía electromagnética que se elimina de la onda y se convierte en energía mecánica se disipa térmicamente en el nanotubo.

Para el estudio de la respuesta óptica de los nanotubos también se utiliza el cómputo electromagnético, con el cual se trata de determinar sus propiedades.

Teoría Aplicada a Nanotubos de Carbono

Supóngase un nanotubo de carbono conformado únicamente de este tipo de átomos C^6 (Capa K: 1S²; Capa L: 2S² 2P²); como el arreglo está constituido de patrones hexagonales, cada átomo corresponde a un vértice en la malla y por tanto se encuentra enlazado con otros 3. Así que en una malla hexagonal la estructura mantiene en cada átomo 3 enlaces covalentes en disposición de estrella y a 120° entre sí.



La figura muestra la superposición de los orbitales 2P de los átomos de carbono coplanares.

FIGURA 2-18 Moléculas C_4 constituyentes de un nanotubo de carbono.

La distancia entre núcleos (o arista de cada hexágono es de $1.54 \text{ \AA} = 0.154 \text{ nm}$ (tomada de los enlaces covalentes del Etano C_2) de donde el radio covalente resulta ser $0.77 \text{ \AA} = 0.077 \text{ nm}$.

Entonces, la estructura de un nanotubo de carbono está basada en hexágonos en los que en cada vértice se encuentra un átomo; y donde los hexágonos tienen las proporciones que se muestran en la figura:

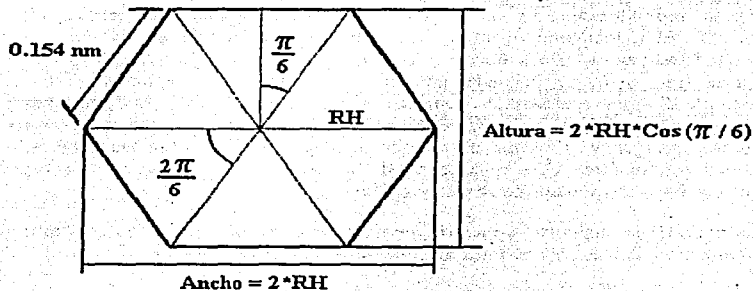


FIGURA 2-19 Proporciones de un hexágono de nanotubo en posición normal.

El radio del círculo que circunscribe al hexágono viene a ser:

$$RH = (0.154 \text{ nm}) / 2 * \text{Sen}(\pi/6) = 0.154 \text{ nm} \quad (27)$$

con lo cual se obtiene para la altura el valor.

$$\text{Altura} = (0.154 \text{ nm}) * \text{Cos}(\pi/6) = 0.267 \text{ nm} \quad (28)$$

y para el ancho del hexágono:

$$\text{Ancho} = 2 * (0.154 \text{ nm}) = 0.308 \text{ nm} \quad (29)$$

Con estas cantidades resulta fácil conocer los tamaños de los nanotubos de carbono en función de la cantidad de hexágonos que los conforman.

En un nanotubo de m anillos cada uno aporta sólo $\frac{3}{4}$ del ancho del hexágono debido a que hay traslape, salvo el primer anillo que si aporta su ancho completo.

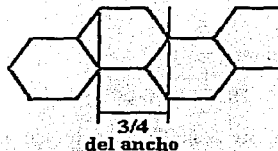


FIGURA 2-20 Ancho de un anillo.

Entonces la fórmula que nos da la longitud en dirección del eje de los nanotubos está dada por:

$$\begin{aligned} \text{Largo del nanotubo de } m \text{ anillos} &= 0.308 \text{ nm} + (m-1) * (3/4) * 0.308 \text{ nm} \\ &= (1+3m) * (0.077 \text{ nm}) \end{aligned} \quad (30)$$

Que aplicada en un nanotubo con 10 anillos da 2.387 nanómetros de largo en la misma dirección del eje en la que se extiende.

En la figura se aprecia fácilmente el tamaño del nanotubo de carbono generado de 10 anillos.

Es una estructura muy pequeña y por lo mismo de gran interés para la física.

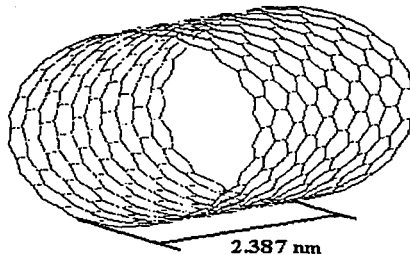


FIGURA 2-21 Longitud de un nanotubo.

El radio del nanotubo se obtiene en función del número de hexágonos en cada anillo. Es importante notar que mientras más hexágonos tenga por anillo el nanotubo menos distorsionados estarán los hexágonos de la malla enrollada.

Entonces, el radio del cilindro está dado por HC, de modo que la circunferencia es $2 * \pi * HC$.

El ángulo que subtiende cada hexágono es $\theta = 2 * \pi / NL$, donde NL es el número total de hexágonos que hay en cada anillo.

Así se tiene que $2 * HC * \text{Sen } \theta = \text{Altura del hexágono}$.

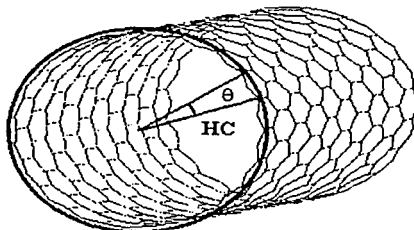


FIGURA 2-22 Radio de un nanotubo.

Por lo tanto:

$$HC = \text{Altura} / 2 * \text{Sen } \theta = (0.267 \text{ nm}) / 2 * \text{Sen}(2 \pi / NL) \quad (31)$$

Así que, por ejemplo, para un nanotubo de 20 hexágonos por anillo se obtiene para el radio el siguiente valor.

$$HC = (0.267 \text{ nm}) / 2 * \text{Sen}(2 * \pi / 20) = 1.337 \text{ nm} \quad (32)$$

Entonces el nanotubo tiene un diámetro de 2.674 nm.

Nota: estas mismas fórmulas han sido usadas en los programas simuladores para calcular las posiciones de los átomos que conforman los nanotubos.

Desarrollo Teórico Computacional

En los últimos años se han creado muchos métodos numéricos para encontrar las propiedades ópticas de partículas y estructuras nanoscópicas. Uno de los más simples e interesantes es el de la Aproximación de Dipolo Discreto (DDA Discrete Dipole Approximation), que consiste en una técnica adecuada para el estudio de la dispersión y la absorción de radiación electromagnética²¹ por partículas y estructuras con tamaños del orden de la magnitud de las longitudes de onda. El método de Aproximación de Dipolo Discreto fue introducido por Purcell y Pennypacker.

Para realizar el estudio de la respuesta de polarización de un conjunto de nanotubos de carbono simulados a un campo eléctrico usamos la teoría clásica del electromagnetismo de un modo similar a como es utilizada en el método DDA, y aplicamos la ecuación de campo eléctrico inducido a cada uno de los átomos determinados en la estructura de los nanotubos simulados, mediante un programa de cálculo numérico en Microsoft Visual C++ versión 6.0 para microcomputadoras.

Considerando que los objetos nanoscópicos con propiedades interesantes para la física se encuentran entre unos cuantos nanómetros y hasta unos 50 o 60, es necesario contabilizar todas las interacciones entre los elementos de los nanotubos a diferencia de la práctica seguida para el estudio de las propiedades en aproximación a primeros, segundos y hasta terceros vecinos.

Se ha tomado sólo un campo eléctrico constante con componentes en las tres direcciones perpendiculares para evaluar la polarización "estática" de cada uno de los átomos en una estructura nanoscópica.

El método que seguimos es el siguiente:

Polarización Estática Total

Sea un dipolo de momento dipolar $P(r_i) \cong P_{0i}$ inducido por un campo eléctrico externo E constante, en cada uno de los átomos en la posición r_i de los vértices de una malla hexagonal enrollada cilíndricamente; es decir, de un nanotubo.

Nota: el símbolo " \cong " significa *denota o simboliza*.

²¹ También se ha aplicado a toda clase de problemas, dentro de los que se incluyen el estudio del polvo estelar, los cristales de hielo, las células de la sangre humana, superficies de superconductores y otros.

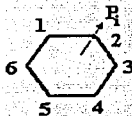


FIGURA 2-23 Hexágono.

La figura muestra el vector de polarización sobre uno de los vértices en uno de los hexágonos de la malla que conforma a un nanotubo de carbono.

Los vértices están numerados arbitrariamente y en general tienen magnitudes de polarización que varían entre sí, aunque no por mucho.

Entonces, en primera aproximación, el campo eléctrico total $E_0(\mathbf{r}) = (E_{0x}, E_{0y}, E_{0z})$ en cualquier punto $\mathbf{r} = (r_x, r_y, r_z)$ del espacio debido al campo externo E y a los N dipolos de un nanotubo está dado por

$$E_0(\mathbf{r}) = E + \sum_{i=1}^N \left[\frac{3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3} \cdot \mathbf{P}_i (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \frac{\mathbf{P}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3} \right] \quad (33)$$

Expresado en unidades *egs* que ofrecen la ventaja de igualar a 1 la constante $1/4\pi\epsilon_0$ que aparece al usar unidades *mks*.

Suponemos que el nanotubo de carbono se somete a un campo eléctrico externo, que como se ve en la figura²² se puede generar con dos placas paralelas cargadas mediante el uso de una fuente de voltaje variable.

Si la fuente se mantiene a potencial constante, entonces la polarización del nanotubo también será constante.

Si se hace variar el potencial también variará la polarización del nanotubo.

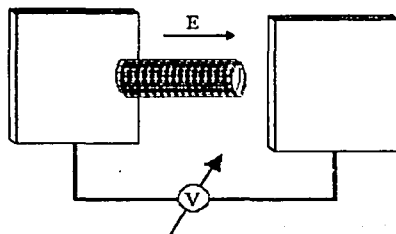


FIGURA 2-24 Nanotubo sometido a un campo eléctrico variable.

Entonces, si el campo eléctrico externo se expresa mediante la ecuación:

$$E = E' + iE'' \quad (34)$$

donde la parte compleja vale cero (se ha escrito ya que en los siguientes pasos será de utilidad pues aparece una componente compleja debida a la polarizabilidad según se verá a continuación).

²² En la figura el nanotubo está exagerado y el esquema de placas paralelas sólo pretende ser ilustrativo.

Y si la susceptibilidad eléctrica de los átomos de carbono del nanotubo en función de la frecuencia ω de la variación del campo eléctrico está dada por:

$$\alpha(\omega) = \alpha'(\omega) + i\alpha''(\omega) \quad (35)$$

donde la parte compleja está relacionada con la absorción de energía del campo.

Entonces la polarización inducida por el campo eléctrico externo E sobre cada átomo del nanotubo es:

$$P_{0i} = P_{0i}' + i P_{0i}'' = \alpha E = (\alpha' + i\alpha'') E = \alpha' E' + i\alpha'' E' \quad (36)$$

Al polarizarse los átomos del nanotubo modifican en sus proximidades el campo eléctrico, de modo que, el campo cambia punto a punto como:

$$E_0(r) \cong E_0 = E + \sum_{i=1}^N \left[\frac{3(r-r_i)}{|r-r_i|^3} \cdot P_{0i}(r-r_i) + \frac{P_{0i}}{|r-r_i|^3} \right] \quad (37)$$

y en particular sobre cada punto r_i en donde se encuentra un átomo del nanotubo.

$$E_0(r_i) \cong E_{0i} = E + \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[\frac{3(r_i-r_j)}{|r_i-r_j|^3} \cdot P_{0j}(r_i-r_j) + \frac{P_{0j}}{|r_i-r_j|^3} \right] \quad (38)$$

Definiendo:

$$\mathfrak{R}_{ij} \cong \frac{3(r_i-r_j)}{|r_i-r_j|^3}; \quad (39)$$

$$\mathfrak{I}_{ij} \cong \frac{1}{|r_i-r_j|^3}; \quad (40)$$

$$r_{ij} \cong r_i - r_j \quad (41)$$

y omitiendo los subíndices ij (que nunca cambian), se puede escribir de manera abreviada:

$$E_0 = E + \Sigma [\mathfrak{R} \cdot P_0 r + \mathfrak{I} P_0] \quad (42)$$

De modo que:

$$E_0 = E + \Sigma \mathfrak{R} \cdot [P_0] r + \Sigma \mathfrak{I} [P_0] \quad \text{"Campo local"} \quad (43)$$

$$E_0 = E_0' + i E_0'' = E' + \Sigma \mathfrak{R} \cdot [P_0' + i P_0''] r + \Sigma \mathfrak{I} [P_0' + i P_0''] \quad (44)$$

$$E_0 = E' + \Sigma \mathfrak{R} \cdot [P_0'] r + \Sigma \mathfrak{I} [P_0'] + i \{ \Sigma \mathfrak{R} \cdot [P_0''] r + \Sigma \mathfrak{I} [P_0''] \} \quad (45)$$

y que inducirá a su vez en el punto r_i la polarización:

$$P_i = P_i' + i P_i'' = \alpha E_0 = (\alpha' + i \alpha'') E_0 = (\alpha' + i \alpha'') (E_0' + i E_0'') \quad (46)$$

$$P_i = \alpha' E_0' - \alpha'' E_0'' + i \{\alpha'' E_0' + \alpha' E_0''\} \quad (47)$$

Con estos nuevos valores de la polarización eléctrica del nanotubo se obtiene la siguiente aproximación del campo eléctrico en el punto r_i .

$$E_i = E_i' + i E_i'' = E' + \sum \mathcal{R} \cdot [P_i' + i P_i''] r + \sum \mathcal{I} [P_i' + i P_i''] \quad (48)$$

$$E_i = E' + \sum \mathcal{R} \cdot [P_i' r + \sum \mathcal{I} [P_i'] + i \{\sum \mathcal{R} \cdot [P_i''] r + \sum \mathcal{I} [P_i'']\}] \quad (49)$$

con el que se obtiene la siguiente aproximación de la polarización P_{2i} en cada punto r_i . Siguiendo este proceso m veces se obtiene:

$$E_m = E + \sum \mathcal{R} \cdot [P_m] r + \sum \mathcal{I} [P_m] \quad \text{“Campo local”} \quad (50)$$

y

$$P_m = \alpha E_{m-1} \quad (51)$$

Esta aproximación es útil cuando la serie converge a un valor según el Teorema de Cauchy para convergencia de series infinitas; es decir, cuando:

$$P_{m+1} - P_m \rightarrow 0 \quad \text{si } m \rightarrow \infty \quad (52)$$

Con estos resultados generales se realizó el programa de cálculo numérico para la determinación de la polarización de un nanotubo y que permite también comprobar numéricamente la convergencia de esta serie.

Para el caso en que la constante de polarización α es un número real (y no tiene parte compleja) resulta fácil demostrar que la serie es convergente de manera analítica²³. El caso en que $\alpha = \alpha' + i \alpha''$ duplica la demostración para el caso real. La demostración analítica se divide en dos partes iguales, una real y otra compleja.

De cualquier manera resulta conveniente obtener la prueba de convergencia mediante un cálculo numérico de los términos sucesivos de la serie.

Además, la serie es monótona creciente ya que no tiene extremos locales en torno a ningún punto, es decir que la serie es absolutamente convergente teniendo un sólo máximo, lo cual coincide con el hecho natural de que la polarización no puede aumentar sin medida; esto se puede comprobar fácilmente con el cálculo numérico, en el que se aprecia además, que la convergencia se lleva a cabo a gran velocidad (los términos de la serie pronto difieren en órdenes menores que 10^{-8}).

23 Para ver la demostración por usando el Teorema de Cauchy véase el Apéndice 2.

Determinación de la Polarización de un Nanotubo

Para evaluar la polarización de los átomos que componen los nanotubos simulados; como respuesta a un campo electromagnético, se creó un programa complementario de Evaluación Numérica en Microsoft Visual C ++ versión 6.0 (compatible con lenguaje C genérico) que lee la información de los archivos de datos generados por los programas simuladores de nanotubos y los procesa. Los resultados obtenidos en este último se registran en otros archivos de datos. El código fuente del programa puede ser consultado en el Apéndice 2.

Descripción del Programa de Evaluación Numérica

Lo que el programa de Evaluación Numérica para el cálculo de la polarización de los átomos en los nanotubos hace es lo siguiente:

Primero que nada, y como en todos los programas en C, hace el llamado a las librerías de códigos de control para extender el funcionamiento del código fuente. Después de ello se ejecutan las órdenes para el manejo de los archivos de datos.

A continuación y como en el caso de todos los programas estructurados se procede a la declaración de variables y de constantes según su tipo²⁴.

Todos los comentarios que documentan el programa y las órdenes que no se desean ejecutar van precedidas por doble diagonal `"/"`. En muchos casos se encuentran párrafos completos deshabilitados, estos tienen por cometido facilitar la corrección del programa y la adaptación a diferentes cálculos, por ese motivo se han dejado en el código. Cuando se hace algún cambio al programa, se eliminan los caracteres `"/"` en estos párrafos auxiliares y el programa se detiene a elección del programador en un punto determinado de su ejecución.

Como se trabaja con nanotubos pequeños se dimensionan las variables de asignación de los datos a 9000 registros, aunque la capacidad de C está un orden de magnitud más arriba, 10^5 en la mayoría de los equipos medianos.

El programa inicia con la lectura de los datos correspondientes a las coordenadas de los vértices de algún nanotubo generado en el programa Simulador de Nanotubos que se ha descrito con anterioridad. Con estos números y con algunos valores iniciales para el campo electromagnético se calcula fácilmente el campo eléctrico local en cada punto y la polarización del elemento o átomo correspondiente y usando el conjunto de ecuaciones recién expuesto en este capítulo.

²⁴ Para este trabajo se ha utilizado precisión simple en la definición de todas las variables.

El programa calcula el campo eléctrico molecular y la polarización de cada elemento con ayuda de una serie aproximativa. Además, en todo momento se evalúan los términos sucesivos de la serie y se calcula su diferencia.

El programa maneja una precisión elevada de modo que no fue necesario preocuparse por la inexactitud o incertidumbre asociada a los cálculos. Por ejemplo, la precisión asociada a los puntos coordinados de los vértices o elementos de los nanotubos resultó superior a las cienmilésimas de nanómetros (10^{-15} m); y de manera análoga, para los cálculos del vector de campo eléctrico y de polarización también se maneja un factor de al menos cinco cifras significativas, con lo cual se puede decir que se realizaron cálculos exactos.

El programa se puede correr un número de pasos predeterminado, 10, 100, 1000 o más veces, hasta obtener la aproximación deseada. Los tiempos asociados a las ejecuciones largas de 1,000 o 10,000 ciclos son accesibles y van de 10 a 600 minutos en la computadora personal que se estuvo utilizando, con un poder de procesamiento de 256 MHz. Debido a que son pocos los cálculos que se realizan en cada corrida ya que las operaciones sobre cada dato no exceden 10 resulta un sistema de cálculo muy eficiente (¡en realidad cada corrida manipula más de cien mil datos y realiza varios millones de operaciones!).

De cualquier manera la serie aproximativa siempre resulta absolutamente convergente y en unos cuantos pasos, 5 o 10 ciclos, se llega en todos los casos a los valores límite del campo molecular en cada elemento de los nanotubos.

El programa también aplica el teorema de Cauchy y obtiene en cada paso la diferencia entre un término y el siguiente en la serie.

Es notable que las ecuaciones (50) y (51) para el campo electromagnético total y la polarización de cada átomo tengan una velocidad de convergencia tan alta, entre el quinto y el décimo ciclo ya los términos sucesivos de la serie difieren en menos de 10^{-8} , lo cual resulta en un método muy preciso.

Nota: en todas las corridas realizadas se supuso como una buena aproximación la generada con 10 ciclos. Los análisis que llevaron a esta elección no se presentan en la tesis por constar de demasiados datos y ser de poca importancia tratándose de series tan "bien portadas".

Una vez que ha realizado todos los cálculos, este programa escribe en un archivo los valores del campo eléctrico local y la polarización de cada elemento.

Los valores registrados en estos archivos de datos son listados y graficados con ayuda de las hojas de lectura electrónica de Microsoft Excel versión 2000.

CAPÍTULO 3

ANÁLISIS DE DATOS

Selección de Muestras

Para el estudio de la polarización de los nanotubos primero se empieza investigando el caso de diferentes nanotubos con disposición recta longitudinal (sin quiralidad). Así se corre el programa de cálculo numérico para la evaluación de la polarización en cada uno de los elementos de los nanotubos con diferentes longitudes y número de hexágonos por anillo. Es importante remarcar que en todos los casos se consideró el tamaño de las aristas de 0.154 nm; es decir que todos los nanotubos simulados corresponden a mallas hexagonales plegadas cilíndricamente con exactamente el mismo patrón hexagonal basado en los enlaces de carbono.

La selección de los nanotubos de carbono a estudiar se basó en los siguientes criterios.

1. Las dimensiones de los nanotubos deberán encontrarse entre 1 y 10 nm de diámetro y hasta 50 nm de longitud.
2. Las estructuras a estudiadas no exceden los 9,000 elementos. Esta es una fuerte restricción y se debe a que para la ejecución del programa se utilizó el poder de procesamiento de una microcomputadora (32 MB en RAM y 255 MHz de velocidad del procesador). Claro está que las mismas formulaciones implementadas con algoritmos idénticos podrán ser utilizadas para estudiar estructuras más grandes, con cientos de miles de elementos, pero esto corresponde únicamente a un problema de supercómputo; y además, las propiedades interesantes que medimos empiezan a emerger en la agregación de átomos en donde la aportación individual de cada átomo resulta tan importante como el efecto colectivo, a la interacción de la estructura con su medio.
3. Debido a que los nanotubos son creados con base en un patrón hexagonal se toma el número seis como un número que marca cierta simetría en el conjunto de nanotubos de malla hexagonal. Así por ejemplo, para facilitar el conjunto seleccionado de nanotubos a simular para el estudio de su polarización se han tomado intervalos múltiplos de 6 en muchos casos.

Se puede tener una gran cantidad nanotubos de diferentes dimensiones, de hecho el conjunto abarca a todos los nanotubos que puedan ser fabricados añadiendo un hexágono a cada anillo (para aumentar el radio del nanotubo) y aumentando un anillo más (para alargarlo). El nanotubo con menos hexágonos en cada uno de sus anillos tendría 3 hexágonos, pero la deformación ($360^\circ/6 = 60^\circ$) que deberían sufrir hacen que no puedan ser considerados buenos candidatos de estudio. La estructura hexagonal doblada como anillo y ajustada con otra igual empieza a ser interesante cuando la deformación de los hexágonos (al juntar anillos) se hace pequeña.

Para el presente estudio hemos considerado interesantes nanotubos que tienen desde 12 hexágonos por anillo (cada arista se inclina $360/24^\circ = 15^\circ$) hasta nanotubos con 150 hexágonos por anillo (con inclinaciones de $360^\circ/15 = 2.4^\circ$).

