



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

USO DEL CÓMPUTO PARA EL DISEÑO DE NANOANTENAS A BASE DE GRAFENO

TESIS

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

RESENTA:

MELISA CARMEN VARGAS OLIVA

TUTOR:

**DRA. SUEMI RODRÍGUEZ ROMO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN**

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX. NOVIEMBRE 2018



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

AGRADECIMIENTOS

**Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por la beca otorgada para la realización de mis estudios de maestría.*

**Al posgrado en Ciencia e Ingeniería de la computación de la Universidad Nacional Autónoma de México por brindarme la oportunidad de crecimiento y desarrollo profesional en este campo del conocimiento.*

**Al M. en I. Andrés Andrade Vallejo, por su invaluable amistad e incondicional apoyo para guiar esta etapa de mi vida y enriquecerla con sus conocimientos y experiencia.*

**A mi hermana Grecia, por su cariño, consejos, ánimo, comprensión y apoyo incondicional.*

**A Camila y Arturo Jr. Por darme grandiosos días de felicidad, diversión y enseñanzas.*

**A mi Madre y hermanos por el apoyo y las reuniones grandiosas que pasamos.*

**A mis amigos, por los ánimos y apoyo para no desistir en este proyecto que iniciamos juntos.*

ÍNDICE

AGRADECIMIENTOS.....	I
ÍNDICE DE FIGURAS	V
GLOSARIO DE TÉRMINOS.....	VII
INTRODUCCIÓN.....	1
MOTIVACIÓN.....	3
OBJETIVOS	4
Objetivo general	4
Objetivos particulares	4
HIPÓTESIS	5
1. ANTECEDENTES.....	7
1.1 Grafeno	7
1.2 Teoría de grafos	10
1.2.1 Índices Topológicos del grafeno.....	10
1.3 Nanoantenas hechas a base de grafeno.....	13
1.4 Conclusión	17
2. MARCO TEÓRICO	19
2.1 Características del Grafeno.....	19
2.1.1 Estructura geométrica del grafeno	19
2.2 Confinamiento cuántico de los electrones del grafeno	21
2.3 Fermiones de Dirac	22
2.4 Métodos de obtención del grafeno	23
2.5 Teoría de grafos aplicada al grafeno	24
2.5.1 Índice Topológico De Zagreb (ZI)	25
2.5.2 Índice Múltiple Zagreb.....	26
2.5.3 Índice Aumentado Zagreb	26
2.5.4 Índice Hiper Zagreb	26
2.5.5 Índice Armónico.....	27

2.5.6 Índice Wiener.....	27
2.6 Nanoantenas de parche hechas a base de grafeno.....	28
2.6.1 Dispersión de ondas de los plasmones polarizados superficiales (SPP)	29
2.6.2 Hamiltoniano.....	30
2.6.3 Sustrato de la nanoantena de grafeno	32
2.6.4 Potencial Químico	32
2.6.5 Tiempo de Relajación.....	32
2.6.6 Parámetros de una antena.....	32
2.6.6.1 Banda de Frecuencia.....	33
2.6.6.2 Directividad y Ganancia	33
2.6.6.3 Diagrama de Radiación o Patrón de Radiación.....	33
2.6.6.4 Ancho del Haz.....	34
2.6.6.5 Impedancia.....	34
2.6.6.6 Eficiencia de la Antena.....	35
2.6.6.7 Polarización	35
2.6.6.8 Campos de Inducción de Radiación.....	35
2.6.6.9 Longitud Eléctrica y Longitud Física.....	36
2.6.6.10 Ancho de Banda	36
2.6.6.11 Intensidad del Campo	36
3. METODOLOGÍA	41
3.1 Método computacional para el diseño de nanoantenas.....	41
3.2 Diagrama de flujo de la metodología del diseño	41
3.3 Índices topológicos del grafeno	43
3.3.1 Índice Zagreb para el Grafeno	43
3.3.2 Índices Múltiples de Zagreb para el Grafeno.....	44
3.3.3 Índices Aumentado de Zagreb para el Grafeno	45
3.3.4 Índice Hiper Zagreb para el Grafeno	45