Los nanotubos con 12 hexágonos por anillo tienen un diámetro de 0.53 nm y los de 150 hexágonos por anillo alcanzan 6.38 nm de diámetro (mayores que los experimentales). Así que, se tiene un intervalo de 138 tipos de nanotubos por su diferente diámetro, de los cuales, de cada uno de estos diámetros se pueden tener nanotubos de 1, 2, 3, ..., y hasta un número muy grande de anillos.

La siguiente tabla muestra la variedad de posibles nanotubos en función del Número de Hexágonos por Anillo (diámetro) y del Número de Anillos (largo) que tengan. La tabla se divide de modo tal que el más largo de los nanotubos de cada especie, según su diámetro (en hexágonos) no exceda 9,000 elementos.

		Largo												
		1.00	1.46	1.93	2.39	2.85	3.31	3.77	4.24	4.70	5.16	5.62	6.08	
Diámetro	Hexágonos	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24	26	
		120	168	216	264	312	360	408	456	504	552	600	648	
0.53	12	120	168	216	264	312	360	408	456	504	552	600	648	
0.78	18	180	252	324	396	468	540	612	684	756	828	900	972	
1.03	24	240	324	408	492	576	660	744	828	912	996	1080	1164	
1.28	30	300	408	516	624	732	840	948	1056	1164	1272	1380	1488	
1.54	36	360	504	648	792	936	1080	1224	1368	1512	1656	1800	1944	
1.79	42	420	588	756	924	1092	1260	1428	1596	1764	1932	2100	2268	
2.05	48	480	672	864	1056	1248	1440	1632	1824	2016	2208	2400	2592	
2.30	54	540	756	972	1188	1404	1620	1836	2052	2268	2484	2700	2916	
2.55	60	600	840	1080	1320	1560	1800	2040	2280	2520	2760	3000	3240	
2.81	66	660	924	1188	1452	1716	1980	2244	2508	2772	3036	3300	3564	
3.06	72	720	1008	1296	1584	1872	2160	2448	2736	3024	3312	3600	3888	
3.32	78	780	1092	1404	1716	2028	2340	2652	2964	3276	3588	3900	4212	
3.57	84	840	1176	1512	1848	2184	2520	2856	3192	3528	3864	4200	4536	
3.83	90	900	1260	1620	1980	2340	2700	3060	3420	3780	4140	4500	4860	
4.08	96	960	1344	1728	2112	2496	2880	3264	3648	4032	4416	4800	5184	
4.34	102	1020	1428	1836	2244	2652	3060	3468	3876	4284	4692	5100	5508	
4.59	108	1080	1512	1944	2376	2808	3240	3672	4104	4536	4968	5400	5832	
4.85	114	1140	1596	2052	2508	2964	3420	3876	4332	4788	5244	5700	6156	
5.10	120	1200	1680	2160	2640	3120	3600	4080	4560	5040	5520	6000	6480	
5.36	126	1260	1764	2268	2772	3276	3780	4284	4788	5292	5796	6300	6804	
5.61	132	1320	1848	2376	2904	3432	3960	4488	5016	5544	6072	6600	7128	
5.87	138	1380	1932	2484	3036	3588	4140	4692	5244	5796	6348	6900	7452	
6.12	144	1440	2016	2592	3168	3744	4320	4896	5472	6048	6624	7200	7776	
6.38	150	1500	2100	2700	3300	3900	4500	5100	5700	6300	6900	7500	8100	
6.63	156	1560	2184	2808	3432	4056	4680	5304	5928	6552	7176	7800	8424	

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Largo	6.55 7.01 7.47 7.93 8.39 8.86 9.32 9.78 10.24 10.70 11.17 11.63 12.09												
Hexágonos	28	30	32	34	36	38	40	42	44	46	48	50	52
12					888								
18	1044	1116	1188	1260	1332	1404	1476	1548	1620	1692	1764	1836	1908
24	1380	1488	1596	1704	1812	1920	2028	2136	2244	2352	2460	2568	2676
30	1740	1860	1980	2100	2220	2340	2460	2580	2700	2820	2940	3060	3180
36	2100	2232	2364	2496	2628	2760	2892	3024	3156	3288	3420	3552	3684
42													
48													
54													
60													
66													
72													
78													
84													
90											8820	9136	9540
96									8640	9024	9408	9792	10176
102								8772	9160	9548	9936	10324	10712
108								8856	9240	9624	10008	10392	10776
114							8932	9316	9700	10084	10468	10852	11236
120						8980	9360	9740	10120	10500	10880	11260	11640
126				8920	9324	9728	10132	10536	10940	11344	11748	12152	12556
132			9712	9240	9768	10296	10824	11352	11880	12408	12936	13464	13992
138		9556	9108	9660	10212	10764	11316	11868	12420	12972	13524	14076	14628
144		9520	9504	10080	10656	11232	11808	12384	12960	13536	14112	14688	15264
150	9700	9300	9900	10500	11100	11700	12300	12900	13500	14100	14700	15300	15900
156	9048	9672	10296	10920	11544	12168	12792	13416	14040	14664	15288	15912	16536

Largo	12.55 13.01 13.48 13.94 14.40 14.86 15.32 15.79 16.25 16.71 17.17 17.63											
Hexágonos	54	56	58	60	62	64	66	68	70	72	74	76
12				1464								
18				2196								
24												
30												
36												
42												
48												
54												
60												
66							8844	9108	9372	9636	9900	10164
72						8784	9072	9360	9648	9936	10224	10512
78				8892	9204	9516	9828	10140	10452	10764	11076	11388
84	9240	9576	9912	10248	10584	10920	11256	11592	11928	12264	12600	12936

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Largo	18.10	18.56	19.02	19.48	19.94	20.41	20.87	21.33	21.79	22.25	22.72	23.18
Hexágonos	78	80	82	84	86	88	90	92	94	96	98	100
12	1836	1944	1992	2040	2088	2136	2184	2232	2280	2328	2376	2424
18	2844	2916	2988	3060	3132	3204	3276	3348	3420	3492	3564	3636
24	3792	3888	3984	4080	4176	4272	4368	4464	4560	4656	4752	4848
30	4740	4860	4980	5100	5220	5340	5460	5580	5700	5820	5940	6060
36	5688	5832	5976	6120	6264	6408	6552	6696	6840	6984	7128	7272
42	6636	6804	6972	7140	7308	7476	7644	7812	7980	8148	8316	8484
48	7584	7776	7968	8160	8352	8544	8736	8928	9120	9312	9504	9696
54	8532	8748	8964	9180	9396	9612	9828	10044	10260	10476	10692	10908
60	9480	9720	9960	10200	10440	10680	10920	11160	11400	11640	11880	12120

Largo	23.64	24.10	24.56	25.03	25.49	25.95	26.41	26.87	27.34	27.80	28.26	28.72
Hexágonos	102	104	106	108	110	112	114	116	118	120	122	124
12	2772	2856	2940	3024	3108	3192	3276	3360	3444	3528	3612	3696
18	4158	4260	4362	4464	4566	4668	4770	4872	4974	5076	5178	5280
24	5544	5664	5784	5904	6024	6144	6264	6384	6504	6624	6744	6864
30	6930	7068	7206	7344	7482	7620	7758	7896	8034	8172	8310	8448
36	8316	8468	8620	8772	8924	9076	9228	9380	9532	9684	9836	9988
42	9774	9936	10100	10264	10428	10592	10756	10920	11084	11248	11412	11576
48	10668	10848	11030	11212	11394	11576	11758	11940	12122	12304	12486	12668

Largo	29.18	29.65	30.11	30.57	31.03	31.49	31.96	32.42	32.88	33.34	33.80	34.27
Hexágonos	126	128	130	132	134	136	138	140	142	144	146	148
12	3438	3528	3618	3708	3798	3888	3978	4068	4158	4248	4338	4428
18	5158	5264	5370	5476	5582	5688	5794	5900	6006	6112	6218	6324
24	6978	7096	7214	7332	7450	7568	7686	7804	7922	8040	8158	8276
30	8798	8928	9058	9188	9318	9448	9578	9708	9838	9968	10098	10228
36	10618	10758	10900	11042	11184	11326	11468	11610	11752	11894	12036	12178

Largo	34.73	35.19	35.65	36.11	36.58	37.04	37.50	37.96	38.42	38.89	39.35	39.81
Hexágonos	150	152	154	156	158	160	162	164	166	168	170	172
12	4242	4344	4446	4548	4650	4752	4854	4956	5058	5160	5262	5364
18	6366	6480	6594	6708	6822	6936	7050	7164	7278	7392	7506	7620
24	8490	8616	8742	8868	8994	9120	9246	9372	9498	9624	9750	9876
30	10614	10752	10890	11028	11166	11304	11442	11580	11718	11856	11994	12132

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Largo	40.27	40.73	41.20	41.66	42.12	42.58	43.04	43.51	43.97	44.43	44.89	45.35
Hexágonos	174	176	178	180	182	184	186	188	190	192	194	196
12	1200	1216	1236	1244	1232	1440	1468	1536	1584	1632	1680	1728
18	6300	6372	6444	6516	6588	6660	6732	6804	6876	6948	7020	7092
24	8400	8496	8592	8688	8784	8880	8976	9072	9168	9264	9360	9456
30	10500	10620	10740	10860	10980	11100	11220	11340	11460	11580	11700	11820

Largo	45.82	46.28	46.74	47.20	47.66	48.13	48.59	49.04	49.51	49.97	50.44
Hexágonos	198	200	202	204	206	208	210	212	214	216	218
12										3768	3792
18											
24	9552	9640	9744	9840	9936	10032	10128	10224	10320	10416	10512

Para entender la hoja de cálculo presentada partida en 4 por razones de espacio, baste considerar las siguientes zonas:

- Zona en sombra intermedia:** son los nanotubos que podemos estudiar, tienen menos de 9,000 elementos y su longitud es igual o mayor que su diámetro, es decir, tienen disposiciones de tubos cilíndricos y no de anillos.
- Zona en sombra clara:** son aquellos nanotubos que, aunque tienen menos de 9,000 elementos, su diámetro es mayor que su longitud. Son más bien anillos que tubos cilíndricos.
- Zona sin formato:** son todos los nanotubos que se pueden formar con más de 9,000 elementos.
- Nanotubos marcados con sombra y recuadro:** son aquellos que marcan el límite en longitud, que podemos estudiar, de cada tipo según su diámetro.
- Nanotubos marcados con cuadro oscuro:** muestreados; es decir, de los cuales se realizó la simulación y se calculó la polarización de cada uno de sus elementos.

En el cálculo de la polarización de los elementos de cada nanotubo se estableció como condición inicial un campo eléctrico constante de magnitud unitaria en cada dirección perpendicular; es decir, $E = (E_x, E_y, E_z) = (1, 1, 1)$ [dinas/Coulomb]. Esta elección se realizó con la finalidad de encontrar los comportamientos de polarización general de los nanotubos y se supone también inicialmente que la polarización crece con el campo, en un factor lineal α , identificado como polarizabilidad, que cuando se desea medir para átomos individuales, se tiene como función del campo eléctrico, $\alpha(E)$; y que en este caso suponemos es la misma para todos los átomos de carbono presentes en los nanotubos.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Por lo general, la polarizabilidad eléctrica se toma como una constante asociada a los diferentes materiales por unidad de volumen como lo establece la ecuación de Clausius-Mosotti:

$$\alpha = \frac{3\epsilon_0(K-1)}{N(K+2)} \quad (1)$$

donde $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2 = 8.85 \times 10^{-21} \text{ C}^2/\text{dinas cm}^2$; la constante dieléctrica K la tomamos de prueba con el valor que le corresponde al Benceno, C_6 ; $K=2.3$ sin unidades; y N un número de partículas por unidad de volumen.

El valor así encontrado debe coincidir con el encontrado anteriormente para el cálculo de la polarizabilidad deducida en la ecuación (18) del Capítulo 2:

$$\alpha = 4\pi\epsilon_0 R_0^3 \quad (2)$$

donde R_0 es el radio atómico, que para el carbono hemos tomado igual al radio iónico como 0.077 nm.

En esta tesis se exploran dos valores distintos –difieren en un orden de magnitud– de la parte real y compleja de la polarizabilidad $\alpha = 2.3 \times 10^{-44} + i 2.3 \times 10^{-45}$ (expresando la polarización molecular y el campo eléctrico en sistema de unidades cgs) y que garantizan la pronta convergencia de las series numéricas de aproximación a los valores límites de las componentes del vector de polarización para cada elemento de los nanotubos simulados.

Además, sin pérdida de generalidad se ha supuesto que los ejes longitudinales de los nanotubos se encuentran orientados según la dirección que marca el eje X.

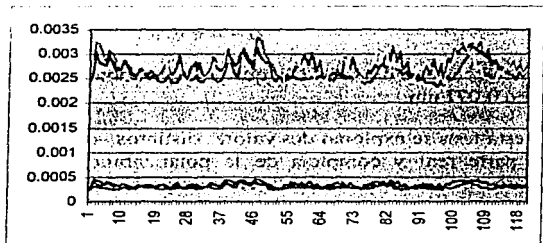
Muestreo de Datos

Para el análisis de la propiedad de polarización primero se hace un estudio comparativo en los nanotubos rectos Q0 (sin quiralidad) de diferentes tamaños. A continuación se presentan las gráficas obtenidas con los datos de la polarización de los átomos presentes en cada nanotubo en respuesta al campo eléctrico externo con componentes en las tres direcciones perpendiculares de magnitud uno; es decir el campo $E = (1, 1, 1)$ [dinam/Coulomb], como ya ha habido mencionado antes.

Nanotubos con 12 Hexágonos por Anillo (12,0)

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

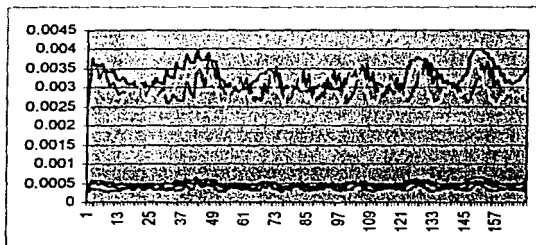
Número de Anillos = 4
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 1 nm
ELEMENTOS = 120



En esta, y en las siguientes gráficas, las series representan los valores de la polarización. $P_{10i} = P_{10i} + i P_{10i}$; las 3 series de la parte superior son las componentes (P_{xi} , P_{yi} , P_{zi}) reales de la polarización y las 3 series de la parte inferior corresponden a las componentes de la parte imaginaria (P_{xi} , P_{yi} , P_{zi}).

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Número de Anillos = 6
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 1.46 nm
ELEMENTOS = 168

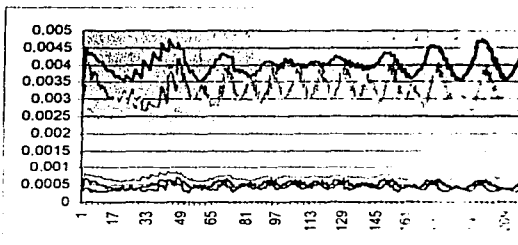


Obsérvese que las componentes de la polarización que se mostraban desordenadas empiezan a presentar un patrón oscilante.

Los átomos de cada nanotubo están numerados a partir de un extremo y siguiendo una trayectoria circular que sigue los anillos y cambia al siguiente cuando se ha terminado de numerar los elementos de cada anillo.

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

**Número de Anillos = 8
Diámetro = 0,53 nm
Longitud = 1,93 nm
ELEMENTOS = 216**

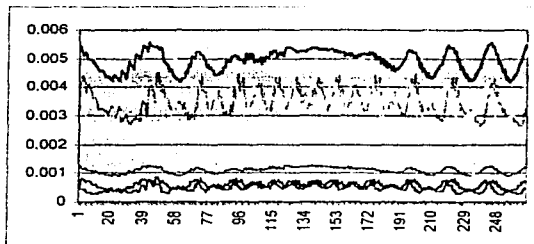


Cuando la longitud del anillo es casi cuatro veces su diámetro, la estructura va es un tubo "cilíndrico" y tanto la componente real como la imaginaria del vector de polarización son mayores en la dirección longitudinal.

Este comportamiento se va asentando a medida que el nanotubo aumenta en longitud como se verá a continuación.

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

**Número de Anillos = 10
Diámetro = 0,53 nm
Longitud = 2,39 nm
ELEMENTOS = 264**

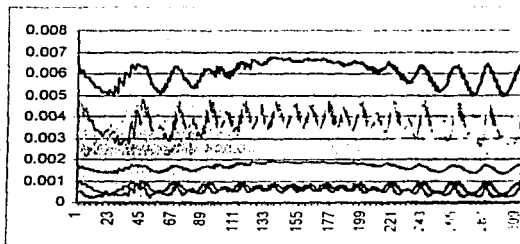


Aquí se han separado las magnitudes de las componentes del vector de polarización en la dirección longitudinal que corresponde con el eje X.

Se observa también que en el centro del nanotubo la distribución en la magnitud X del vector de polarización es más uniforme que hacia los extremos.

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

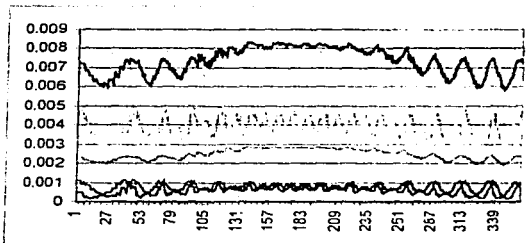
**Número de Anillos = 12
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 2.85 nm
ELEMENTOS = 312**



Las componentes del vector de polarización en las direcciones Y y Z perpendiculares al eje del nanotubo adquieren un patrón simétrico.

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

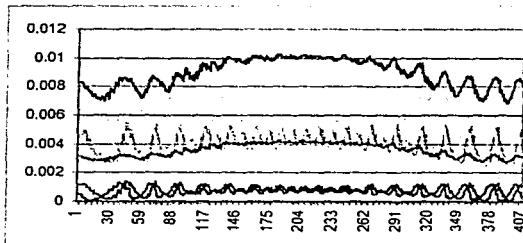
**Número de Anillos = 14
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 3.31 nm
ELEMENTOS = 360**



Aquí se ve claramente como la componente imaginaria de la polarización emerge sobreponiéndose a las componentes reales perpendiculares al eje del nanotubo, aún cuando se ha elegido un orden de magnitud por debajo en la polarizabilidad.

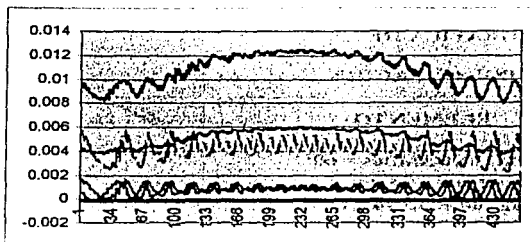
**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

**Número de Anillos = 16
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 3.77 nm
ELEMENTOS = 408**



**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

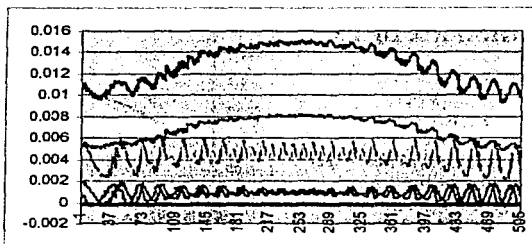
**Número de Anillos = 18
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 4.24 nm
ELEMENTOS = 456**



Las componentes del vector de polarización en la dirección del eje del nanotubo se refuerzan a medida que el tubo se alarga y la magnitud de las componentes perpendiculares se hacen cada vez más pequeñas en comparación.

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

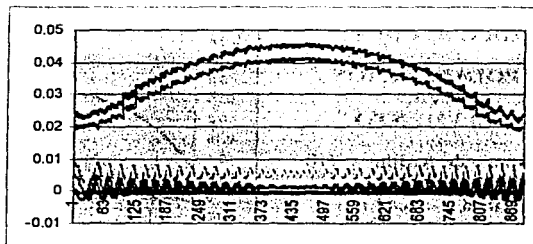
**Número de Anillos = 20
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 4.70 nm
ELEMENTOS = 504**



El arreglo de polarización en la estructura empieza a distinguirse característicamente. En nanotubo se ha polarizado en su dirección longitudinal.

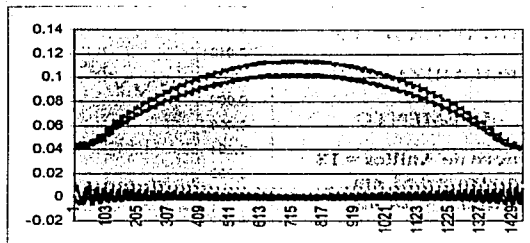
**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

**Número de Anillos = 36
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 8.39 nm
ELEMENTOS = 888**



**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

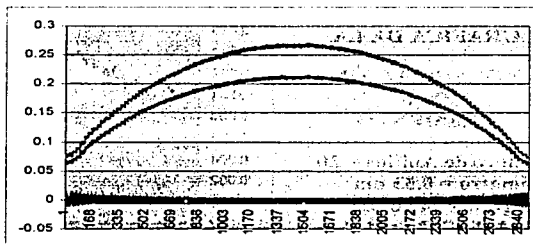
**Número de Anillos = 60
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 13.94 nm
ELEMENTOS = 1464**



La componente imaginaria ha rebasado a la componente real. Ahora el patrón característico se acentúa, y los remanentes perpendiculares se reducen hasta casi cero, permaneciendo como ruido y presentando pequeños efectos de borde.

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

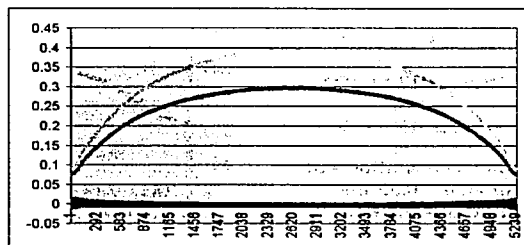
**Número de Anillos = 120
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 27.80 nm
ELEMENTOS = 2904**



El patrón de polarización queda bien definido en la dirección en la que se extiende el nanotubo. Este efecto se refuerza cada vez más a medida que aumenta la longitud.

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

**Número de Anillos = 218
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 50.44 nm
ELEMENTOS = 5256**



El nanotubo se ha convertido en un "cable" polarizado.

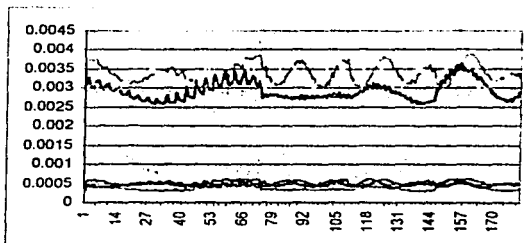
Este mismo comportamiento lo podemos ver en todos los nanotubos; el que, a medida que se extiende el nanotubo y su longitud se hace cada vez más grande con respecto del diámetro del tubo, las componentes de polarización se refuerzan en la dirección del eje del tubo, desapareciendo prácticamente las componentes perpendiculares.

A continuación se presentan las gráficas correspondientes a nanotubos con diferentes diámetros. Las secuencias se han abreviado debido a que todas muestran el mismo comportamiento y lo único que cambia son las magnitudes.

Nanotubos con 18 Hexágonos por Anillo (18,0)

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

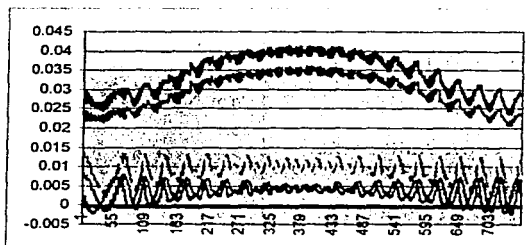
Número de Anillos = 4
Diámetro = 0,78 nm
Longitud = 1 nm
ELEMENTOS = 180



Nuevamente, las componentes de polarización se encuentran desordenadas cuando las dimensiones de la estructura no definen con claridad al tubo y parece más bien sólo un anillo. Así que, las componentes perpendiculares al eje tienden a formar un "circuito" con el vector de polarización.

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

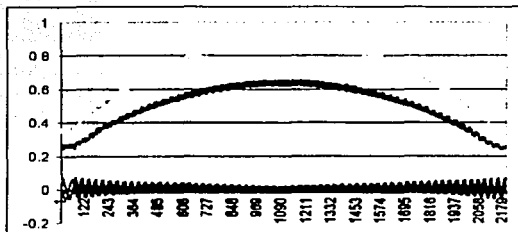
Número de Anillos = 20
Diámetro = 0,78 nm
Longitud = 4,7 nm
ELEMENTOS = 756



El sistema define un patrón de polarización en la dirección longitudinal.

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

Número de Anillos = 60
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 13.94 nm
ELEMENTOS = 2196

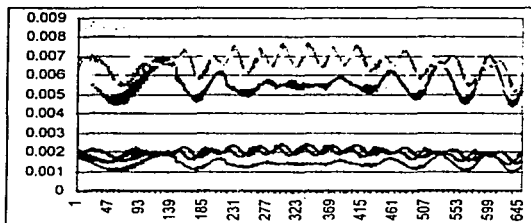


La polarización en el tubo se ha reforzado en la dirección longitudinal y la componente imaginaria predomina.

Nanotubos con 36 Hexágonos por Anillo (36,0)

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

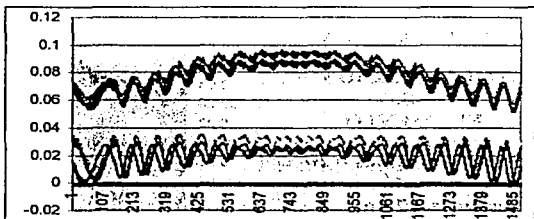
Número de Anillos = 8
Diámetro = 1.54 nm
Longitud = 1.93 nm
ELEMENTOS = 648



Cuando el nanotubo es más grueso que largo, las componentes de la polarización perpendiculares a su eje tienen mayor magnitud.

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

Número de Anillos = 20
Diámetro = 1.54 nm
Longitud = 4.70 nm
ELEMENTOS = 1512

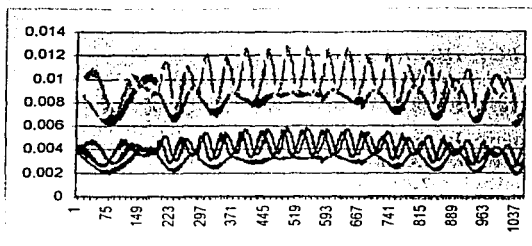


¡La componente de absorción ha rebasado a la componente real de polarización!

Nanotubos con 48 Hexágonos por Anillo (48,0)

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

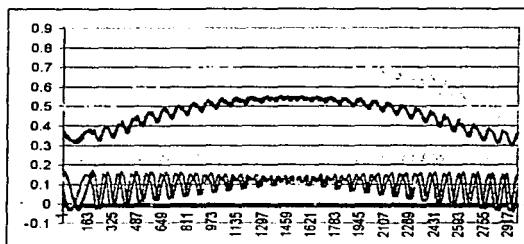
Número de Anillos = 10
Diámetro = 2.05 nm
Longitud = 2.39 nm
ELEMENTOS = 1056



A medida que el nanotubo aumenta de grosor se definen mejor las componentes perpendiculares inicialmente desordenadas.

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

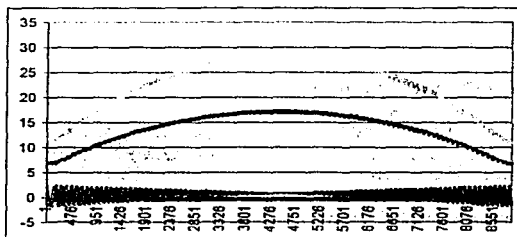
Número de Anillos = 30
Diámetro = 2.05 nm
Longitud = 7.1 nm
ELEMENTOS = 2976



Con el alargamiento se define la dirección de polarización del nanotubo.

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Número de Anillos = 92
Diámetro = 2.05 nm
Longitud = 21.33 nm
ELEMENTOS = 8928

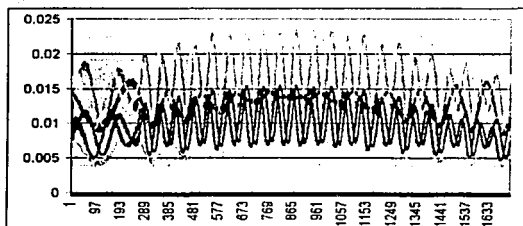


El patrón, cada vez más nítido, se refuerza en función del alargamiento.

Nanotubos con 66 Hexágonos por Anillo (66,0)

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Número de Anillos = 12
Diámetro = 2.81 nm
Longitud = 2.85 nm
ELEMENTOS = 1716

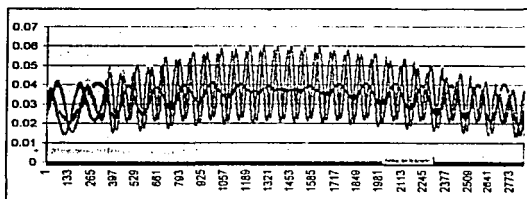


A medida que aumenta el número de hexágonos por anillo, y con ello el diámetro, las componentes de polarización perpendiculares al eje se hacen cada vez más notables.

Nanotubos con 84 Hexágonos por Anillo (84,0)

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

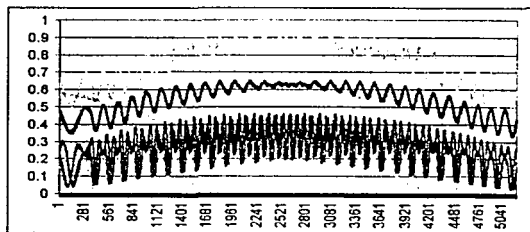
Número de Anillos = 16
Diámetro = 3.57 nm
Longitud = 3.77 nm
ELEMENTOS = 2856



Y aunque se definen mejor las componentes perpendiculares de la polarización

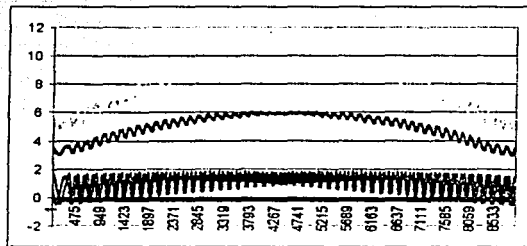
GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Número de Anillos = 30
Diámetro = 3.57 nm
Longitud = 7.01 nm
ELEMENTOS = 5208



**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

Número de Anillos = 52
Diámetro = 3.57 nm
Longitud = 12.09 nm
ELEMENTOS = 8904

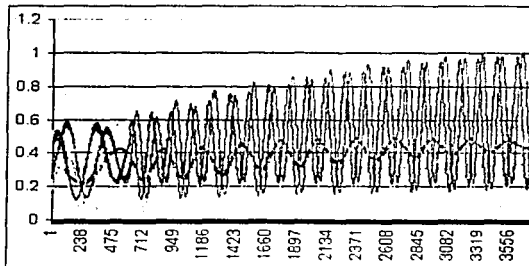


a medida que crece la longitud del nanotubo en proporción al diámetro o grosor, la propiedad de polarización emerge aumentando la componente longitudinal y nullificando las componentes perpendiculares.

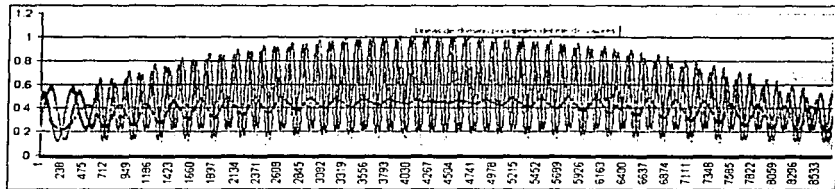
Nanotubos con 150 Hexágonos por Anillo (150,0)

**GRÁFICA DE LA
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

Número de Anillos = 28
Diámetro = 6.38 nm
Longitud = 6.55 nm
ELEMENTOS = 8700



Cuando el nanotubo tiene la forma de un anillo se define un patrón claro para las componentes perpendiculares al eje longitudinal.



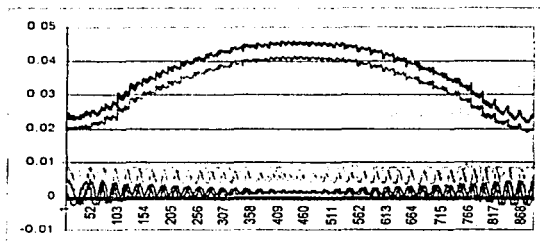
Con el anterior muestreo de datos realizado, se tienen las condiciones adecuadas para seleccionar nanotubos apropiados para hacer la comparación de sus propiedades de polarización según el factor de quiralidad.

Podemos estudiar mejor los nanotubos largos y de menor diámetro (debido a la limitante a 9,000 elementos) en que tenemos un muestreo de datos más amplio.

Por ejemplo, el nanotubo (12,0) con 12 hexágonos por anillo y 36 anillos posee las características básicas de un nanotubo cuya propiedad de polarización lo diferencia.

GRÁFICA DE LA POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Número de Anillos = 36
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 8.39 nm
ELEMENTOS = 888



Aplicando el programa de cálculo numérico a las variantes quirales de este nanotubo se tienen los siguientes:

Resultados Obtenidos

Además de que, mientras más largo sea un nanotubo, más se polariza en presencia de un campo eléctrico. Para nanotubos con igual número de elementos o átomos se encuentra fácilmente que su capacidad de polarización se ve modificada (casi siempre aumenta) de manera significativa con la quiralidad o torsión.

Esto significa que existe una propiedad de polarización de los nanotubos en general, que depende de la cantidad de elementos que conformen el nanotubo y también de su disposición quiral.

Es importante remarcar que esta capacidad de polarización es una propiedad que sólo existe en esta escala nanoscópica, dado que si los tubos pertenecieran a una escala mayor, digamos a la de las micras, la separación entre algunos átomos de la estructura sería tan grande que el campo eléctrico local molecular sólo se debería al efecto de los elementos más cercanos y no a la suma de todas las interacciones.

Comparación Quiral

Para el análisis comparativo de la polarización según el factor de quiralidad se calculó la polarización de los siguientes tipos de nanotubos:

Hexágonos por Anillo	Diámetro del Nanotubo	NÚMERO DE ÁTOMOS, Longitud, Número De Anillos, SUPERFICIE DEL NANOTUBO, L/D		
		888	1464	2904
12	0.53 nm	8.39 nm, 36 A 13.97 nm ² , 15.8	13.94 nm, 60 A 23.21 nm ² , 26.3	27.80 nm, 120 A 46.29 nm ² , 52.45
18	0.78 nm	1836 11.63 nm, 50 A 28.50 nm ² , 14.91	3636 23.18 nm, 100 A 56.80 nm ² , 29.27	5436 34.73 nm, 150 A 68.12 nm ² , 44.52
24	1.03 nm	3120 14.86 nm, 64 A 48.08 nm ² , 14.42	5808 27.80 nm, 120 A 89.96 nm ² , 26.99	8688 41.66 nm, 180 A 134.81 nm ² , 40.44

La tabla muestra los datos asociados a cada uno de los 9 nanotubos seleccionados mediante el muestreo. Cada nanotubo se caracteriza por el número de hexágonos que se encuentran por vuelta, el diámetro de la misma, su longitud y número de átomos componentes y adicionalmente se puede asociar a cada nanotubo la superficie ($\pi \cdot \text{diámetro} \cdot \text{largo} [\text{nm}^2]$) del cilindro mínimo que lo contiene y una cantidad adimensional longitud/diámetro o simplemente L/D, para caracterizar sus proporciones cilíndricas. Así se puede decir de un nanotubo que es largo cuando su longitud es mucho mayor que su diámetro, y cuando su longitud es comparable con su diámetro se tiene un nanotubo corto o tipo "anillo".

Para cada una de estas 9 combinaciones de nanotubos se hace la comparación de la polarización respecto de cinco factores de quiralidad.

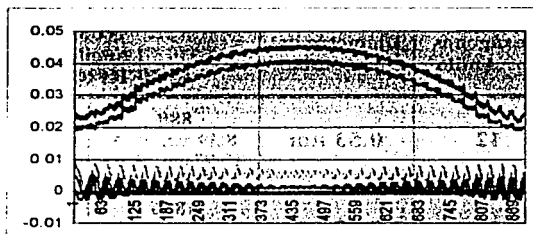
También se puede tomar el promedio de polarización por unidad de superficie. Que difiere del promedio solo en una constante ya que la densidad de los nanotubos no cambia. La superficie de los nanotubos quirales es la misma que la de los nanotubos rectos ya que se considera una malla con el mismo número de vértices en cada caso. Con la quiralidad lo único que cambia es la manera de enrollarla; y aún que se tienen efectos de borde, que en los cálculos nos han obligado a recortar las "puntas salientes", son suficientemente pequeños como para no tomarlos en cuenta en el cálculo de las superficies de los nanotubos quirales.

Nanotubos con 12 Hexágonos por Anillo y 888 Elementos

Para el caso del nanotubo con 12 hexágonos por anillo se obtuvieron los siguientes resultados, partiendo de una longitud en la que se define la propiedad de polarización en la dirección del eje.

QUIRALIDAD 0 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

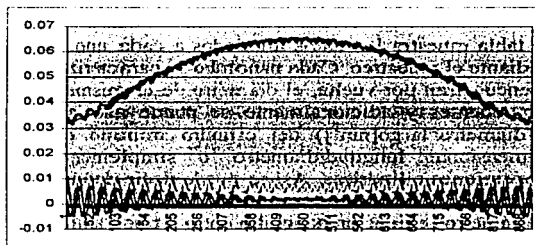
Nanotubo (12, 0)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 8.39 nm
ELEMENTOS = 888



Desde el primer nivel de torsión se advierte el cambio en la magnitud de la polarización.

QUIRALIDAD 1 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

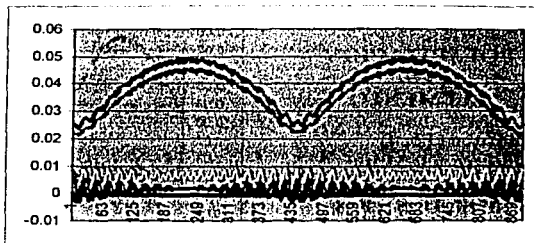
Nanotubo (12, 1)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 8.39 nm
ELEMENTOS = 888



Las dos crestas en la gráfica de la polarización del nanotubo Q2 sólo muestran el orden en que fueron numerados los elementos (primero una cinta espiral que deja un hueco y luego la segunda que lo llena para lograr el factor 2 de quiralidad).

QUIRALIDAD 2
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

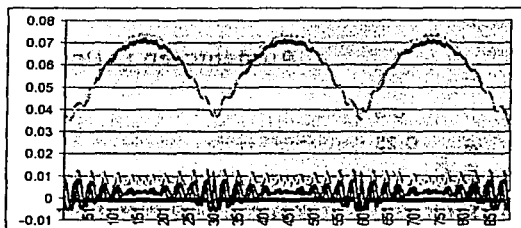
Nanotubo (12, 2)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 8.39 nm
ELEMENTOS = 888



En realidad lo importante de la gráfica es la altura promedio de todos sus elementos; en este caso es menor que el anterior y casi como (12,0)/888.

QUIRALIDAD 3
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (12, 3)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 8.39 nm
ELEMENTOS = 888



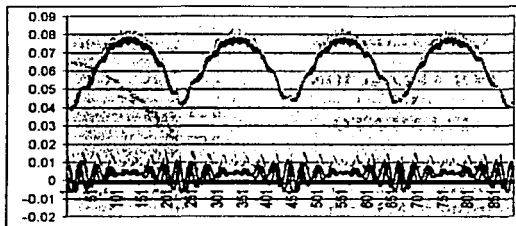
El nanotubo de quiralidad 3 fue generado con un algoritmo de "tres cintas" por ello exhibe 3 crestas. Se podían haber acomodado los elementos, intercalados de tres en tres, con lo que se vería la misma forma que en la gráfica (12, 0)/888, Aunque con mayor amplitud o valor promedio de polarización.

Lo importante es su altura, en este caso es muy notorio el aumento en la polarización promedio y de cada uno de los elementos presentes en el nanotubo.

El efecto se debe sin duda a que al torcer el nanotubo, los átomos de carbono se acercan aún más entre sí elevando la intensidad de las fuerzas con que interaccionan, ya que estas fuerzas son eléctricas y aumentan como el inverso del cubo de la distancia por tratarse de dipolos.

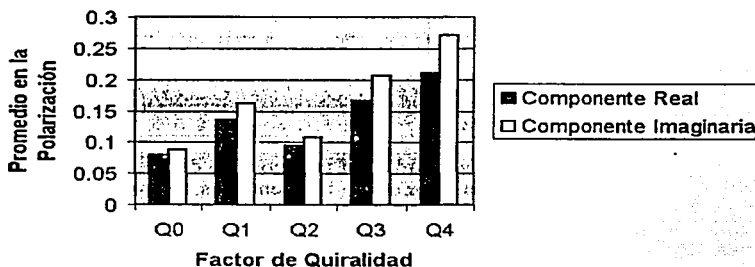
QUIRALIDAD 4
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (12, 4)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 8.39 nm
ELEMENTOS = 888



El nanotubo con quiralidad Q4 tiene una mayor polarización en cada uno de sus elementos, sobre todo al centro del tubo. (Aunque la gráfica muestra 4 crestas, esto se debe a que el nanotubo Q4 es generado con un algoritmo con base en 4 cintas espirales).

Aumento en la Polarización



Como la superficie de los nanotubos (12, m)/888, $m = 0, 1, 2, 3, 4$, ha sido la misma, ésta es una constante, de modo que las gráficas de polarización promedio y de polarización promedio por unidad de superficie son iguales y solo difieren por una constante.

Al final del análisis se presenta una gráfica con información relacionada con la manera en que este factor cambia con respecto del número de átomos que conforman los nanotubos de carbono.

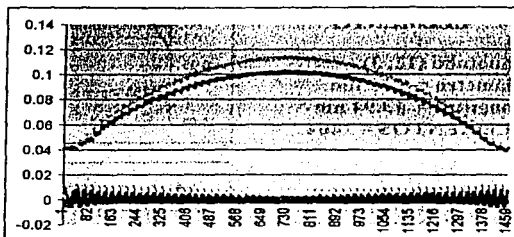
Nanotubos con 12 Hexágonos por Anillo y 1464 Elementos

La respuesta de un nanotubo más largo aún está mejor definida:

QUIRALIDAD 0

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

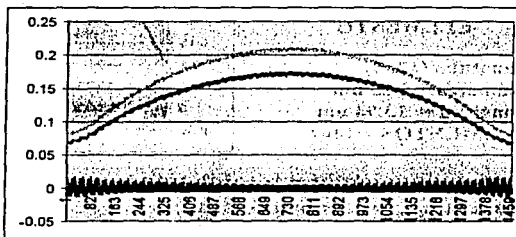
Nanotubo (12, 0)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 13.94 nm
ELEMENTOS = 1464



QUIRALIDAD 1

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

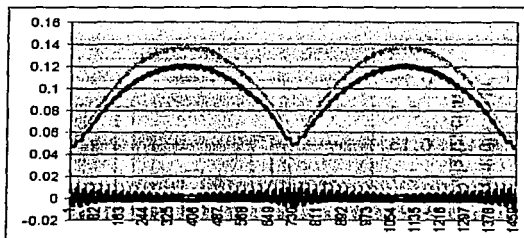
Nanotubo (12, 1)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 13.94 nm
ELEMENTOS = 1464



QUIRALIDAD 2

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

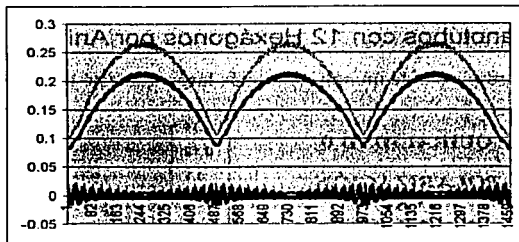
Nanotubo (12, 2)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 13.94 nm
ELEMENTOS = 1464



Nuevamente la polarización promedio baja con el factor de quiralidad Q2.

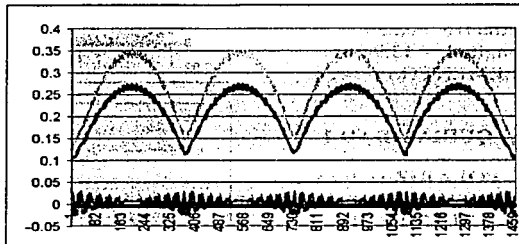
QUIRALIDAD 3
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (12, 3)
 Diámetro = 0.53 nm
 Longitud = 13.94 nm
 ELEMENTOS = 1464



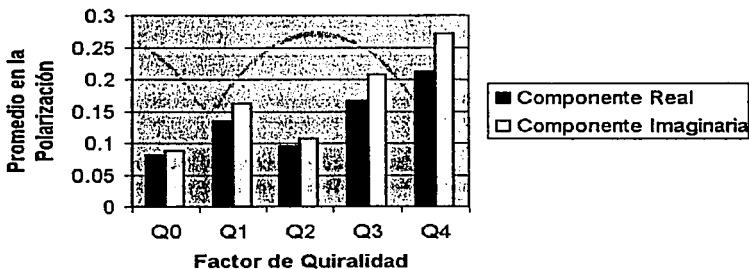
QUIRALIDAD 4
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (12, 4)
 Diámetro = 0.53 nm
 Longitud = 13.94 nm
 ELEMENTOS = 1464



Finalmente, con el factor de quiralidad 4 la polarización promedio aumenta.

Aumento en la Polarización



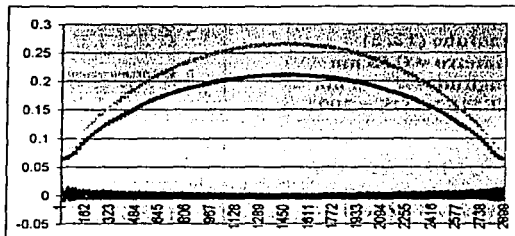
Nanotubos con 12 Hexágonos por Anillo y 2904 Elementos

Como en los casos anteriores se observa el aumento del promedio de polarización con el factor de quiralidad.