3.3.5 Índice Armónico para el Grafeno	45
3.3.6 Índice Wiener para el Grafeno	46
3.4 Correlación de los índices topológicos del grafeno	47
3.5 Análisis y diseño de una nanoantena hecha a base de grafeno	48
3.6 Implementación del algoritmo para el diseño de una nanoantena.....	49
4. RESULTADOS	53
4.1 Resultados del método numérico del diseño de la nanoantena hecha a base de grafeno y su correlación con los índices topológicos.	53
4.2 Propuesta de una nanoantena hecha a base de grafeno y su conexión con los índices topológicos.	56
5. CONCLUSIONES	65
5.1 Trabajo Futuro	66
6. BIBLIOGRAFÍA	67

ÍNDICE DE FIGURAS

<i>Figura 2.1 Estructura cristalina del grafeno.</i>	21
<i>Figura 2.2 Fuente: Elaboración propia. Estructura de bandas del grafeno en toda la primera zona de Brillouin obtenida del algoritmo programado en Matlab. (a) Forma hexagonal del grafeno en 3D y (b) el grafeno es una red con dos átomos (A y B) por celda unidad. Los orbitales s y p forman las bandas σ y π.</i>	23
<i>Figura 2.3 Fuente: Elaboración propia. Grafo hexagonal con vértices (puntos negros) y aristas (líneas amarillas).</i>	24
<i>Figura 2.4. Nanoantena SPP de parche basada en grafeno. Imagen tomada de: IEEE Journal on Selected Areas in Communications/Supplement, Part 2, Vol. 31, No. 12, December 2013.</i>	29
<i>Figura 3.1. Fuente: Elaboración propia. Diagrama de flujo de la metodología de diseño de una nanoantena hecha a base de grafeno.</i>	42
<i>Figura 3.2 Fuente: Elaboración propia. Datos programados en el archivo de Matlab de los índices topológicos.</i>	47
<i>Figura 3.3. Fuente: Elaboración propia. (a) Estructura de bandas π de los bordes en armchair y (b) estructura de bandas π de los bordes en zig-zag, graficas obtenidas del algoritmo programado en MATLAB.</i>	48
<i>Figura 3.4 Fuente: Elaboración propia. Datos de ingreso en el archivo de Matlab, tomados de Luke Zakrajsek [42].</i>	50
<i>Figura 3.5 Fuente: Elaboración propia. Código Matlab utilizado para el diseño simple de una antena de parche.</i>	50
<i>Figura 3.6. Fuente: Elaboración propia. Resultados de la compilación de los datos de entrada correspondientes Luke Zakrajsek [42].</i>	50
<i>Figura 3.7 (a) Resultados obtenidos de Luke Zakrajsek, et. al [42], (b) Fuente: Elaboración propia. Resultados de la compilación.</i>	51
<i>Figura 4.1 Fuente: Elaboración propia. Campo magnético de la geometría del parche de grafeno [42].</i>	53
<i>Figura 4.2 Fuente: Elaboración propia. (a) Índices topológicos en un arreglo del parche en configuración armchair, (b) aumento de la estructura de bandas.</i>	54
<i>Figura 4.3 Fuente: Elaboración propia. Índices topológicos en un arreglo del parche en configuración zigzag y de la estructura de bandas.</i>	55
<i>Figura 4.4 Fuente: Elaboración propia. Archivo de salida de los resultados obtenidos del código programado en Matlab, de la conductividad del grafeno con los parámetros de una nanoantena propuesta por Luke Zakrajsek, et al. [42].</i>	56
<i>Figura 4.5. Fuente: Elaboración propia. Patrón de radiación 3D de la directividad.</i>	57
<i>Figura 4.6 Gráfico polar 2D para la ganancia en dB en el plano de acimut $\varphi = 0^{\circ}$ y $\varphi = 90^{\circ}$.</i>	57
<i>Figura 4.7 Fuente elaboración propia. Resultados obtenidos de la Pérdida de retorno de la nanoantena diseñada.</i>	58

<i>Figura 4.8 Fuente: Elaboración Propia. Resultados obtenidos del Patrón de radiación de la nanoantena diseñada con geometría cuadrada.....</i>	<i>58</i>
<i>Figura 4.9 Fuente: Elaboración propia. Patrón de radiación del diseño del parche de grafeno de la nanoantena.</i>	<i>59</i>
<i>Figura 4.10 Fuente: Elaboración propia. Geomerría del diseño de la nanoantena de parche de grafeno de los parámetros propuestos.....</i>	<i>59</i>
<i>Figura 4.11 Fuente: Elaboración propia. Resultado de la estructura de banda de la Nanocinta en configuración zigzag.....</i>	<i>60</i>
<i>Figura 4.12 Fuente: Elaboración propia. Conductividad de la nanoantena propuesta, interbanda e intrabanda.....</i>	<i>61</i>
<i>Figura 4.13. Fuente : Elaboración propia. Estructura de bandas del grafeno obtenida del algoritmo programado en MATLAB. (a) parte positiva o superior (color rojo) representa la banda de conducción, (b) parte negativa o inferior (color azul), representa la banda de valencia, (c) estructura de bandas acopladas.</i>	<i>62</i>