QUIRALIDAD 0

**POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

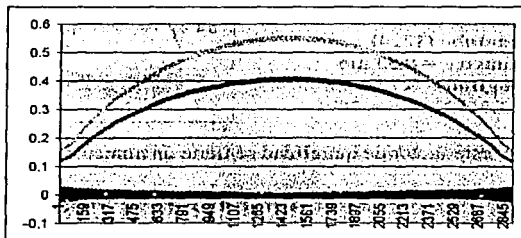
Nanotubo (12, 0)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 27.80 nm
ELEMENTOS = 2904



QUIRALIDAD 1

**POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

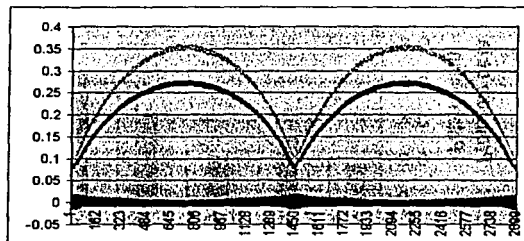
Nanotubo (12, 1)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 27.80 nm
ELEMENTOS = 2094



QUIRALIDAD 2

**POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

Nanotubo (12, 2)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 27.80 nm
ELEMENTOS = 2094

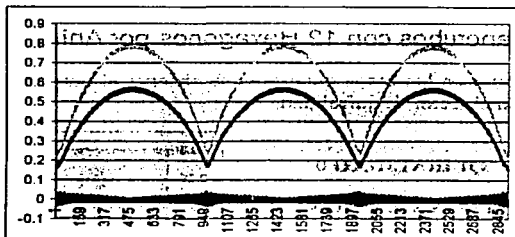


Nuevamente el factor de quiralidad Q2 desfavorece a la polarización.

QUIRALIDAD 3

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

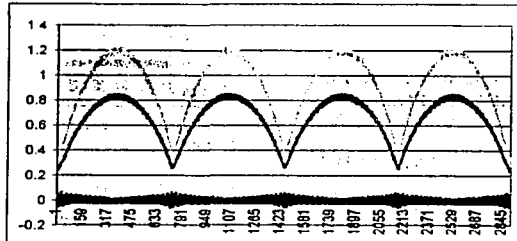
Nanotubo (12, 3)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 27.80 nm
ELEMENTOS = 2094



QUIRALIDAD 4

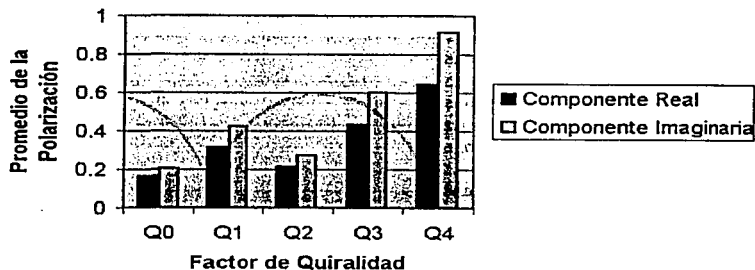
POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (12, 4)
Diámetro = 0.53 nm
Longitud = 27.80 nm
ELEMENTOS = 2094



Con este factor de quiralidad se tiene un aumento considerable en la polarización.

Aumento en la Polarización



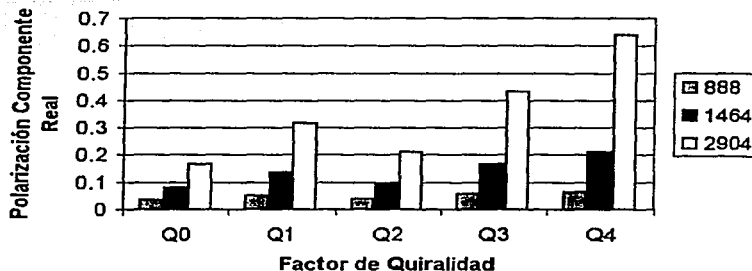
La respuesta de los nanotubos (12, m) de 12 hexágonos por anillo; es decir, de 0.53 nm de diámetro, es muy consistente en los diferentes casos.

Por tanto, en promedio la polarización de estos nanotubos de 12 hexágonos por anillo (0.53 nm de diámetro) que varían sólo en quiralidad, y mantienen el mismo diámetro y prácticamente la misma longitud es:

PROMEDIOS	Número de Elementos o Átomos					
	888		1464		2904	
	Re	Im	Re	Im	Re	Im
Q0	0.036515	0.032406	0.080203	0.087879	0.165037	0.204757
Q1	0.052599	0.052066	0.134825	0.162312	0.315213	0.423338
Q2	0.039486	0.035972	0.094518	0.107032	0.211380	0.271128
Q3	0.057864	0.058770	0.166122	0.206406	0.432744	0.599440
Q4	0.063379	0.065778	0.210997	0.270714	0.639431	0.915501

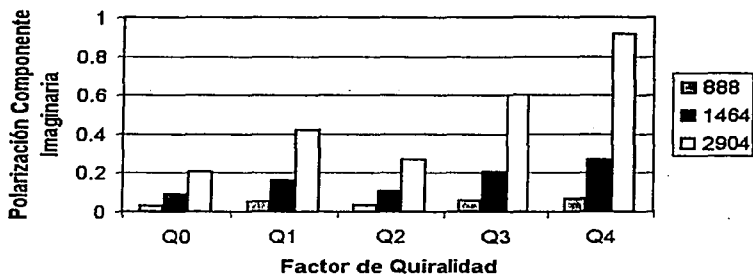
La tabla muestra los promedios de polarización de los elementos en los nanotubos.

Polarización vs. Quiralidad



Comparación de la componente real de la polarización en diferentes nanotubos.

Polarización vs. Quiralidad

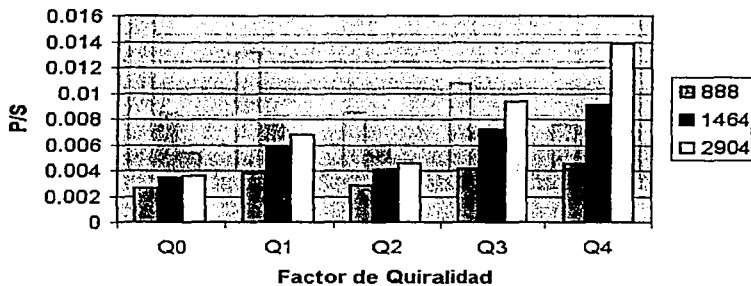


Comparación de la componente compleja de la polarización en diferentes nanotubos de 12 hexágonos por anillo (0.53 nm de diámetro).

Es claro que la longitud determina el aumento en el promedio simple de la polarización en cada uno de los átomos presentes en un nanotubo de carbono.

El caso de la polarización por unidad de superficie mantiene el mismo patrón pero difiere en una constante multiplicativa, que corresponde a la densidad, en átomos de carbono, por unidad de superficie en el cilindro mínimo que contiene al nanotubo; según se observa en la siguiente gráfica de la componente real de la polarización.

Polarización por Unidad de Superficie



Nanotubos con 18 Hexágonos por Anillo y 1836 Elementos

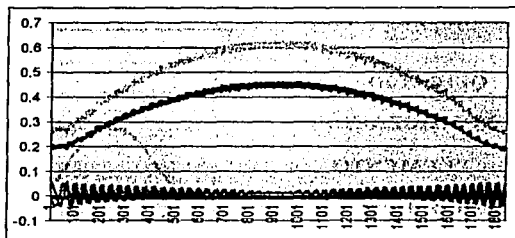
Para el caso del nanotubo con 18 hexágonos por anillo se obtuvieron resultados cualitativamente análogos y cuantitativamente distintos a los encontrados para el caso del nanotubo de 12 hexágonos por anillo; con ello se hace más claro el poder caracterizar a los nanotubos según la magnitud que presenten en la propiedad de polarización encontrada.

Los resultados obtenidos fueron los siguientes:

QUIRALIDAD 0

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

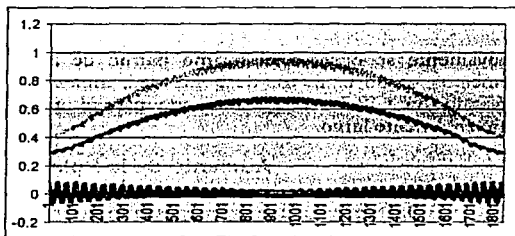
Nanotubo (18, 0)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 11.63 nm
ELEMENTOS = 1836



QUIRALIDAD 1

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

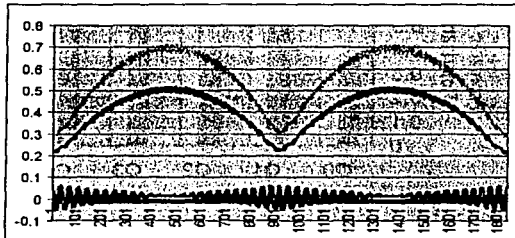
Nanotubo (18, 1)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 11.63 nm
ELEMENTOS = 1836



QUIRALIDAD 2

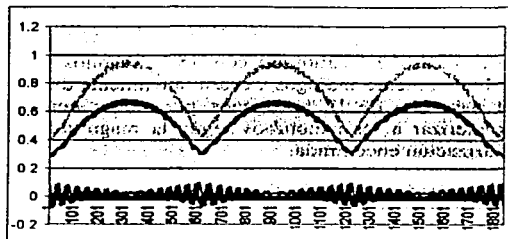
POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (18, 2)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 11.63 nm
ELEMENTOS = 1836



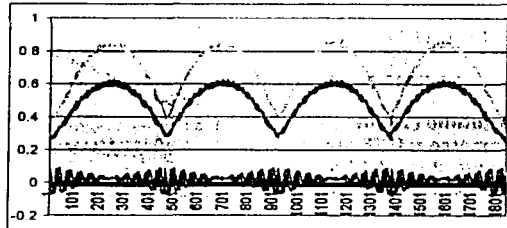
QUIRALIDAD 3
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (18, 3)
 Diámetro = 0.78 nm
 Longitud = 11.63 nm
 ELEMENTOS = 1836



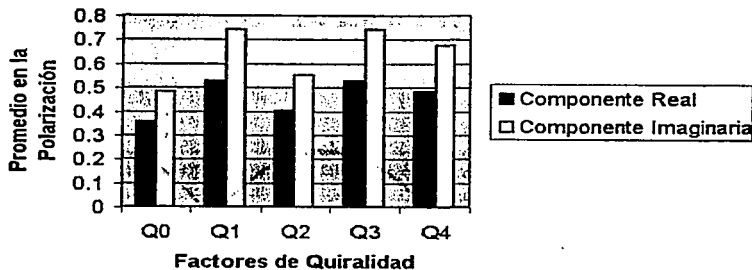
QUIRALIDAD 4
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (18, 4)
 Diámetro = 0.78 nm
 Longitud = 11.63 nm
 ELEMENTOS = 1836



Nuevamente se observa el mismo patrón de aumento de la polarización de los elementos según el factor de quiralidad, aunque en Q4 no se generó el aumento esperado lo cual tal vez se debe a que, para el diámetro elegido, este nanotubo no es suficientemente largo.

Aumento de la Polarización



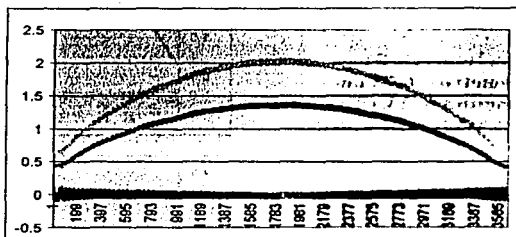
Nanotubos con 18 Hexágonos por Anillo y 3636 Elementos

Cuando los nanotubos son más largo, sus propiedades se definen mejor, así pasa cuando se aumenta el nanotubo de 18 hexágonos por anillo.

QUIRALIDAD 0

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

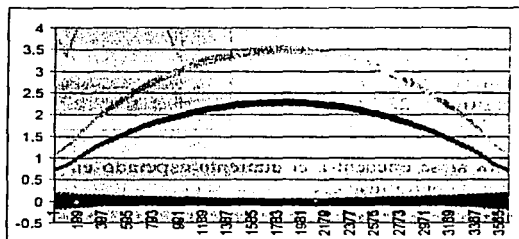
Nanotubo (18, 0)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 23.18 nm
ELEMENTOS = 3636



QUIRALIDAD 1

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

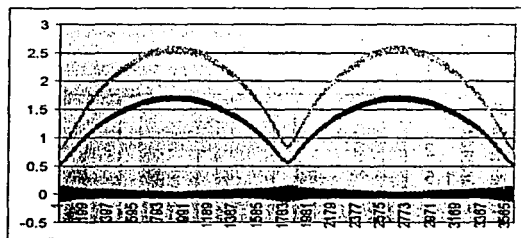
Nanotubo (18, 1)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 23.18 nm
ELEMENTOS = 3636



QUIRALIDAD 2

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (18, 2)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 23.18 nm
ELEMENTOS = 3636

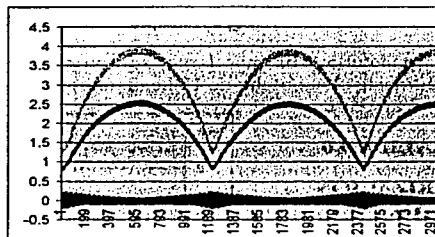


Nuevamente la polarización promedio baja con el factor de quiralidad Q2.

QUIRALIDAD 3

POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

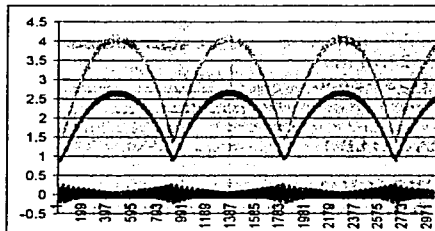
Nanotubo (18, 3)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 23.18 nm
ELEMENTOS = 3636



QUIRALIDAD 4

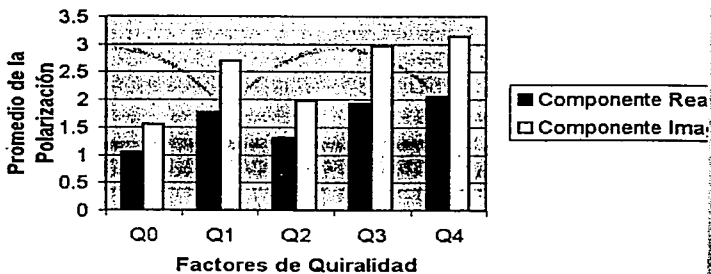
POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (18, 4)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 23.18 nm
ELEMENTOS = 3636



Ahora si se encuentra el aumento esperado en la magnitud de polarización factor de quiralidad Q4.

Aumento de la Polarización

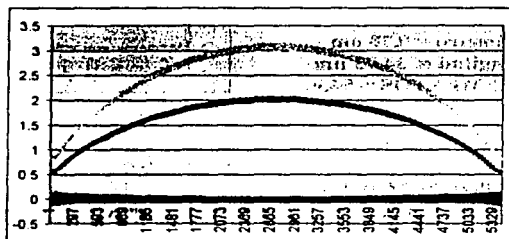


Nanotubos con 18 Hexágonos por Anillo y 5436 Elementos

En los nanotubos de 18 hexágonos por anillo que empiezan a ser largos, el comportamiento de estas estructuras respecto a la propiedad de aumento de la polarización en función de la quiralidad resulta consistente.

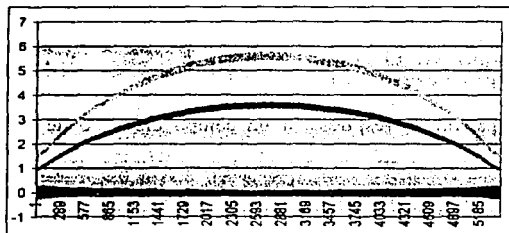
QUIRALIDAD 0 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (18, 0)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 34.73 nm
ELEMENTOS = 5436



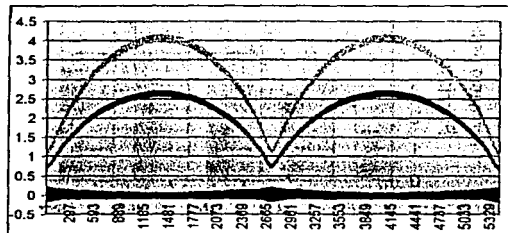
QUIRALIDAD 1 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (18, 1)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 34.73 nm
ELEMENTOS = 5436



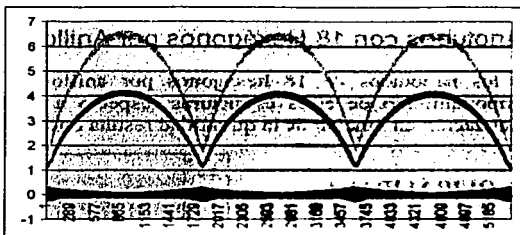
QUIRALIDAD 2 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (18, 2)
Diámetro = 0.78 nm
Longitud = 34.73 nm
ELEMENTOS = 5436



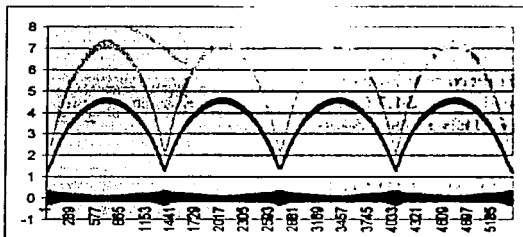
QUIRALIDAD 3
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (18, 3)
 Diámetro = 0.78 nm
 Longitud = 34.73 nm
 ELEMENTOS = 5436



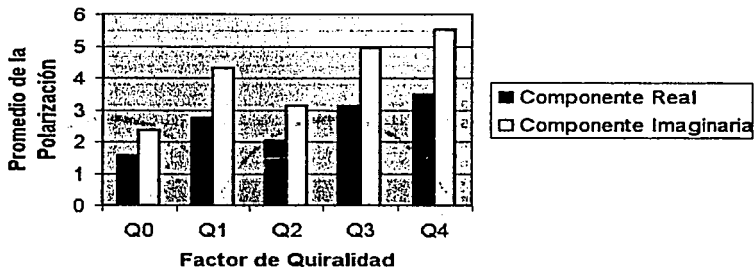
QUIRALIDAD 4
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (18, 4)
 Diámetro = 0.78 nm
 Longitud = 34.73 nm
 ELEMENTOS = 5436



El patrón de respuesta a un campo eléctrico de estas estructuras está claramente definido.

Aumento de la Polarización



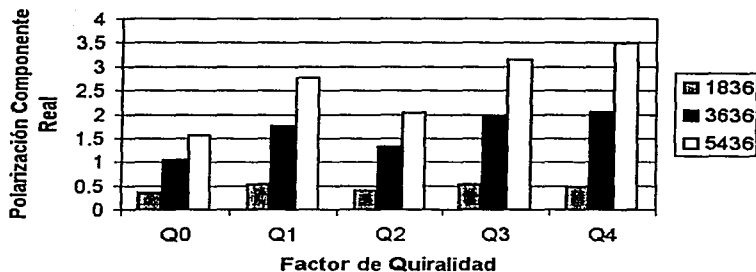
Como en todos los casos anteriores de nanotubos de 12 hexágonos por anillo, de 0.53 nm de diámetro, en los nanotubos de 18 hexágonos por anillo, 0.78 nm de diámetro, los factores de quiralidad generan un incremento en la propiedad de polarización de los elementos constituyentes de estas estructuras de carbono.

Por tanto, en promedio la polarización de estos nanotubos de 18 hexágonos por anillo (0.78 nm de diámetro) que varían sólo en quiralidad, y mantienen el mismo diámetro y prácticamente la misma longitud es:

PROMEDIOS	Número de Elementos o Átomos					
	1836		3636		5436	
Quiralidad	Re	Im	Re	Im	Re	Im
Q0	0.354825	0.481958	1.045378	1.548806	1.558814	2.364689
Q1	0.52582	0.740254	1.762456	2.692137	2.752498	4.297409
Q2	0.400815	0.550959	1.309803	1.967841	2.032179	3.126774
Q3	0.526999	0.742001	1.930890	2.963970	3.136480	4.926083
Q4	0.483001	0.675354	2.042305	3.143208	3.491035	5.508718

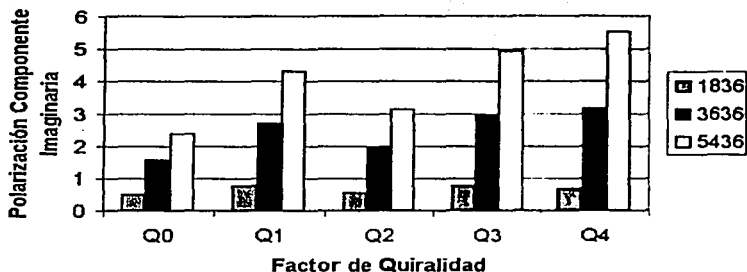
La tabla muestra los promedios de polarización de los elementos en los nanotubos.

Polarización vs. Quiralidad



Comparación de la componente real de la polarización en diferentes nanotubos.

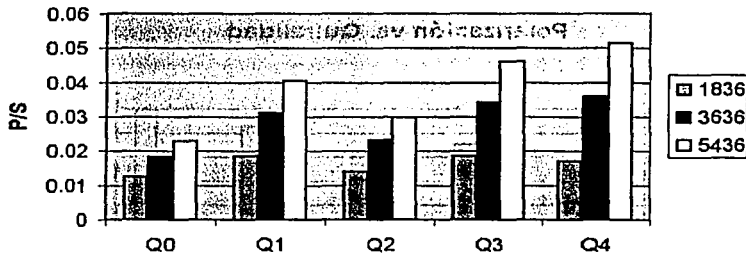
Polarización vs. Quiralidad



Comparación de la componente compleja de la polarización en diferentes nanotubos de 18 hexágonos por anillo (0.78 nm de diámetro).

Como en el caso anterior, la polarización por unidad de superficie difiere únicamente por el factor de densidad, como se aprecia en la siguiente gráfica de la componente real del promedio de la polarización de los átomos en el nanotubo.

Polarización por Unidad de Superficie



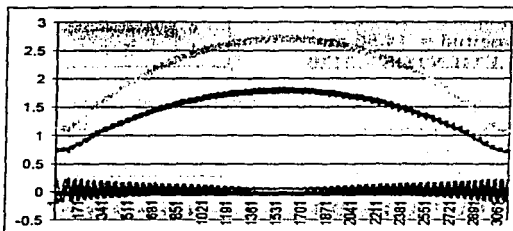
Nanotubos con 24 Hexágonos por Anillo y 3120 Elementos

Para el caso de los nanotubos con 24 hexágonos por anillo se reforzaron los comportamientos observados en los casos anteriores.

Los resultados obtenidos para estos nanotubos fueron los siguientes:

QUIRALIDAD 0 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (24, 0)
Diámetro = 1.03 nm
Longitud = 14.86 nm
ELEMENTOS = 3120

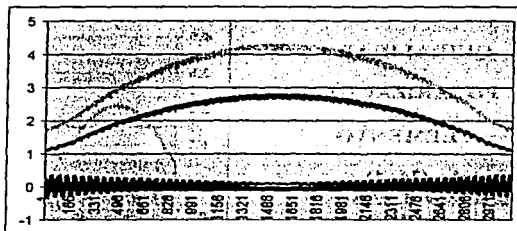


Como estos nanotubos son más grandes, también su valor de polarización inicial es mayor que en los casos para nanotubos con 12 y 18 hexágonos por anillo.

Los nanotubos de más de 3000 elementos muestran la propiedad de polarización bien definida y el comportamiento en función al factor de quiralidad con claridad.

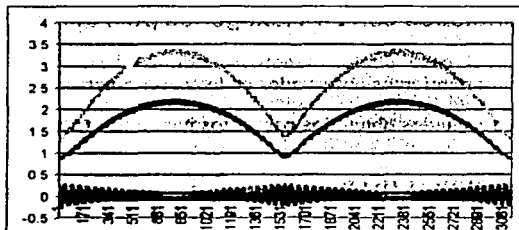
QUIRALIDAD 1 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (24, 1)
Diámetro = 1.03 nm
Longitud = 14.86 nm
ELEMENTOS = 3120



QUIRALIDAD 2
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

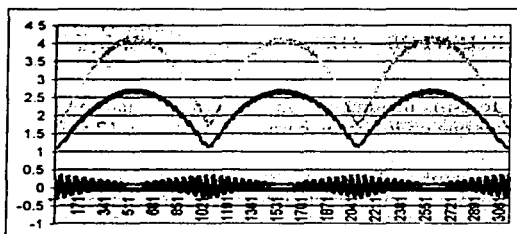
Nanotubo (24, 2)
 Diámetro = 1.03 nm
 Longitud = 14.86 nm
 ELEMENTOS = 3120



Como en todos los casos anteriores el Factor de quiralidad Q2 trae consigo un decremento en el valor de polarización de cada uno de los elementos y también el promedio.

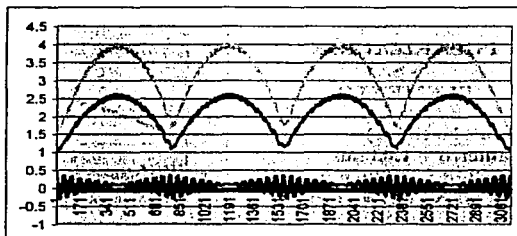
QUIRALIDAD 3
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (24, 3)
 Diámetro = 1.03 nm
 Longitud = 14.86 nm
 ELEMENTOS = 3120



QUIRALIDAD 4
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

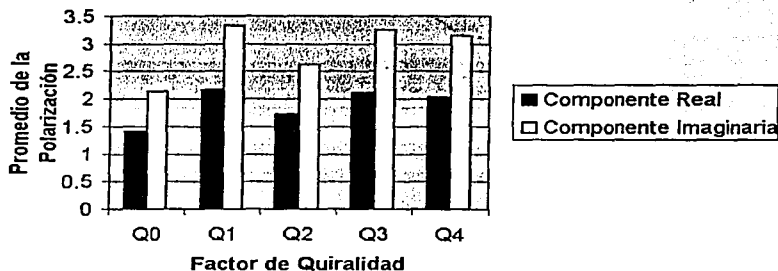
Nanotubo (24, 4)
 Diámetro = 1.03 nm
 Longitud = 14.86 nm
 ELEMENTOS = 3120



Las componentes de la polarización perpendiculares al eje del nanotubo permanecen en valores por debajo de un orden de magnitud con lo que la propiedad se puede considerar unidimensional.

El comportamiento de la polarización respecto del factor de quiralidad se muestra en la siguiente gráfica:

Aumento de la Polarización



En este caso la polarización con factor Q4 es menor que la anterior Q3, lo que puede interpretarse considerando que las proporciones de alto (diámetro) y largo del nanotubo no es suficiente como para definir con nitidez la propiedad de polarización en función de quiralidad estudiada.

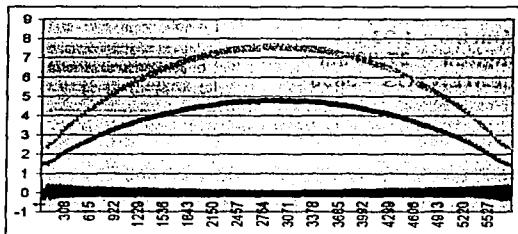
En los siguientes casos se ve como esta propiedad se define mejor con el alargamiento de los nanotubos.

Nanotubos con 24 Hexágonos por Anillo y 5808 Elementos

Los resultados obtenidos en este caso son los siguientes.

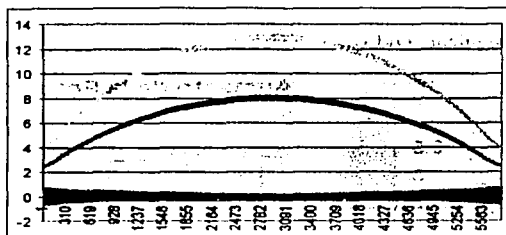
QUIRALIDAD 0 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (24, 0)
Diámetro = 1.03 nm
Longitud = 27.80 nm
ELEMENTOS = 5808



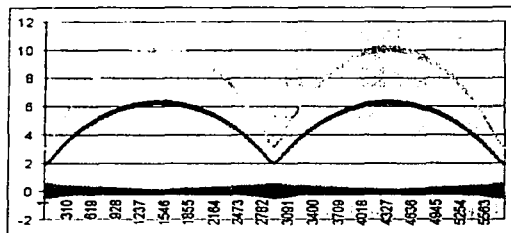
QUIRALIDAD 1
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (24, 1)
 Diámetro = 1.03 nm
 Longitud = 27.80 nm
 ELEMENTOS = 5808



QUIRALIDAD 2
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

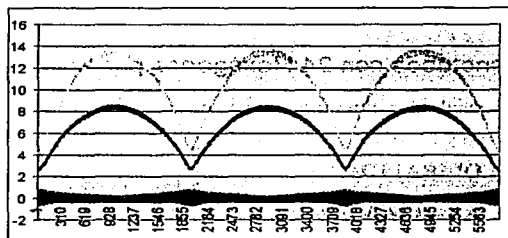
Nanotubo (24, 2)
 Diámetro = 1.03 nm
 Longitud = 27.80 nm
 ELEMENTOS = 5808



Nuevamente la polarización promedio baja con el factor de quiralidad Q2.

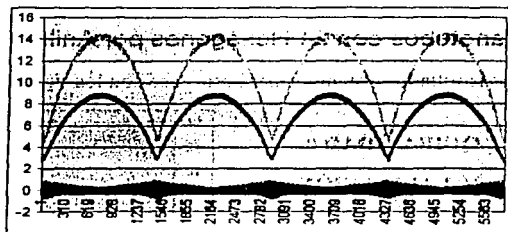
QUIRALIDAD 3
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (24, 3)
 Diámetro = 1.03 nm
 Longitud = 27.80 nm
 ELEMENTOS = 5808



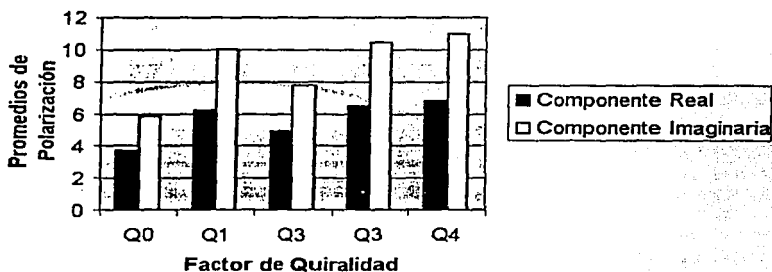
QUIRALIDAD 4
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO

Nanotubo (24, 4)
Diámetro = 1.03 nm
Longitud = 27.80 nm
ELEMENTOS = 5808



Finalmente, con el factor de quiralidad 4 la polarización promedio aumenta.

Aumento de la Polarización

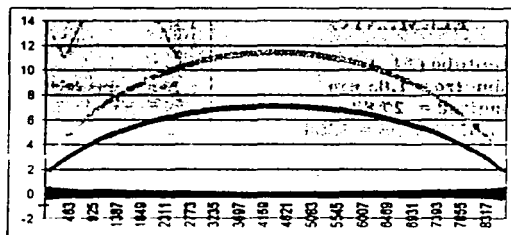


Nanotubos con 24 Hexágonos por Anillo y 8688 Elementos

Los resultados obtenidos para este caso son los siguientes:

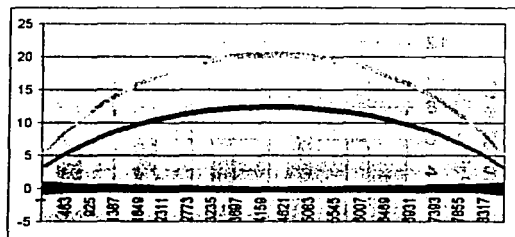
QUIRALIDAD 0 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (24, 0)
Diámetro = 1.03 nm
Longitud = 41.66 nm
ELEMENTOS = 8688



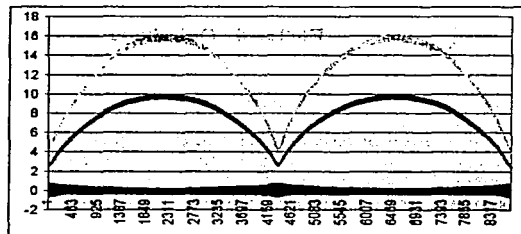
QUIRALIDAD 1 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (24, 1)
Diámetro = 1.03 nm
Longitud = 41.66 nm
ELEMENTOS = 8688



QUIRALIDAD 2 POLARIZACIÓN VS. ELEMENTO

Nanotubo (24, 2)
Diámetro = 1.03 nm
Longitud = 41.66 nm
ELEMENTOS = 8688

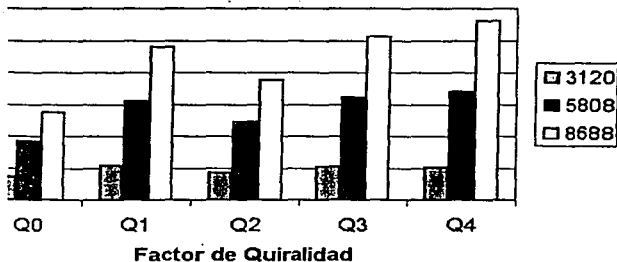


medio la polarización de estos nanotubos de 24 hexágonos por anillo (etno) que varían sólo en quiralidad, y mantienen el mismo diámetro y misma longitud es:

Número de Elementos o Átomos					
3120		5808		8688	
Re	Im	Re	Im	Re	Im
1.409871	2.126320	3.688283	5.832743	5.500364	8.835053
2.153976	3.322769	6.180410	9.971019	9.575752	15.67731
1.715715	2.616065	4.863395	7.777102	7.505367	12.18996
2.106507	3.246201	6.437114	10.40075	10.26335	16.83988
2.039135	3.136834	6.784392	10.98181	11.22979	18.47787

Los promedios de polarización de los elementos en los nanotubos de anillo.

Polarización vs. Quiralidad

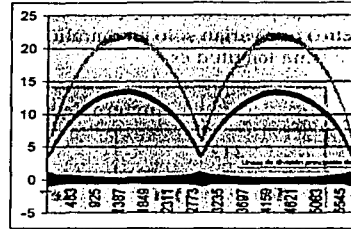


componente real de la polarización en diferentes nanotubos.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

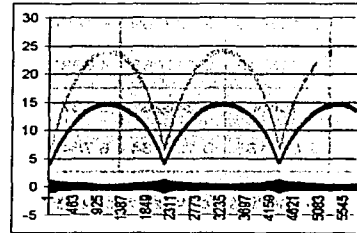
**QUIRALIDAD 3
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

**Nanotubo (24, 3)
Diámetro = 1.03 nm
Longitud = 41.66 nm
ELEMENTOS = 8688**



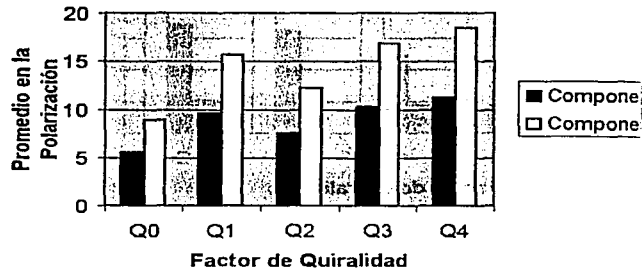
**QUIRALIDAD 4
POLARIZACIÓN
VS.
ELEMENTO**

**Nanotubo (24, 4)
Diámetro = 1.03 nm
Longitud = 41.66 nm
ELEMENTOS = 8688**



La respuesta de los nanotubos de 24 hexágonos por anillo (1.03 nm) muy consistente en los diferentes casos.

Aumento de la Polarización



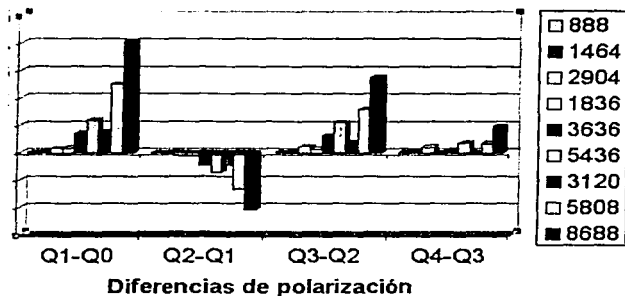
**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

de los datos obtenidos

culo computacional basado en las ecuaciones del electromagnetismo
ado para determinar las propiedad de polarización de las estructuras
uestra con claridad como los nanotubos, que son de tamaños
grandes como para que la teoría electromagnética clásica aplique
frecuada, modifican su respuesta de polarización de manera que
medida de su tamaño y disposición.

ica resume el trabajo realizado mostrando la polarización promedio
:tenecientes a los nanotubos de carbono simulados, y permite ver
ón aumenta a medida que los nanotubos crecen como conjuntos de
n. que mientras más elementos conformen un nanotubo su
mayor.

Aumento de la Polarización



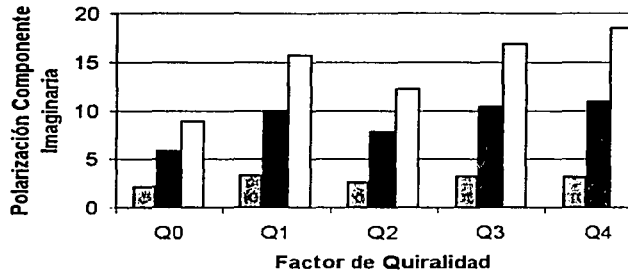
propiedad de polarización principalmente con el primer factor de
iendo con el segundo y estabilizándose con el tercero y cuarto.

riba las series están ordenadas según el diámetro de los nanotubos
pruebas realizadas y lo que se presenta es la diferencia en la
dos disposiciones con factores de quiralidad consecutivos.

datos por el número de elementos presentes en los nanotubos se ve
la siguiente manera:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

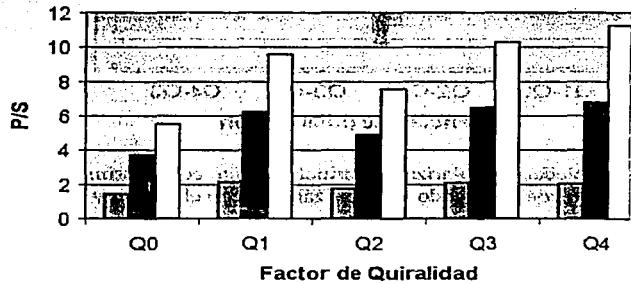
Polarización vs. Quiralidad



Comparación de la componente compleja de la polarización en difracción de 24 hexágonos por anillo (1.03 nm de diámetro).

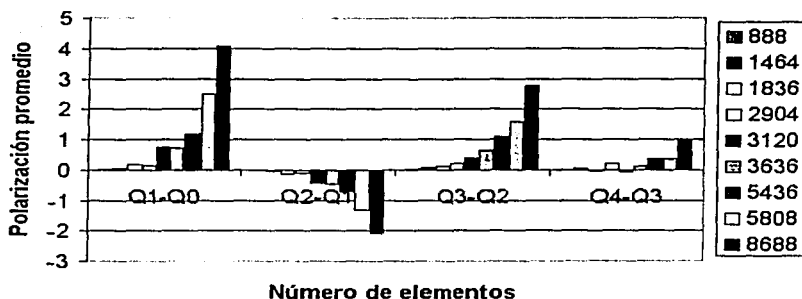
El promedio de la polarización por unidad de superficie muestra un comportamiento, como se ve en la siguiente gráfica de la componente

Polarización por Unidad de Superficie



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Polarización Vs. Tamaño, Quiralidad



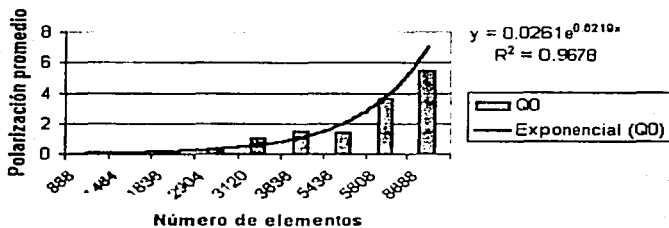
Aquí se muestra con claridad la tendencia a aumentar la polarización sólo con el aumento de elementos constituyentes. Las series representan cada uno de los nanotubos estudiados, que fueron 5 de cada uno de los tres diámetros muestreados, es decir un total de 45.

El nivel de quiralidad Q3 es el que define mejor este aspecto de la propiedad así que podría ser usado para caracterizar y reconocer el tamaño de los nanotubos.

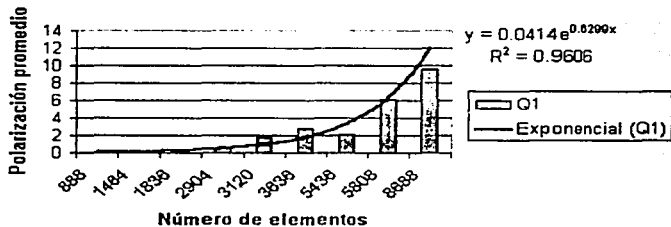
O bien, se puede entender en este punto que hay dos maneras de aumentar la polarización de un nanotubo, una de ellas es con el factor de quiralidad y la otra, aumentando simplemente la longitud del nanotubo. La primera genera un cambio limitado, la segunda es casi ilimitada, en el sentido de que se pueden tener nanotubos muy grandes respecto de los hasta ahora estudiados.

El comportamiento de las tendencias, según el aumento de elementos, de la propiedad de polarización unidimensional de los nanotubos se muestra en la siguiente serie de gráficas:

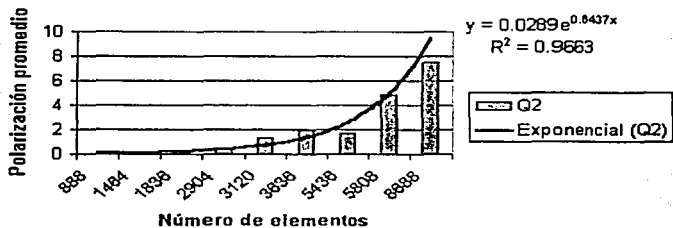
Polarización vs. Número de Elementos Para nanotubos sin Quiralidad



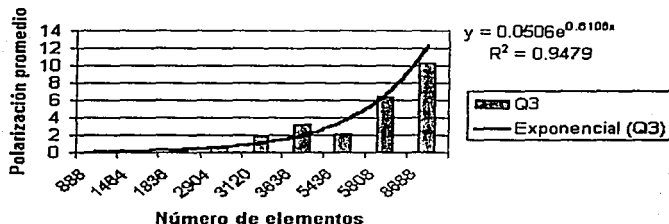
Polarización vs. Número de Elementos Para nanotubos con Quiralidad 1



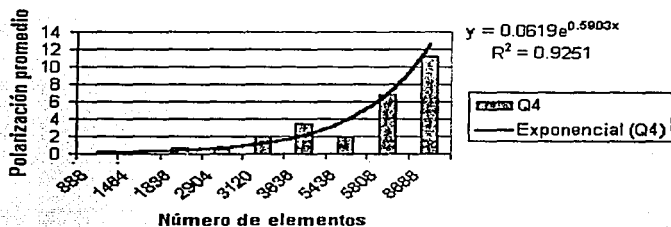
Polarización vs. Número de Elementos Para nanotubos con Quiralidad 2



Polarización vs. Número de Elementos Para nanotubos con Quiralidad 3



Polarización vs. Número de Elementos Para nanotubos con Quiralidad 4

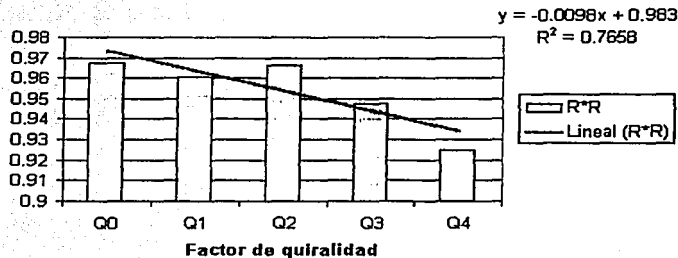


Como se puede apreciar con facilidad²⁵ la respuesta de los nanotubos a los campos eléctricos se comporta de manera muy consistente para los diferentes nanotubos estudiados.

²⁵ En las líneas de tendencia exponencial, Microsoft Excel usa un modelo de regresión transformado.

La desviación en el comportamiento se muestra en la siguiente gráfica que da el cambio en la respuesta de polarización promedio según el factor de quiralidad.

Cambio en la propiedad vs. quiralidad



Como la pendiente es muy pequeña, un poco mayor que nueve milésimas se puede elegir cualquier factor de quiralidad para realizar la caracterización de los nanotubos ya sea según su polarización, ya sea según su longitud y el número de elementos que los conformen.

Esta característica de los nanotubos que tiene un comportamiento unidimensional en la dirección del eje respecto del cual se extienden los nanotubos se ha distinguido en todas las pruebas por su consistencia, lo cual coincide con la simetría de las estructuras estudiadas y emerge con el cambio en las dimensiones asociadas.

Discusión

Hasta aquí el estudio que hemos realizado ha sido posible por la aplicación de un conjunto de programas simuladores que funcionan como graficadores tridimensionales y que tienen el cometido de generar las representaciones de nanotubos rectos y quirales; y de otro programa de cálculo numérico que permite evaluar la polarización de cada uno de los átomos constituyentes de un nanotubo de carbono en respuesta a un campo eléctrico

En el primer caso, en el del grupo de programas simuladores, se ha desarrollado un algoritmo de graficación que puede ser adaptado a cualquier otro código con el objetivo de sacar provecho de un equipo con mayores recursos computacionales y de esa manera generar las representaciones de los nanotubos tomando en cuenta la mayor cantidad de detalles posibles. Lo importante en todos los casos es hacer uso de el algoritmo de graficación que esta basado en cálculos y consideraciones geométricas y que pueden permitir una fácil generación de objetos en tres dimensiones conformados por una estructura de puntos periódica.