GLOSARIO DE TÉRMINOS

A

Alotropía: propiedad de algunos elementos químicos de poseer estructuras químicas diferentes, en el mismo estado de agregación de la materia [65].

Anisotropía: es la propiedad general de la materia según la cual cualidades como: elasticidad, temperatura, conductividad, velocidad de propagación de la luz, etc. varían según la dirección en que son examinadas. Algo anisótropo podrá presentar diferentes características según la dirección. La anisotropía de los materiales es más acusada en los sólidos cristalinos, debido a su estructura atómica y molecular regular [66].

Aproximación Tight-Binding: También llamada aproximación de ligaduras fuertes asume que los electrones más externos están en gran parte localizados por sus núcleos atómicos respectivos y, por ello, descritos por sus orbitales atómicos con niveles de energía discretos. Sin embargo, los átomos no están aislados, sino que los orbitales electrónicos de los átomos se traslapan con los de sus átomos vecinos en las N celdas unidad, produciendo que los N niveles de energía discretos se amplíen en bandas de energía cuasi continuas con N estados por banda debido al principio de exclusión de Pauli.

Arista: Es el segmento de recta que limita la cara, también conocida como lado, de una figura plana. En la geometría sólida se le llama arista al segmento de línea donde se encuentran dos caras.

B

Bandas Gap (brecha energética): Las curvas parabólicas que se ven en la figura 4.13, se conocen como bandas de energía. La inferior es la banda de valencia y la superior es la banda de conducción. Si el nivel de Fermi está en la banda de conducción nos encontramos ante un metal ya que los electrones circulan libremente por esta banda. En el caso de los semiconductores y los aislantes el nivel de Fermi está entre ambas bandas de conducción, y únicamente se diferencian en la anchura de la brecha, llamada *gap* o banda prohibida. En los semiconductores tenemos un *gap* no demasiado grande, lo que permite dar a los semiconductores la suficiente energía para conducir corriente eléctrica; mientras que, en los aislantes, el *gap* es mucho mayor, y es necesario un aporte energético superior, lo que dificulta la conducción [69].

D

Dispersión de los Fermiones Dirac sin masa: Para los fermiones Dirac sin masa, el gap es cero y existe una relación estrecha entre el spin y el movimiento de la partícula: el spin solo puede ser dirigido a lo largo de la dirección de la propagación (es decir, por partículas) o sólo opuesto

a él. Los plasmones polarizados superficiales (SPP por sus siglas en inglés) en el grafeno se comporten como partículas relativísticas sin masa en reposo y viajan a 10^6 m/s.

E

Efecto Hall Cuántico Fraccionario: Los plasmones polarizados superficiales en el grafeno al comportarse como fermiones Dirac sin masa da la existencia de estados de energía cero lo cual conduce a un efecto Hall cuántico anómalo con una cuantización de $\frac{1}{2}$ entero de la conductividad Hall en lugar de una de un entero [67].

Efecto Hall Cuántico: Se conoce como efecto Hall cuántico se explica en términos de orbitales de partículas solas, de un electrón en un campo magnético empleado para caracterizar los materiales conductores de la electricidad. Es utilizado para determinar tanto el signo como los portadores de carga.

Electrones de valencia: Son los electrones que se encuentran en la capa de mayor nivel de energía del átomo, siendo estos los responsables de la interacción entre átomos de distintas especies o entre los átomos de una misma. Los electrones en los niveles de energía externos son aquellos que serán utilizados en la formación de compuestos, a los cuales se les denomina electrones de valencia.

F

Fermión: Un fermión es una partícula subatómica que tiene un *spin* semi-entero y se rige por principios estadísticos que establecen que un estado energético particular puede ser ocupado por una sola partícula o por su pareja opuesta.