Los datos obtenidos de los programas de graficación sólo son conjuntos de coordenadas, donde se hubican los diferentes átomos de los objetos nanoscópicos. Como se obtienen en archivos de texto sin formato (código ASCII) entonces pueden ser leídos por cualquier otro programa y ser usados en cualquier otro tipo de cálculo en donde lo que interese sean las coordenadas de los átomos de los nanotubos. Así que por ejemplo, pueden aplicarse a estos datos ecuaciones mecánicas para calcular deformaciones en los nanotubos y volver a graficarlos ya deformados. También se pueden usar en secuencias gráficas para que muestren cualquier dinámica molecular, como el comportamiento al entrar en contacto con otro objeto similar.

En el segundo caso, tenemos el programa de evaluación numérica que por encontrarse en Visual C ++ puede ser ampliado tanto como se desee para incluir algunos otros posibles cálculos de interés como puede ser el caso del estudio del campo electromagnético en las proximidades o en el interior de los nanotubos.

Al igual que los programas simuladores, los resultados de las corridas de este programa se obtienen en archivos del tipo .TXT, lo que permite su manejo con gran flexibilidad. En particular se ha acoplado la hoja de cálculo de Microsoft Excel para hacer las gráficas de los resultados y practicar sobre los conjuntos de datos cualquier cálculo operacional.

Con estas herramientas computacionales hemos llevado a cabo el estudio de estas singulares estructuras de carbono, los nanotubos.

Hemos usado los programas simuladores para representar un buen número de nanotubos, los hemos ordenado y, con el programa de evaluación numérica, aplicado a las coordenadas de cada uno de sus átomos ecuaciones del electromagnetismo para conocer su respuesta a un campo eléctrico simplemente.

El análisis se ha llevado a cabo por comparación de unos con otros, los quirales respecto de los nanotubos rectos.

En el interés de estudiar los nanotubos de carbón encontramos dos enfoques posibles:

1. Conocer sus propiedades como objetos nanoscópicos.
2. Conocer la aplicación nanotecnológica de alguna de sus características como objetos moleculares.

En esta tesis se ha considerado solo el primer punto, y aún que no sabemos más de como usar los nanotubos, a modo de cables, tubos o diodos; los métodos empleados en esta tesis nos permiten conocer más sobre la manera en que se van definiendo las propiedades de los objetos en la escala nanoscópica y como estas propiedades pueden en un determinado momento constituir las reglas básicas que rigen las estructuras mínimas que podemos encontrar en la naturaleza.

Así que no es de extrañarse que las propiedades de los objetos nanoscópicos aparezcan como fenómenos electromagnéticos a mayor escala generados por la suma de las pequeñas contribuciones de todos los átomos en una estructura.

Para el caso de los nanotubos de carbono medimos la polarización de los átomos en la estructura, suponiendo constantes la polarizabilidad y la densidad atómica, en respuesta a un campo eléctrico; y notamos que esta depende en gran medida de las dimensiones de los objetos dada su gran simetría.

Entonces:

1. La simetría en las estructuras nanoscópicas puede definir una propiedad.
2. Cambios en las dimensiones manteniendo constantes las simetrías incrementan o decrementan la propiedad del objeto nanoscópico.
3. Las propiedades pueden estar bien definidas sólo en un intervalo dimensional.
4. El estudio de estas simetrías nos debe llevar a encontrar cantidades que se conservan.

En el caso de los nanotubos la cantidad que se conserva relacionada con la Polarización, en primera aproximación, puede ser algo así como:

$$\text{Cte} * (N * L / D) * \Sigma P_i / N \quad (1)$$

y le podemos llamar "*Polarización del Nanotubo*".

Donde la cantidad $(N * L / D)$ caracteriza a los nanotubos de un determinado diámetro y la otra parte es simplemente el promedio de la polarización, P_i es la polarización de cada átomo y N es el número de átomos de carbono totales presentes en el nanotubo.

La constante adicional permite ajustar al sistema de unidades que se prefiera. Se puede dar este factor por unidad de superficie, pero como todos los nanotubos de carbón tienen la misma densidad solo sería añadir una constante más.

Es interesante remarcar que la cantidad $(N * L / D)$ se mantiene casi constante para los nanotubos del mismo número de hexágonos por anillo o si se prefiere del mismo diámetro.

Así por ejemplo, para los nanotubos de 12 hexágonos por anillo esta cantidad oscila en el intervalo (55, 57); mientras que para los nanotubos con 18 hexágonos por anillo se encuentra en (122, 123); y para los que tienen 24 hexágonos por anillo se encuentra en (214, 216). De modo que es una cantidad propia de cada tipo de nanotubos según su diámetro; lo cual es lógico ya que a medida que un nanotubo se alarga, crece en número de átomos según la proporción del número de hexágonos por anillo que tenga.

Ahora bien, en realidad el patrón de polarización no es lineal, sino que más bien parece una campana con un valor máximo en el centro, debido a que ahí es mayor el efecto total de todos los átomos. Tal vez entonces convendría definir La Polarización del Nanotubo con una función exponencial de la siguiente manera:

$$\text{Cte} * (N * D / L) * R(D, L) * \text{EXP}\{X^2 / N\} \quad (2)$$

Por algún término $R(D, L)$ por ahora desconocido que permite conocer el máximo.

Creemos que se requiere investigar a un más este modelo para poder precisar esta ecuación que da la curva de polarización de los átomos que conforman un nanotubo en función del número de hexágonos que tenga por anillo NH y el número de anillos NA con los que se alargue. Recordamos que la cantidad N de átomos, así como el diámetro D y el largo L también estarán en función de estos dos números en todos los nanotubos.

Un refinamiento de este estudio tal vez podría conducir a una expresión más precisa de la polarización de los átomos de un nanotubo.

Hasta aquí, todos los nanotubos que hemos estudiado son rectos y abiertos por los extremos; y aunque, en algunos casos experimentales se obtienen nanotubos cerrados, formados al perder algunos átomos de la orilla, lo que da para grupos pentagonales que favorecen la aproximación y cierre de los extremos, dándoles forma de cápsulas, creemos que la propiedad de Polarización del Nanotubo describe bien este comportamiento de estas estructuras en presencia de un campo eléctrico en general y según hemos visto reproduciblemente.

Es decir, que la propiedad se manifiesta con extrema congruencia y claridad en estas estructuras, lo que permite ampliar en gran medida los resultados experimentales, por que aunque algunos de los nanotubos considerados en esta tesis tienen tamaños ligeramente mayores que los que se obtienen experimentalmente, podemos ya saber como se comportarían en presencia de un campo eléctrico después de su obtención.

En el método usado consideramos como buena aproximación el uso del Teorema de Cauchy para convergencia de series infinitas gracias a que la serie de aproximación converge rápidamente eliminando las ambigüedades de cálculo numérico computacional que a veces se pueden tener.

Fue imposible incorporar el método de aproximación de gradiente conjugado ya que ese método sólo puede ser usado en caso de tener una función de "n" variables a la que se pueda sacar el gradiente y con ello aplicar el criterio de la segunda derivada (o el de multiplicadores de Lagrange en varias dimensiones) para calcular el mínimo.

En nuestro caso teníamos una serie numérica como aproximación sucesiva que no puede ser derivada en términos del cálculo diferencial convencional

Por otro lado desde el punto de vista computacional se planteó la posibilidad de utilizar el método "T-Matrix" pero incrementaba de manera desmedida los requerimientos de memoria en la aplicación de nuestra variante del Método de Aproximación de Dipolo Discreto que requiere almacenar $6N$ datos relacionados con coordenadas (3 reales y 3 complejas) para los vectores de campo molecular y para cada vector de polarización de cada uno de los átomos del nanotubo. El método T-Matrix requiere almacenar del orden de $3N \times 3N$ datos para calcular la matriz invariante de las distancias entre cada uno de los vértices del nanotubo y todos los otros. Así que para un nanotubo de 1000 elementos se requiere dimensionar 9 millones de datos; y para uno de 10,000 se requiere dimensionar 6×10^8 datos, lo cual rebasa las posibilidades del microcómputo en pro de un supuesto ahorro operacional. A medida que van creciendo los nanotubos este método va elevando al cuadrado la necesidad de almacenar y manejar datos, por ello es un método que consideramos limitado (a pequeños objetos) para el estudio de las estructuras moleculares en la escala nanoscópica.

Conclusiones

En las ciencias e ingenierías aplicadas en la escala nanométrica hay una basta área para practicar innovaciones, pero antes, los científicos deben entender la física que gobierna la materia a ese nivel. Donde las propiedades de la materia dependen de una compleja y rica combinación de física clásica y mecánica cuántica.

Los ingenieros no serán capaces de crear nanodispositivos redituables y óptimos en tanto no comprendan los principios físicos que prevalecen en la escala nanoscópica.

Los científicos están descubriendo las leyes de la nanoescala midiendo el complejo e inusual comportamiento de los sistemas de átomos y tratando de hacer modelos que permitan su explicación.

Métodos como los empleados en esta Tesis pueden ser útiles en diferentes áreas dada su simplicidad, bajo costo y gran alcance predictivo.

La polarización de los nanotubos de carbono en respuesta a campos eléctricos también ofrece un mecanismo poderoso para caracterizar y detectar estas estructuras moleculares en una gran variedad de aplicaciones.

Se ha demostrado que la variante del método de Aproximación de Dipolo Discreto describe cuantitativamente con buena aproximación las estructuras nanoscópicas. Esto quiere decir que podemos aplicar estos métodos para predecir los comportamientos de sistemas de nanopartículas con disposiciones de nanotubo que no se hallan fabricado aún, y con ello determinar cuales sistemas resultan más interesantes por sus aplicaciones químicas o biológicas.

Además los métodos computacionales han demostrado que son adecuados para determinar la respuesta de polarización de estas estructuras y, además reducir el esfuerzo experimental para conocerlas; de modo que conviene desarrollar la aplicación de los programas de evaluación numérica así como de los programas simuladores en esta área.

Posibles Aplicaciones

El tema estudiado en esta tesis se puede considerar de investigación científica básica, de modo que sus aplicaciones inmediatas o a mediano y largo plazo aún no están delimitadas.

El método estudiado puede generalizarse a otras estructuras geométricas y tal vez ser usado con eficacia para su caracterización de la misma manera que resulta útil para el caso de los nanotubos de carbono.

Debido a que los nanotubos son tubos moleculares pueden actuar como empaquetadores de moléculas de gas y dispositivos de almacenamiento de combustible hidrocarburo, así como contenedores para medicamentos de localización precisa; y para hacer nanocables y nanocápsulas.

En lo que se refiere a este método se tienen posibles aplicaciones en laboratorios de bioquímica para lograr el encapsulamiento de proteínas o para medir la polarización de puntos cuánticos semiconductores y usarlos como marcadores en experimentos biológicos y de investigación para el descubrimiento de medicamentos y pruebas de diagnóstico.

En el terreno de la medicina hoy en día se tiene la expectativa de poder usar la nanotecnología para combatir la terrible enfermedad del Cáncer²⁶. La posibilidad de crear "reconocedores moleculares" de las células enfermas y así poder suministrar medicamentos localizados a nivel celular está abriendo un nuevo campo de investigación que promete aumentar enormemente la esperanza de vida en caso de contraer enfermedades de los tejidos.

Los sensores nanoscópicos tienen una gran sensibilidad y en ocasiones una mayor selectividad que los sensores convencionales lo cual ayudará a detectar una gran variedad de moléculas de importancia para los diagnósticos médicos, la identificación de sustancias peligrosas y otras aplicaciones.

Los nanotubos simples y múltiples tienen buenas propiedades elásticas y mecánicas debido a que la estructura bidimensional constituida por los enlaces de los átomos mantiene la malla extraordinariamente fuerte en caso de la aplicación de distorsiones o fracturas de modo que resultan muy útiles para reforzar materiales basados en fibras.

²⁶ Los liposomas son partículas de unos 100 nanómetros de diámetro que son usadas para combatir algunos tipos de cáncer.

Los dispositivos electrónicos constituidos de nanotubos pueden influenciar considerablemente la siguiente generación de computadoras, los transistores moleculares pueden revolucionar la industria del almacenamiento permitiendo guardar más información en lugares aún más pequeños. También se han estudiado los nanotubos como transistores y la manera de conectar dos nanotubos diferentes (con el uso de pares de hexágonos y pentágonos) lo cual los convertiría en útiles diodos rectificadores.

Por todo lo anterior resulta que estas estructuras son muy importantes de conocer por lo que el tema queda abierto para seguir realizando un sin número de investigaciones relacionadas.

APÉNDICES

Apéndice 1

Códigos Fuente de los Programas Simuladores

Programa en Microsoft QBASIC Simulación de Nanotubos en Disposición Recta Longitudinal y con Extremos en Zig-zag

El programa para la simulación de nanotubos de carbono se muestra a continuación:

```
REM
REM SIMULACION DE UN NANOTUBO DE CARBON
REM
REM Recto Longitudinal con Extremos Zig-zag
REM
GOSUB INICIO: GOSUB CONSTANTES: GOSUB COSNIDELPROG:
GOSUB PRESENT: GOSUB MARCO: GOSUB SO
REM Valores Iniciales
REM Hex gonos por anillo, anillos y tamaño del hexágono
NL = 32: ANI = 14: RH = 2

Nanotubo:
NTA = ANI - 1: NT = NTA + 1
NTA = NT - 1: AIT = (NL / 2) * (NT + 1)
DIM RIX(AIT): DIM RIY(AIT): DIM RIZ(AIT)
FOR NA = -INT(NTA / 2) TO INT(NTA / 2) + NTA STEP 1: hh = 2 * PI / NL
CC = NA + INT(NTA / 2)
FOR ANCI = CC * hh / 2 TO 2 * PI + (CC - 1) * hh / 2 STEP hh.
RC = RH * COS(PI / 6) / SIN(PI / NL)
REM S1
FC = FC + 1
XO1 = NA * 2 * RH * COS(PI / 6) * 1
YO1 = -RC * COS(ANCI)
ZO1 = RC * SIN(ANCI)
ANS1 = ANCI + PI / 2: EJS1 = NEGR
GOSUB S1: GOSUB HEXAGONO
NEXT ANCI: NEXT NA
GOSUB RESULTADOS
IF OVS = "S" OR OVS = "s" THEN GOSUB CUENTA
INPUT " Crear archivo de datos": CADS
IF CADS = "S" OR CADS = "s" THEN GOSUB ESCRIBIR
CLS : INPUT "Leer archivo de datos": LADS
IF LADS = "S" OR LADS = "s" THEN GOSUB LEER
GOTO FIN
END: REM ////////////////////////////////// SUB RUTINAS //////////////////////////////////

FIN:
END
RETURN

LEER:
CLS
OPEN "NTD1.DAT" FOR INPUT AS #1
INPUT #1, AIT
FOR JJ = 0 TO AIT
```



```

INPUT #1, RIX(JJ), RIY(JJ), RIZ(JJ)
PRINT RIX(JJ), RIY(JJ), RIZ(JJ)
NEXT JJ
CLOSE #1
RETURN

```

ESCRIBIR:

```

CLS
OPEN "NTD1.DAT" FOR OUTPUT AS #1
PRINT #1, ATT
FOR JJ = 0 TO ATT
PRINT #1, RIX(JJ), RIY(JJ), RIZ(JJ)
NEXT JJ
CLOSE #1
RETURN

```

CUENTA:

```

FOR J = 1 : ATT : 1
F10 = COH * RIX(J) * IOH + RIY(J) * JOH + RIZ(J) * KOH
F20 = COV * RIX(J) * IOV + RIY(J) * JOV + RIZ(J) * KOV
F1 = COH * RIX(J + 1) * IOH + RIY(J + 1) * JOH + RIZ(J + 1) * KOH
F2 = COV * RIX(J + 1) * IOV + RIY(J + 1) * JOV + RIZ(J + 1) * KOV
LINE (F10, F20) - (F1, F2)
NEXT J
GOSUB SONIDU2: PRINT "Número de vértices = "; AT
RETURN

```

RESULTADOS:

```

ATT = (NL * 2) * (NT + 1)
PRINT " Hexágonos por anillo = "; NL; " Lado del hex gono = "; RH
PRINT " Número de anillos = "; NT; " Número de vértices = "; ATT
GOSUB SONIDO: INPUT " Cuento ? = ", OVS
RETURN

```

ESFERA:

```

REM Requiere:CEH = CPH: CEV = CPV: RADE = .1 * RH: he = PI / 3: COLE = Verd
FOR tees = 0 TO 2 * PI STEP he: FOR files = 0 TO PI STEP he
XES = RADE * COS(tees) * SIN(files)
YES = RADE * SIN(tees) * SIN(files)
ZES = RADE * COS(files)
CXHE = XES * IOH * 1: CXVE = XES * IOV * 1
CYE = YES * JOH: CZE = ZES * KOV
PSET (CEH + (CYE + CXHE), CEV + (CZE + CXVE)), COLE
NEXT files: NEXT tees
RETURN

```

HEXAGONO:

```

REM Requiere:RH=1
CHH = C1H: CHV = C1V
E1 = 0: E10 = 0: E2 = 0: E20 = 0: CONT = 0: SEL = CONT: h = PI / 3
FOR ANGH = h TO 2 * PI + h STEP h
XH = RH * COS(ANGH): YH = RH * SIN(ANGH): ZH = 0
CXH = XH * I1H: CXV = XH * I1V
CYH = YH * J1H: CYV = YH * J1V
CZH = ZH * K1H: CZV = ZH * K1V
CONT = CONT + 1: E10 = E1: E20 = E2
E1 = CHH + (CXH + CYH): E2 = CHV + (CXV + CYV)
IF CONT = 1 THEN E10 = E1: IF CONT = 1 THEN E20 = E2
IF NA = -INT(NTA / 2) AND SEL = 2 THEN GOTO LINEA
IF NA = -INT(NTA / 2) AND SEL = 3 THEN GOTO LINEA
IF SEL = 1 THEN GOTO SIGUE
IF SEL = 2 THEN GOTO SIGUE
IF SEL = 3 THEN GOTO SIGUE
IF SEL = 4 THEN GOTO LINEA
IF SEL = 5 THEN GOTO LINEA

```

```

IF SEL = 6 THEN GOTO LINEA
GOTO SIGUE

LINEA:
LINE (E10, E20)-(E1, E2), AMAR

SIGUE:
IF NA = -INT(NTA / 2) AND SEL = 3 THEN GOTO ESFE
IF NA = -INT(NTA / 2) AND SEL = 4 THEN GOTO ESFE
IF SEL = 1 THEN GOTO SIG2
IF SEL = 2 THEN GOTO SIG2
IF SEL = 3 THEN GOTO SIG2
IF SEL = 4 THEN GOTO SIG2
IF SEL = 5 THEN GOTO ESFE
IF SEL = 6 THEN GOTO ESFE
GOTO SIG2

ESFE:
REM Esfera:
AT = AT + 1
RIX(AT) = X01 + XH: RIY(AT) = Y01 + YH * COS(ANSI): RIZ(AT) = Z01 + YH *
SIN(ANSI)
CEH = E10: CEV = E20: COLE = CIEL: RADE = .1 * RH: he = .5
GOSUB ESFERA

SIG2:
SEL = SEL + 1: NEXT ANGH
RETURN

S1:
REM Requiere: X01 = 3: Y01 = 3: Z01 = 3: a1f1 = -PI / 12: EJS1 = NEGR
I1H = IOH: I1V = IOV
J1H = U * COS(ANS1): J1V = U * SIN(ANS1)
K1H = -U * SIN(ANS1): K1V = -U * COS(ANS1)
C1H = COH + X01 * IOH + Y01 * JOH + Z01 * KOH
C1V = COV + X01 * IOV + Y01 * JOV + Z01 * KOV
LINE (C1H, C1V)-(C1H + I1H, C1V + I1V), EJS1: REM I1
LINE (C1H, C1V)-(C1H + J1H, C1V + J1V), EJS1: REM J1
LINE (C1H, C1V)-(C1H + K1H, C1V + K1V), EJS1: REM K1
RETURN

S0:
REM Requiere subrutinas: Inicio: Constantes
REM Requiere variables:
COH = CPH: COV = CPV: EJSO = BLAB
U = 10 * FE
IOH = -U * COS(PI / 3) * .8: IOV = U * SIN(PI / 3) * .1
JOH = U: JOV = 0:
KOH = 0: KOV = -U:
LINE (COH, COV)-(COH + IOH, COV + IOV), EJSO: REM IO
LINE (COH, COV)-(COH + JOH, COV + JOV), EJSO: REM JO
LINE (COH, COV)-(COH + KOH, COV + KOV), EJSO: REM KO
RETURN

PRESENT:
REM Requiere subrutinas: Inicio: Constantes
CLS : COLOR AMAR
PRINT "": PRINT "": PRINT "": PRINT TAB(8): "NANOTUBO DE CARBONO"
PRINT "": PRINT "": PRINT "": PRINT TAB(8): " "
PRINT "": PRINT "": PRINT "": PRINT TAB(8): "Disposición Recta
Longitudinal"
GOSUB SONIDO
FOR T = 1 TO .3 * 10 ^ 6: NEXT T: CLS : COLOR BLAB
RETURN

```

SONIDO:
FOR 1% - 440 TO 1000 STEP 200: SOUND 1%, 1% / 1000: NEXT 1%
RETURN

SONIDO2:
FOR 1% - 1000 TO 440 STEP -80: SOUND 1%, 1% / 1000: NEXT 1%
RETURN

MARCO:
REM Requiere subrutinas:Inicio: Constantes
REM Requiere variable :
MARC = VERD
LINE (0. 0)-(2 * CPH. 2 * CPV). MARC. B
RETURN

COSNIDELPROG:
CC - 0: AT - 0: ATT - 0
RETURN

CONSTANTES:
FE - 1: U - 10 * FE
PI - 3.141592: CPH - 315: CPV - 220
REM COLORES:
AZUL - 1: VERD - 2: ROJO - 4: MORA - 5: NARA - 6
GRIS - 8: MAGE - 9: ROSA - 12: AMAR - 14: BLAB - 15
RETURN

INICIO:
CLS : SCREEN 12: CLS
RETURN

Programas en Microsoft QBASIC para la Simulación de Nanotubos Quirales

Algunas variantes practicadas al programa anterior para la simulación de nanotubos longitudinales rectos permiten generar nanotubos quirales. Estas variantes no incluyen cambios en las subrutinas ni en la estructura global del programa, sólo modifican parámetros.

Sin embargo, en lugar de presentar una fórmula general de quiralidad (adaptada al programa simulador) hacemos el cambio en específico para tener un mayor control de los parámetros en los casos en que la quiralidad se puede presentar

Código Fuente del Nanotubo con Quiralidad Q1

El código fuente modificado para el nanotubo (32, 1) con quiralidad 1 es el siguiente:

```
REM Valores Iniciales
NL = 32: ANI = 1: RH = 2: ATRS = -21

Nanocilindro:
NTA = ANI - 1: NT = NTA + 1
NTA = NT - 1: ATT = 1000
DIM RIX(ATT): DIM RIY(ATT): DIM RIZ(ATT)
FOR NA = -INT(NTA / 2) TO INT(NTA / 2) + NTA STEP 1: hh = 2 * PI / (NL + .5)
CC = NA + INT(NTA / 2)
FOR ANCI = CC * hh / 2 TO 29.55 * PI + (CC - 1) * hh / 2 STEP hh
  RC = RH * COS(PI / 6) / SIN(PI / (NL + .5))
  REM S1
  FC = FC + 1
  XO1 = ATRS + 2 * RH * COS(PI / 6) * ANCI * .15
  YO1 = -RC * COS(ANCI)
  ZO1 = RC * SIN(ANCI)
  ANS1 = ANCI + PI / 2: EJS1 = MEGR
  GOSUB S1: GOSUB HEXAGONO
NEXT ANCI: NEXT NA
GOSUB RESULTADOS
```

Que corresponde sólo a la parte que realiza el cilindro de hexágonos en el programa.

Código Fuente del Nanotubo con Quiralidad Q2

El código fuente del nanotubo (32, 2) con quiralidad 2 es:

```
REM Valores Iniciales
NL = 32: ANI = 1: RH = 2: ATRS = -21
Nanocilindro:
NTA = ANI - 1: NT = NTA + 1: NTA = NT - 1: ATT = 1000
DIM RIX(ATT): DIM RIY(ATT): DIM RIZ(ATT)
FOR Q2 = 1 TO 2
FOR NA = -INT(NTA / 2) TO -INT(NTA / 2) + NTA STEP 1: hh = 2*PI / (NL + .1)
CC = NA + INT(NTA / 2)
FOR ANCI = CC * hh / 2 + (Q2 - 1) * hh / 2 TO 14.95 * PI + (CC - 1) * hh /
2 + (Q2 - 1) * hh / 2 STEP hh
RC = RH * COS(PI / 6) / SIN(PI / (NL + 1))
REM S1
FC = FC + 1
XO1 = ATRS + 2 * RH * COS(PI / 6) * ANCI * .3
YO1 = -RC * COS(ANCI)
ZO1 = RC * SIN(ANCI)
ANS1 = ANCI + PI / 2: EJS1 = NEGR
GOSUB S1: GOSUB HEXAGONO
NEXT ANCI: NEXT NA
ATRS = ATRS + Q2 * 3
NEXT Q2
GOSUB RESULTADOS
```

Código Fuente del Nanotubo con Quiralidad Q3

El código fuente del nanotubo (32, 3) con quiralidad 3 es:

```
REM Valores Iniciales
NL = 32: ANI = 1: RH = 2: ATRS = -21
Nanocilindro:
NTA = ANI - 1: NT = NTA + 1: NTA = NT - 1: ATT = 1000: QN = 3
DIM RIX(ATT): DIM RIY(ATT): DIM RIZ(ATT)
FOR Q3 = 1 TO QN
FOR NA = -INT(NTA / 2) TO -INT(NTA / 2) + NTA STEP 1: hh = 2 * PI / (NL +
QN * .5)
CC = NA + INT(NTA / 2)
FOR ANCI = CC * hh / 2 + (Q3 - 1) * hh / 2 TO 9.55 * PI + (CC - 1) * hh /
2 + (Q3 - 1) * hh / 2 STEP hh
RC = RH * COS(PI / 6) / SIN(PI / (NL + QN * .5))
REM S1
FC = FC + 1
XO1 = ATRS + 2 * RH * COS(PI / 6) * ANCI * QN * .15
YO1 = -RC * COS(ANCI)
ZO1 = RC * SIN(ANCI)
ANS1 = ANCI + PI / 2: EJS1 = NEGR
GOSUB S1: GOSUB HEXAGONO
NEXT ANCI: NEXT NA
ATRS = ATRS + Q3 * 3 - 2.6 * (Q3 - 1)
NEXT Q3
GOSUB RESULTADOS
```

Código Fuente del Nanotubo on Quiralidad Q4

El código fuente del nanotubo (32, 4) con quiralidad 4 es:

```
REM Valores Iniciales
NL = 32: ANI = 1: RH = 2: ATRS = -21
Nanocilindro:
NTA = ANI - 1: NT = NTA + 1
NTA = NT - 1: ATT = 1000: QN = 4
DIM RIX(ATT): DIM RIY(ATT): DIM RIZ(ATT)
FOR Q4 = 1 TO QN
FOR NA = -INT(NTA / 2) TO INT(NTA / 2) + NTA STEP 1: hh = 2*PI / (NL + 3)
CC = NA + INT(NTA / 2)
FOR ANCI = CC * hh / 2 + (Q4 - 1) * hh / 2 TO 6.85 * PI + (CC - 1) * hh /
2 + (Q4 - 1) * hh / 2 STEP hh
RC = RH * COS(PI / 6) / SIN(PI / (NL + 3.5))
REM S1
FC = FC + 1
XO1 = ATRS + 2 * RH * COS(PI / 6) * ANCI * QN * .15
YO1 = -RC * COS(ANCI)
ZO1 = RC * SIN(ANCI)
ANS1 = ANCI + PI / 2: EJS1 = NEGR
GOSUB S1: GOSUB HEXAGONO
NEXT ANCI: NEXT NA
ATRS = ATRS + Q4 * 3 - 2.7 * (Q4 - 1)
NEXT Q4
GOSUB RESULTADOS
```

Se puede decir que los algoritmos se han creado con el método de adaptación sucesiva a cada factor de quiralidad.

Finalmente podrían definirse subrutinas para cada caso y ser llamadas a elección en un sólo programa.

Apéndice 2 Código Fuente del Programa de Evaluación Numérica

Programa en Microsoft Visual C ++ versión 6.0 Determinación de la Polarización de un Nanotubo

Para evaluar la polarización de los átomos que componen los nanotubos simulados; como respuesta a un campo electromagnético, se creó el siguiente programa complementario de Evaluación Numérica en Microsoft Visual C ++ versión 6.0 (compatible con lenguaje C genérico) que lee la información de los archivos de datos generados por el Simulador Tridimensional y los procesa. Los resultados obtenidos en este último se registran en otro archivo de datos.

```
// .....
// *      NANA CECILIA          *
// *      TESIS DE LICENCIATURA *
// *      ALEJANDRO VALLEPAMA MALDIVAR *
// *      DIRECTORA: DRA. ANA CECILIA NOGUEZ *
// .....
//
// DETERMINACION DE LA POLARIZACIÓN DE UN NANOTUBO
// Versión 3 "cgs"
// ..... 12/03/2001
// .....
// Inicio del programa
#include <iostream.h>
#include <stdio.h>
#include <math.h>
void main()
{
//Manejo del archivo NTD1.TXT
FILE *datos;datos=fopen("NTD1.DAT","r");
//Manejo de archivos DATOS#.TXT
FILE *datos1;datos1=fopen("datos1.txt","w");
FILE *datos2;datos2=fopen("datos2.txt","w");
//FILE *datos3;datos3=fopen("datos3.txt","w");
//FILE *datos4;datos4=fopen("datos4.txt","w");
// Constantes de control:
float pi=3.14159;
// Constantes del programa:
int C1=0,C2=0,C3=0,C4=100;
// Variables del programa:
char p[2];
// Variables del cálculo:
float ATT,K1=1;
float alfa=0.023,alfac=0.0023;
float Exr=1,Eyr=10,Ezr=100;
float NUMr,NUMc,DEN,DEN2,QUEr,QUEc;
float SUMXr,SUMYr,SUMZr,SUMXc,SUMYc,SUMZc;
```

```

float RIX[1000],RIY[1000],RIZ[1000];
float POIXr[1000],POIYr[1000],POIZr[1000];
float POIXc[1000],POIYc[1000],POIZc[1000];
float EIXr[1000],EIYr[1000],EIZr[1000];
float EIXc[1000],EIYc[1000],EIZc[1000];
float EOIXr[1000],EOIYr[1000],EOIZr[1000];
float EOIXc[1000],EOIYc[1000],EOIZc[1000];
float ELIXr[1000],ELIYr[1000],ELIZr[1000];
float ELIXc[1000],ELIYc[1000],ELIZc[1000];
// fin de punto:
// Este programa calcula la polarización);printf("\n");
// de un nanotubo de carbon en un campo
// electrico.);printf("\n");
// Opera el numero total de puntos
// scanf(datos,"i", &ATT);
// datos:
// printf("Operar el numero total de puntos ? ");
// scanf("%i", &preg);
// if (preg=='n'||preg=='N');
// goto fin;
// if (preg=='s'||preg=='S')
// goto sigue;
// goto pregunta;
// sigue:
// recupera las coordenadas
for (C1=1; C1<ATT+1;C1=C1+1)
{
fscanf(datos,"%f",&RIX[C1]);
fscanf(datos,"%f",&RIY[C1]);
fscanf(datos,"%f",&RIZ[C1]);
//cout << "RIX[";cout << C1;cout <<" ] ";cout << RIX[C1];cout << "
";cout << "RIY[";cout << C1;cout <<" ] ";cout << RIY[C1];cout << "
";cout << "RIZ[";cout << C1;cout <<" ] ";cout << RIZ[C1];cout << "
";cout << "\n";
}
//cout << "Numero total de puntos ";cout << ATT;cout
<< "\n";cout << "\n";
//pregunta2:
// printf("\nProcesar ? ");
// scanf("%c", &preg);
// if (preg=='n'||preg=='N')
// goto fin;
// if (preg=='s'||preg=='S')
// goto sigue2;
// goto pregunta2;
// sigue2:
// Primer valor de polarización
for (C1=1; C1<ATT+1;C1=C1+1)
{
POIXr[C1]=alfar*Exr;
POIXc[C1]=alfac*Exr;
POIYr[C1]=alfar*Eyr;
POIYc[C1]=alfac*Eyr;
POIZr[C1]=alfar*Ezr;
POIZc[C1]=alfac*Ezr;
cout << "POIXr[";cout << C1;cout <<" ] ";cout << POIXr[C1];cout
<< " ";cout << "POIYr[";cout << C1;cout <<" ] ";cout << "
";cout << "POIYr[";cout << " ";cout << "POIZr[";cout << C1;cout <<" ]
";cout << POIZr[C1];cout << " ";cout << C3;cout << "\n";
}

```



```

        cout << "POIXc[";cout << C1;cout <<"] ";cout << POIXc[C1];cout
<< " ";cout << "POIYc[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
POIYc[C1];cout << " ";cout << "POIZc[";cout << C1;cout <<"]
";cout << POIZc[C1];cout << " ";cout << C3;cout <<"\n";
}
//pregunta3:
// printf("\nProcesar?: ");
// scanf("%c", &preg);
// if (preg=='n'||preg=='N')
//     goto fin;
// if (preg=='s'||preg=='S')
//     goto sigue3;
// goto pregunta3;
sigue3:
// Primer valor de campo
for (C1=1; C1<ATT+1;C1=C1+1)
{
    SUMXr=0, SUMYr=0, SUMZr=0;
    SUMXc=0, SUMYc=0, SUMZc=0;
    for (C2=1; C2<ATT+1;C2=C2+1)
    {
        if (C1!=C2)
            NUMr=(RIX [C1]-RIX [C2])*POIXr [C2]+(RIY [C1]-
RIY [C2])*POIYr [C2]+(RIZ [C1]-RIZ [C2])*POIZr [C2];
            NUMc=(RIX [C1]-RIX [C2])*POIXc [C2]+(RIY [C1]-
RIY [C2])*POIYc [C2]+(RIZ [C1]-RIZ [C2])*POIZc [C2];
            DEN=pow(pow (RIX [C1]-RIX [C2], 2)+pow (RIY [C1]-
RIY [C2], 2)+pow (RIZ [C1]-RIZ [C2], 2), 5/2);
            DEN2=pow(pow (RIX [C1]-RIX [C2], 2)+pow (RIY [C1]-
RIY [C2], 2)+pow (RIZ [C1]-RIZ [C2], 2), 3/2);
            if (DEN!=0)
                QUER=3*NUMr/DEN;
            if (DEN!=0)
                QUEc=3*NUMc/DEN;
            if (DEN2>1)
            {
                SUMXr=SUMXr+K1*(QUER*(RIX [C1]-
RIX [C2])+POIXr [C2]/DEN2);
                SUMXc=SUMXc+K1*(QUEc*(RIX [C1]-
RIX [C2])+POIXc [C2]/DEN2);
                SUMYr=SUMYr+K1*(QUER*(RIY [C1]-
RIY [C2])+POIYr [C2]/DEN2);
                SUMYc=SUMYc+K1*(QUEc*(RIY [C1]-
RIY [C2])+POIYc [C2]/DEN2);
                SUMZr=SUMZr+K1*(QUER*(RIZ [C1]-
RIZ [C2])+POIZr [C2]/DEN2);
                SUMZc=SUMZc+K1*(QUEc*(RIZ [C1]-
RIZ [C2])+POIZc [C2]/DEN2);
            }
            E0IXr [C1]=Exr+SUMXr;
            E0IXc [C1]=SUMXc;
            E0IYr [C1]=Eyr+SUMYr;
            E0IYc [C1]=SUMYc;
            E0IZr [C1]=Ezr+SUMZr;
            E0IZc [C1]=SUMZc;
// cout << "E0IXr[";cout << C1;cout <<"] ";cout << E0IXr [C1];cout
<< " ";cout << "E0IYr[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
E0IYr [C1];cout << " ";cout << "E0IZr[";cout << C1;cout <<"]
";cout << "

```

```

";cout << EOIZr[C1];cout << " ";cout << "\n";
// cout << "EOIXc[";cout << C1;cout <<"] ";cout << EOIXc[C1];cout
<< " ";cout << "EOIYc[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
EOIYc[C1];cout << " ";cout << "EOIZc[";cout << C1;cout <<"]
";cout << EOIZc[C1];cout << " ";cout << "\n";
}
//pregunta4:
// printf("\nProcesar ?: ");
// scanf("%c", &preg);
// if (preg=='n' || preg=='N')
// goto fin;
// if (preg=='s' || preg=='S')
// goto sigue4;
// goto pregunta4;
//sigue4:
// Segundo valor de polarización
for (C1=1; C1<ATT+1;C1=C1+1)
{
    P1IXr[C1]=alfar*EOIXr[C1]-alfac*EOIXc[C1];
    P1IYr[C1]=alfar*EOIYr[C1]-alfac*EOIYc[C1];
    P1IZr[C1]=alfar*EOIZr[C1]-alfac*EOIZc[C1];
    P1IXc[C1]=alfac*EOIXr[C1]+alfar*EOIXc[C1];
    P1IYc[C1]=alfac*EOIYr[C1]+alfar*EOIYc[C1];
    P1IZc[C1]=alfac*EOIZr[C1]+alfar*EOIZc[C1];
    cout << "P1IXr[";cout << C1;cout <<"] ";cout << P1IXr[C1];cout
    << " ";cout << "P1IYr[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    P1IYr[C1];cout << " ";cout << "P1IZr[";cout << C1;cout <<"]
    ";cout << P1IZr[C1];cout << " ";cout << C3+1;cout << "\n";
    cout << "P1IXc[";cout << C1;cout <<"] ";cout << P1IXc[C1];cout
    << " ";cout << "P1IYc[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    P1IYc[C1];cout << " ";cout << "P1IZc[";cout << C1;cout <<"]
    ";cout << P1IZc[C1];cout << " ";cout << C3+1;cout << "\n";
}
//pregunta5:
// printf("\nProcesar ?: ");
// scanf("%c", &preg);
// if (preg=='n' || preg=='N')
// goto fin;
// if (preg=='s' || preg=='S')
// goto sigue5;
// goto pregunta5;
//sigue5:
// Segundo valor de campo
for (C1=1; C1<ATT+1;C1=C1+1)
{
    SUMXr=0, SUMYr=0, SUMZr=0;
    SUMXc=0, SUMYc=0, SUMZc=0;
    for (C2=1; C2<ATT+1;C2=C2+1)
    {
        if (C1!=C2)
            NUMr=(RIX[C1]-RIX[C2])*P1IXr[C2]+(RIY[C1]-
            RIY[C2])*P1IYr[C2]+(RIZ[C1]-RIZ[C2])*P1IZr[C2];
            NUMc=(RIX[C1]-RIX[C2])*P1IXc[C2]+(RIY[C1]-
            RIY[C2])*P1IYc[C2]+(RIZ[C1]-RIZ[C2])*P1IZc[C2];
            DEN=pow(pow(RIX[C1]-RIX[C2], 2)+pow(RIY[C1]-
            RIY[C2], 2)+pow(RIZ[C1]-RIZ[C2], 2), 5/2);
            DEN2=pow(pow(RIX[C1]-RIX[C2], 2)+pow(RIY[C1]-
            RIY[C2], 2)+pow(RIZ[C1]-RIZ[C2], 2), 3/2);
            if (DEN!=0)

```

```

        QUER=NUMr/DEN;
    if (DEN!=0)
        QUEC=NUMc/DEN;
    if (DEN2>1)
    {
        SUMXr=SUMXr+K1*(QUER*(RIX[C1]-
        RIX[C2])+PIIXr[C2]/DEN2);
        SUMYr=SUMYr+K1*(QUER*(RIY[C1]-
        RIY[C2])+PIIXc[C2]/DEN2);
        SUMZr=SUMZr+K1*(QUER*(RIZ[C1]-
        RIZ[C2])+PIIYr[C2]/DEN2);
        SUMXc=SUMXc+K1*(QUEC*(RIX[C1]-
        RIX[C2])+PIIYc[C2]/DEN2);
        SUMYc=SUMYc+K1*(QUEC*(RIY[C1]-
        RIY[C2])+PIIZr[C2]/DEN2);
        SUMZc=SUMZc+K1*(QUEC*(RIZ[C1]-
        RIZ[C2])+PIIZc[C2]/DEN2);
    }
    EIXr[C1]=Exr+SUMXr;
    EIYr[C1]=Eyr+SUMYr;
    EIZr[C1]=Ezr+SUMZr;
    EIXc[C1]=SUMXc;
    EIYc[C1]=SUMYc;
    EIZc[C1]=SUMZc;
    // cout << "EIXr[";cout << C1;cout <<"] ";cout << EIXr[C1];cout
    << " ";cout << "EIYr[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    EIYr[C1];cout << " ";cout << "EIZr[";cout << C1;cout <<"]
    ";cout << EIZr[C1];cout << " ";cout <<"\n";
    // cout << "EIXc[";cout << C1;cout <<"] ";cout << EIXc[C1];cout
    << " ";cout << "EIYc[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    EIYc[C1];cout << " ";cout << "EIZc[";cout << C1;cout <<"]
    ";cout << EIZc[C1];cout << " ";cout <<"\n";

    cout << "POIXr-PIIXr[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    POIXr[C1]-PIIXr[C1];cout << " ";cout << "POIYr-PIIYr[";cout <<
    C1;cout <<"] ";cout << "POIZr-PIIZr[";cout << C1;cout <<"]
    ";cout << "POIXr-PIIXc[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    POIXr[C1]-PIIXc[C1];cout << " ";cout << "POIYr-PIIYc[";cout <<
    C1;cout <<"] ";cout << "POIZr-PIIZc[";cout << C1;cout <<"]
    ";cout << "POIXc-PIIXc[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    POIXc[C1]-PIIXc[C1];cout << " ";cout << "POIYc-PIIYc[";cout <<
    C1;cout <<"] ";cout << "POIZc-PIIZc[";cout << C1;cout <<"]
    ";cout << "POIZc-PIIZc[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    POIZc[C1]-PIIZc[C1];cout << " ";cout <<"\n";
}
//pregunta6;
// printf("\nSiguiente aproximación ? : ");
// scanf("%c", &preg);
// if (preg=='n'||preg=='N')
//     goto fin;
// if (preg=='s'||preg=='S')
//     goto sigue6;
// goto pregunta6;
sigue6;
// Aproximación de orden C4
C3=C3+1,C4;
if (C3<C4)
    goto reinicio;

```

```

else
    goto pregunta7;
reinicio:
for (C1=1; C1<ATT+1;C1=C1+1)
{
    POIXr[C1]=P1IXr[C1];
    POIYr[C1]=P1IYr[C1];
    POIZr[C1]=P1IZr[C1];
    POIXc[C1]=P1IXc[C1];
    POIYc[C1]=P1IYc[C1];
    POIZc[C1]=P1IZc[C1];
//
    cout << "POIXr[";cout << C1;cout <<"] ";cout << POIXr[C1];cout
    << " ";cout << "POIYr[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    POIYr[C1];cout << " ";cout << "POIZr[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    POIZr[C1];cout << " ";cout << "\n";
//
    cout << "POIXc[";cout << C1;cout <<"] ";cout << POIXc[C1];cout
    << " ";cout << "POIYc[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    POIYc[C1];cout << " ";cout << "POIZc[";cout << C1;cout <<"] ";cout <<
    POIZc[C1];cout << " ";cout << "\n";
}
data3:;
pregunta7:
printf("\nCrear archivo de datos ? : ");
scanf("%c", &preg);
if (preg=='n' || preg=='N')
    goto fin;
if (preg=='s' || preg=='S')
    goto sigue7;
goto pregunta7;
sigue7:
for (C1=1; C1<ATT+1;C1=C1+1)
{
    //fprintf(datos1,"%f",POIXr[C1]);
    //fputc(' ',datos1);
    //fprintf(datos1,"%f",POIYr[C1]);
    //fputc(' ',datos1);
    //fprintf(datos1,"%f",POIZr[C1]);
    //fputc(' ',datos1);
    //fprintf(datos1,"%f",POIXc[C1]);
    //fputc(' ',datos1);
    //fprintf(datos1,"%f",POIYc[C1]);
    //fputc(' ',datos1);
    //fprintf(datos1,"%f",POIZc[C1]);
    //fputc(' ',datos1);

    fprintf(datos2,"%f",P1IXr[C1]);
    fputc(' ',datos2);
    fprintf(datos2,"%f",P1IYr[C1]);
    fputc(' ',datos2);
    fprintf(datos2,"%f",P1IZr[C1]);
    fputc(' ',datos2);
    fprintf(datos2,"%f",P1IXc[C1]);
    fputc(' ',datos2);
    fprintf(datos2,"%f",P1IYc[C1]);
    fputc(' ',datos2);
    fprintf(datos2,"%f",P1IZc[C1]);
    fputc(' ',datos2);

    //fprintf(datos3,"%f",EOIXr[C1]);

```

```

//fputc(' ', datos3);
//fprintf(datos3, "%f", E01Yr[C1]);
//fputc(' ', datos3);
//fprintf(datos3, "%f", E01M[C1]);
//fputc(' ', datos3);
//fprintf(datos3, "%f", E01D[C1]);
//fputc(' ', datos3);
//fprintf(datos3, "%f", E01E[C1]);
//fputc(' ', datos3);
//fprintf(datos3, "%f", E01A[C1]);
//fputc(' ', datos4);
//fprintf(datos4, "%f", E01Yr[C1]);
//fputc(' ', datos4);
//fprintf(datos4, "%f", E01M[C1]);
//fputc(' ', datos4);
//fprintf(datos4, "%f", E01D[C1]);
//fputc(' ', datos4);
//fprintf(datos4, "%f", E01E[C1]);
//fputc(' ', datos4);
//fprintf(datos4, "%f", E01A[C1]);
//fputc(' ', datos4);
}
goto fin;
// FIN DEL PROGRAMA:
fin:
    cout <<"FIN";
    cout <<"\n";
}

```

Apéndice 3

Programas Adicionales

Programa en Microsoft QBASIC para la Simulación de una Malla Hexagonal

Programa para la simulación de una pared o malla hexagonal de carbono. Los hexágonos pueden ser interpretados como moléculas de 4 átomos de carbono (cada vértice conecta con otros 3).

```
REM
REM PARED HEXAGONAL
REM
GOSUB Inicio: GOSUB Constantes: GOSUB Marco: GOSUB R3
colu = 20: reng = 10: larg = 1
XCP = XC: YCP = YC
r = larg: corx = r * COS(PI / 6) * 3.45: cory = r * COS(PI / 6) * 2
FOR n = 0 TO reng - 1
FOR m = 0 TO (colu - 1) / 2
FOR teta = 0 TO 2 * PI STEP PI / 3
tet = teta + PI / 3: ZX = 0 * KI: ZY = 0 * KJ
LINE (XCP + (r * COS(teta) + m * corx) * I + ZX, YCP + (r * SIN(teta) + n * cory) * J + ZY)-(XCP + (r * COS(tet) + m * corx) * I + ZX, YCP + (r * SIN(tet) + n * cory) * J + ZY)
LINE (XCP + (r * COS(teta) + (m + .5) * corx) * I + ZX, YCP + (r * SIN(teta) + (n + .5) * cory) * J + ZY)-(XCP + (r * COS(tet) + (m + .5) * corx) * I + ZX, YCP + (r * SIN(tet) + (n + .5) * cory) * J + ZY)
NEXT teta: NEXT m: NEXT n
END: REM ////////////////////////////////// SUBROUTINAS //////////////////////////////////
```

```
Fin:
END
RETURN
```

```
R3:
REM Requiere de Inicio, Colores y Constantes
EJES = AMAR: U = 100: FE: FI = (PI / 3):
I = U: J = -U: KI = -.8 * U * COS(FI): KJ = .75 * U * SIN(FI)
LINE (XC, YC)-(XC + I, YC), EJES: REM I
LINE (XC, YC)-(XC, YC + J), EJES: REM J
LINE (XC, YC)-(XC + KI, YC + KJ), EJES: REM K
RETURN
```

```
Marco:
REM Requiere de Inicio, Colores y Constantes
MARC = azul: LINE (0, 0)-(2 * XC, 2 * YC), MARC, B
RETURN
```

```
Constantes:
FE = .1: PI = 3.141592: XC = 315: YC = 220
NEGR = 0: azul = 1: verd = 2: CIEL = 3: rojo = 4: MORA = 5: NARA = 6
BLAN = 7: GRIS = 8: MAGE = 9: ROSA = 12: LILA = 13: AMAR = 14: BLAB = 15
RETURN
```

```
Inicio:
CLS: SCREEN 12: CLS
RETURN
```

146

Apéndice 4

Pruebas de Convergencia

1ª Aproximación para α real

En el caso simplificado en el que los átomos de un nanotubo quedan expresados como $r_i = (r_{xi}, r_{yi}, r_{zi})$, con $i = 1, 2, \dots, N$.

\Rightarrow el campo eléctrico $E(r) = (E_x, E_y, E_z)$ induce la polarización $P(r_i) \cong P_i$

$$P(r_i) \cong P_i = \alpha E \quad (1)$$

Si el campo polarizante en cada punto r_i sólo tiene los dos primeros términos:

$$E_0(r_i) \cong E_{0i} = E_0 + \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[\frac{3(r_i - r_j)}{|r_i - r_j|^5} \cdot P_{0j}(r_i - r_j) \right] \quad (2)$$

Escribiendo:

$$\mathcal{R}_{ij} \cong \frac{3(r_i - r_j)}{|r_i - r_j|^5} \quad (3)$$

$$r_{ij} \cong r_i - r_j \quad (4)$$

y omitiendo los subíndices ij (que nunca cambian), se puede escribir de manera abreviada:

$$E_0 = E + \sum \mathcal{R} [\alpha E] r \quad (5)$$

Que a su vez induce la polarización:

$$P_1 = \alpha E + \sum \mathcal{R} [\alpha^2 E] r \quad (6)$$

\Rightarrow

$$E_1 = E + \sum \mathcal{R} [\alpha E + \sum \mathcal{R} [\alpha^2 E] r] r$$

$$E_1 = E + \sum \mathcal{R} [\alpha E] r + \sum \mathcal{R} [\sum \mathcal{R} [\alpha^2 E] r] r \quad (7)$$

\Rightarrow induce la polarización:

$$P_2 = \alpha E + E + \sum \mathcal{R} [\alpha^2 E] r + \sum \mathcal{R} [\sum \mathcal{R} [\alpha^3 E] r] r \quad (8)$$

\vdots
 \therefore

$$P_n = \alpha E + E + \sum \mathfrak{R} [\alpha^2 E] r + \dots + \sum \mathfrak{R} [\dots | \alpha^{n+1} E | r \dots] r \quad (9)$$

⇒ en el límite cuando $n \rightarrow \infty$

$$P_n - P_{n-1} = \sum \mathfrak{R} [\dots | \alpha^{n+1} E | r \dots] r = 0 \quad (10)$$

∴ la serie converge siempre que $\alpha < 1$ ya que el valor del producto con \mathfrak{R} siempre podrá ser rebasado a partir de alguna potencia de α .

2ª Aproximación para α real

Para el caso en que el campo polarizante incluye el tercer término se puede seguir el mismo método y encontrar una expresión analítica sencilla similar con la que se puede obtener fácilmente el último límite.

En el caso simplificado en el que los átomos de un nanotubo quedan expresados como $r_i = (r_{xi}, r_{yi}, r_{zi})$; con $i = 1, 2, \dots, N$.

⇒ el campo eléctrico $E(r) = (E_x, E_y, E_z)$ induce la polarización $P(r_i) \triangleq P_i$

$$P(r_i) \triangleq P_i = \alpha E \quad (11)$$

Si el campo polarizante en cada punto r_i tiene sus tres términos:

$$E_0(r_i) \triangleq E_{0i} = E_0 + \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[\frac{3(r_i - r_j)}{|r_i - r_j|^5} \cdot P_{0j}(r_i - r_j) + \frac{P_{0j}}{|r_i - r_j|^3} \right] \quad (12)$$

Escribiendo:

$$\mathfrak{R}_{ij} \triangleq \frac{3(r_i - r_j)}{|r_i - r_j|^5}; \quad (13)$$

$$\mathfrak{Z}_{ij} \triangleq \frac{1}{|r_i - r_j|^3}; \quad (14)$$

$$r_{ij} \triangleq r_i - r_j \quad (15)$$

y omitiendo los subíndices ij (que nunca cambian), se puede escribir de manera abreviada:

$$E_0 = E + \sum \mathfrak{R} [\alpha E] r + \sum \mathfrak{Z} [\alpha E] r \quad (16)$$

Que a su vez induce la polarización:

$$P_1 = \alpha E + \sum \Re \{ \alpha^2 E \} r + \sum \Im \{ \alpha^2 E \} \quad (17)$$

⇒

$$E_1 = E + \sum \Re \{ \alpha E + \sum \Re \{ \alpha^2 E \} r + \sum \Im \{ \alpha^2 E \} \} r + \sum \Im \{ \alpha E + \sum \Re \{ \alpha^2 E \} r + \sum \Im \{ \alpha^2 E \} \}$$

$$E_1 = E + \sum \Re \{ \alpha E \} r + \sum \Re \{ \sum \Re \{ \alpha^2 E \} r \} r + \sum \Re \{ \sum \Im \{ \alpha^2 E \} \} r + \sum \Im \{ \alpha E \} + \sum \Im \{ \sum \Re \{ \alpha^2 E \} r \} + \sum \Im \{ \sum \Im \{ \alpha^2 E \} \} \quad (18)$$

Que induce la polarización:

$$P_2 = \alpha E + \sum \Re \{ \alpha^2 E \} r + \sum \Re \{ \sum \Re \{ \alpha^3 E \} r \} r + \sum \Re \{ \sum \Im \{ \alpha^3 E \} \} r + \sum \Im \{ \alpha^2 E \} + \sum \Im \{ \sum \Re \{ \alpha^3 E \} r \} + \sum \Im \{ \sum \Im \{ \alpha^3 E \} \} \quad (17)$$

⋮

⋮

$$P_n = \alpha E + \sum \Re \{ \alpha^2 E \} r + \dots + \sum \Re \{ \dots \{ \alpha^{n+1} E \} r \dots \} r + \sum \Im \{ \alpha^2 E \} + \dots + \sum \Im \{ \dots \{ \alpha^{n+1} E \} \dots \} \quad (18)$$

⇒ en el límite cuando $n \rightarrow \infty$

$$P_n - P_{n-1} = \sum \Re \{ \dots \{ \alpha^{n+1} E \} r \dots \} r + \sum \Im \{ \dots \{ \alpha^{n+1} E \} \dots \} = 0 \quad (19)$$

∴ esta serie también converge siempre que $\alpha < 1$ ya que el valor de los productos con \Re y con \Im siempre podrá ser rebasado a partir de alguna potencia de α .

3ª Aproximación para α compleja

En este caso α pertenece a los números complejos. Encontrar la expresión analítica para el n-ésimo término de la serie resulta fácil considerando la parte real y la parte imaginaria casi por separado.

⇒

$$E = E' + iE'' \quad (20)$$

y

$$\alpha = \alpha' + i\alpha'' \quad (21)$$

Así que:

$$P_0 = \alpha E = (\alpha' + i\alpha'')(E' + iE'') = \alpha' E' + i\alpha'' E' \quad (22)$$

Ahora bien:

$$P_0 = \alpha' E' + i\alpha'' E' = P_0' + i P_0'' \quad (23)$$

y con ello calcular el nuevo campo eléctrico:

$$E_0 = E + \sum \Re [P_0' + i P_0''] r + \sum \Im [P_0' + i P_0''] r$$

$$E_0 = E + \sum \Re [P_0'] r + i \sum \Re [P_0''] r + \sum \Im [P_0'] + i \sum \Im [P_0''] r$$

$$E_0 = E + \sum \Re [P_0'] r + \sum \Im [P_0'] + i \{ \sum \Re [P_0''] r + \sum \Im [P_0''] r \} \quad (24)$$

∴

$$E_0 = E + E_0' + i E_0'' \quad (25)$$

Así que:

$$P_1 = \alpha E_0 = (\alpha' + i\alpha'')(E_0' + i E_0'') \quad (26)$$

∴

$$P_1 = \alpha' E_0' - \alpha'' E_0'' + i \{ \alpha'' E_0' + \alpha' E_0'' \} = P_1' + i P_1'' \quad (27)$$

Aplicando este mismo sistema una y otra vez se obtiene el valor n-ésimo de la polarización (y del campo eléctrico).

Los términos de la serie así generada son del mismo tipo que en los casos anteriores, cada término tiene una potencia de α , así que converge absolutamente, aunque escribir el n-ésimo término sea engorroso por contener toda clase de combinaciones de \Re y de \Im .

De hecho este método se usa en el programa de cálculo numérico de la polarización; y es que resulta sumamente económico en cuanto a los requerimientos de memoria, pues sólo se almacenan la parte real y la parte imaginaria de los términos sucesivos.

Apéndice 5

Pruebas de Cálculo

Para verificar el buen funcionamiento del programa de Evaluación Numérica realizado en Visual C++ se propone un caso cuya solución analítica pueda conocerse y se compara la solución obtenida de las dos maneras, mediante el programa y mediante la solución analítica.

Caso Analítico

Así por ejemplo, si se propone un conjunto de osciladores dispuestos en línea recta y equidistantes a distancia $|r| = .154$ nm podría escribirse:

$$E(r) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{3nr}{|nr|^3} \cdot P_{0i}(nr) + \frac{P_{0i}}{|nr|^3} \right] \quad (28)$$

Haciendo P_{0i} constante se puede escribir:

$$E(r) = P_{0i} \sum_{i=1}^N \left[\frac{3nr}{|nr|^3} + \frac{1}{|nr|^3} \right] \quad (29)$$

o bien, simplemente:

$$E(r) = P_{0i} [3nr \zeta(5) + \zeta(3)] \quad (30)$$

Donde, desde luego la función $\zeta(s)$ es la función ζ de Riemann definida como:

$$\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s} \quad (31)$$

Ya que el programa simulador sólo maneja 9000 elementos habrá que truncar la serie; o bien, sacar la diferencia entre la serie completa y la que empieza en 9000 y va hasta infinito. Para ello se escribió el pequeño programa siguiente que calcula el valor que toma la ecuación (29) cuando $E = (1,0,0)$; y K va de 1 hasta 9000.

```
CLS : E = 1: S = E
FOR K = 1 TO 9000
S = S + 3 * K * .154 / (K ^ 5) - 1 / (K ^ 3)
PRINT K, S
NEXT K
```

La serie converge rápidamente, aproximadamente cuando K esta entre 4750 y 550, al valor: $E = (.297979, 0, 0)$.

Caso Numérico

Para obtener el comportamiento de 9000 dipolos dispuestos en una línea recta, orientada según el eje X y equidistantes a una separación equivalente al doble del enlace iónico del carbono; es decir, a 0.154 nm, se escribió un programa en QBasic que genera las coordenadas de este conjunto.

El programa se presenta a continuación:

```
REM DIPOLOS EQUIDISTANTES EN UNA RECTA
REM
GOSUB INICIO: GOSUB CONSTANTES: GOSUB COSNIDELPROG:
GOSUB PRESENT: GOSUB MARCO: GOSUB SO

REM Valores Iniciales
REM Hex gonos por anillo, número de anillos y tamaño del hex gonos
NL = 12: ANI = 36: RH = .154

DIM RIX(9000): DIM RIY(9000): DIM RIZ(9000)
FOR BB = 1 TO 9000
  RIX(BB) = RH * BB: RIY(BB) = 0: RIZ(BB) = 0
NEXT BB

REM ESCRIBIR
CLS
OPEN "PRUE.DAT" FOR OUTPUT AS #1
PRINT #1, 9000
FOR JJ = 1 TO 9000
  PRINT #1, RIX(JJ), RIY(JJ), RIZ(JJ)
NEXT JJ
CLOSE #1
REM RETURN

END
```

Con los resultados obtenidos, es decir las 9000 coordenadas obtenidas, se realizó una corrida del programa de Evaluación Numérica de la polarización de cada uno de los átomos. Los resultados coinciden con los encontrados para el caso analítico.

Los valores de la polarización de cada átomo son nulos en las direcciones Y y Z y son constantes en la dirección X siendo simplemente la constante de polarización multiplicada por el valor del campo.

Entonces se tiene en ambos casos, que en un arreglo de dipolos ordenados en línea recta y equidistantes, e inmersos en un campo eléctrico con única componente en esa dirección no hay un campo local, o bien es también pequeño que se puede despreciar.

Esta pequeña prueba ha servido para constatar el buen funcionamiento del programa de Evaluación Numérica, aunque como sabemos es tan simple que difícilmente se tendrían problemas en los cálculos.

Apéndice 6

Comparación con un Caso Ideal

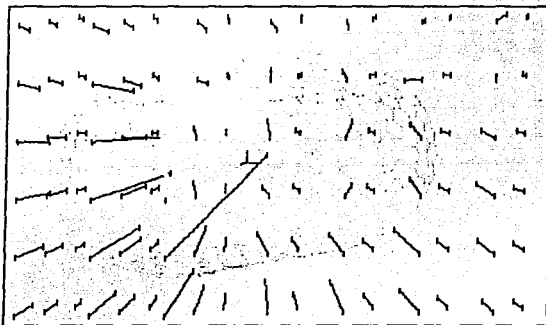
En este apéndice lo que nos interesa es plantear la pregunta de si se puede considerar un nanotubo de carbono como si fuese un cilindro hueco de material dieléctrico y resolver simplemente las ecuaciones de Maxwell para conocer el campo eléctrico en sus proximidades.

Al igual que para el caso de una esfera hueca se encuentra una expresión para el potencial dentro y fuera del cilindro que conducen al resultado[36]:

$$E = 4 \epsilon E_0 / [(\epsilon + 1)^2 - (\epsilon - 1)^2(b/a)^2] \quad (32)$$

que es homogéneo tanto en el interior como en el exterior y en la dirección del campo inicial que en este caso coincide con el eje del cilindro.

Para el caso de un nanotubo de carbono, una representación del campo eléctrico en sus proximidades es como sigue:



Simulación del campo eléctrico en torno a un nanotubo de carbono.

Por ser diferente, un campo no homogéneo ni en una sola dirección, la conclusión es que los nanotubos no pueden ser tratados como cilindros uniformes y huecos de material dieléctrico y por ello ameritan el uso de tan variados métodos de estudio.

Referencias

1. James R. Chelikowsky, Marc A. Ratner, *Nanoscience, Nanotechnology and Modeling*, Computing in Science & Engineering, 3, pp 40-41 (2001).
2. Deepak Srivastava, Madhu Menon, Kyeongjae, *Computational Nanotechnology With Carbon Nanotubes and Fullerenes*, Computing in Science & Engineering, 3, pp 42-55 (2001).
3. K. Lance Kelly, Ane A. Lazarides, George C. Schatz, *Computational Electromagnetics of Metal Nanoparticles and Their Aggregates*, Computing in Science & Engineering, 3, pp 67-73 (2001).
4. Gary Stix, *Little Big Science*, Scientific American, Special Edition, pp 26-31. (September 2001).
5. George M. Whitesides, J. Christopher Love, *The Art of Building Small*, Scientific American, Special Edition, pp 33-41. (September 2001).
6. Michael Roukes, *Plenty of Room, Indeed*, Scientific American, Special Edition, pp 42-50. (September 2001).
7. Charles M. Lieber, *The Incredible Shrinking Circuit*, Scientific American, Special Edition, pp 51-56. (September 2001).
8. A. Paul Alivisatos, *Less is More in Medicine*, Scientific American, Special Edition, pp 59-65. (September 2001).
9. Eric Drexler, *Machine-Phase Nanotechnology*, Scientific American, Special Edition, pp 66-67. (September 2001).
10. Richard E. Smalley, *Of Chemistry, Love and Nanorobots*, Scientific American, Special Edition, pp 68-69. (September 2001).
11. George M. Whitesides, *The Once and Future Nanomachine*, Scientific American, Special Edition, pp 70-75. (September 2001).
12. Steven Ashley, *Nanobot Construction Crews*, Scientific American, Special Edition, pp 76-77. (September 2001).
13. Graham P. Collins, *Shamans of Small*, Scientific American, Special Edition, pp 78-83. (September 2001).

14. Martín Solís-Pérez, Cecilia Noguez, *Propiedades Electrónicas de la Superficie de Germanio (111) Reconstruida 2x1*, Revista Especializada en Ciencias Químico-Biológicas 3(1):48-59, 2000.
15. Cecilia Noguez, Ivan Sosa, Ruben Barrera, *Light Scattering by Isolated Nanoparticles with Arbitrary Shapes*, Instituto de Física, UNAM. Febrero del 2002.
16. Yao Z., Postma HWCh, Balents L Dekker C., *Carbon Nanotube Intramolecular Junctions*, Nature, Vol. 402, no. 6759. (November 2002).
17. B. Q. Wei, R. Vajtai, Y. Jung, J. Ward, *Organized Assembly of Carbon Nanotubes*, Nature, Vol. 416. (April 2002).
18. Ming Su, Yan Li, Maynor B., Baldum A., Jian Ping Lu, Jie Liu, *Lattice-oriented Growth of Single-Walled Carbon Nanotubes*, Journal of Physical Chemistry B, Vol. 104, no. 28. (July 2000).
19. Yiming Li, Woong Kim, Yuegang Zhang, Ronaldi M. Dunwei Wang, *Growth of Single-Walled Carbon Nanotubes from Discrete Catalytic Nanoparticles of Various Sizes*, Journal of Physical Chemistry B, Vol. 105, no. 46. (November 2001).
20. Slepyan Gya, Maksimenko SA, Lakhtakia A., Yevtushenko OM., Gusakov AV., *Electronic and Electromagnetic Properties of Nanotubes*, Physical Review B-Condensed Matter, Vol. 57, no. 16. (April 1998).
21. Miyamoto Y., Rubio A., Louie SG., Cohen ML., *Self-Inductance of Chiral Conducting Nanotubes*, Physical Review B-Condensed Matter, Vol. 60, no. 19. (November 1999).
22. Lambin Ph., Meunier V., Rubio A., *Electronic Structure of Polychiral Carbon Nanotubes*, Physical Review B-Condensed Matter, Vol. 62, no. 8. (Agosto 2000).
23. Lin MF, *Optical Spectra of Single-Wall Carbon Nanotube Bundles*, Physical Review B-Condensed Matter, Vol. 62, no. 19. (November 2000).
24. A. M. Rao, E. Richter, *Diameter-Selective Raman Scattering from Vibrational Modes in Carbon Nanotubes*, Science, Vol. 275 (January 1997).

25. Hari Singh Nalwa (Editor), *Nanostructured Materials and Nanotechnologies*, P. M. Ajayan, *Carbón Nanotubes Chapter 8*. Academic Press 2002.
26. Hecht, *Óptica*, Addison-Wesley, 2000.
27. Reitz, Milford, Christy, *Fundamentos de la Teoría Electromagnética*, Addison-Wesley, 1999.
28. Jackson, *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons, New York Wiley & Sons, New York, 1975.
29. R. P. Feynman, *Lectures on Physics vol. III*, Addison-Wesley, 1987.
30. Paul Ander, Anthony J. Sonnessa, *Principios de Química*, Editorial Limusa, México, 1995.
31. A. J. Diefenderfer, *Instrumentación Electrónica*, Editorial Interamerica, 2ª edición, 1990.
32. M. Morris Mano, *Lógica Digital y Diseño de computadores*, Prentice-Hall Hispanoamericana, 1982.
33. Francisco Javier Ceballos Sierra, *Curso de Programación GW BASIC/BÁSICA*, Macrobit, México 1990.
34. Brian W. Kernighan, Dennis M. Ritchie, *El Lenguaje de Programación C*, Prentice-Hall Hispanoamericana, México, 1991.
35. Eugene Veklerov, Olga Pekelny, *Lenguaje C*, EDUNSA, España, 1991.
36. Landau y Lifshitz, *Electrodinámica de los Medios Continuos*, Volumen 8. Editorial Reverté S.A.