Fonón: Es una cuasipartícula o modo cuantizado vibratorio que se halla en redes cristalinas como la red atómica de un sólido. El estudio de los fonones es una parte importante en la física del estado sólido debido a que desempeñan una función muy importante en muchas de sus propiedades físicas, incluidas las conductividades térmica y eléctrica.

G

Grado de un grafo: En Teoría de grafos, el grado o valencia de un vértice es el número de aristas incidentes al vértice.

Grado del vértice: El grado de un vértice en un grafo es el número de aristas incidentes a él.

Grafeno: Es un material nanométrico bidimensional dando formado por átomos de carbono. Es una hojuela cuasiplana, con pequeñas ondulaciones, dando una apariencia de un panal de abejas, con un grosor de un átomo de carbono (0.1 nm).

Grafo: En matemáticas y ciencias de la computación, un grafo (del griego *grafos*: dibujo, imagen) es un conjunto de objetos llamados vértices o nodos unidos por enlaces llamados aristas o arcos, que permiten representar relaciones binarias entre elementos de un conjunto.¹ Son objeto de estudio de la teoría de grafos.

I

Índice Topológico: Un *Índice*, se asocia a la palabra número (número que se le asocia a cada estructura molecular) y *Topológico*, indica un conjunto de elementos (dichos elementos son átomos de la estructura, separados por una distancia, llamada arista o enlace, que involucran características de unión) [64].

La topología es una rama de las matemáticas dedicada al estudio de las propiedades de los cuerpos geométricos que permanecen inalterados por transformaciones continuas. En esta tesis se utiliza la topología como una herramienta de la teoría de grafos para encontrar correlaciones entre estructuras moleculares, basándose en la caracterización numérica mediante descriptores llamados índices [64].

Los índices topológicos se utilizan en el desarrollo de las relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR, siglas en inglés) en las que la actividad biológica u otras propiedades de las moléculas están relacionadas con su estructura química [64].

Isomorfismo: En matemáticas, se definen por ser morfismos $f: X \rightarrow Y$ que admiten un morfismo inverso $h: Y \rightarrow X$, inverso tanto por la derecha como por la izquierda. Dos estructuras matemáticas entre las que existe una relación de isomorfismo se llaman isomorfas.

M

Modelos de regresión multilínea: La regresión lineal múltiple trata de ajustar modelos lineales o linealizables entre una variable dependiente y más de una variable independiente. En este tipo de modelos es importante testar la heterocedasticidad, la multicolinealidad y la especificación.

P

Plasmón: El plasmón es la cuasipartícula resultado de la cuantización de las oscilaciones del plasma, de la misma forma que un fotón o un fonón son cuantizaciones de ondas electromagnéticas y mecánicas. Por tanto, los plasmones son oscilaciones de la densidad del gas de Fermi (gas de electrones libres), usualmente a frecuencias ópticas.

Plasmones Polarizados Superficialmente (SPP): Son ondas electromagnéticas guiadas a lo largo de una interfaz metal-dieléctrico y generadas por medio de una radiación incidente de alta frecuencia (Red Inalámbrica).

S

Secciones transversales de extinción: la relación de dispersión de energía de un electrón o hueco es del tipo parabólico/cuadrática; en el grafeno, la relación de dispersión de la energía

alrededor del nivel de Fermi que define la energía más alta de los orbitales moleculares ocupados por los electrones a la temperatura de 0 K es aproximadamente lineal.

Simetría quiral: La quiralidad en física, y en especial en física de partículas, es el fenómeno que describe el comportamiento de las partículas en un sistema de referencia dextrógiro, también llamado de mano-derecha, o uno levógiro o de mano-izquierda. El espín de las partículas puede ser utilizado para definir su helicidad (la helicidad es una magnitud física asociada al espín, obtenida proyectando esa magnitud vectorial sobre la dirección de momento lineal) que en el caso de ser partículas no masivas es la misma que la quiralidad. La transformación de simetría entre las dos se la llama paridad. La invarianza bajo paridad de un fermión de Dirac se llama simetría quiral.

Spin: Un spin es el momento angular intrínseco de una partícula subatómica (referente al plasmon). Como el eje intrínseco de giro puede tener dos sentidos, el spin de un fermión puede tener dos valores $1/2$ y $-1/2$ en unidades de la constante de Planck (\hbar) [68].

Susceptibilidad Magnética. Es una constante de proporcionalidad adimensional que indica el grado de sensibilidad a la magnetización de un material influenciado por un campo magnético.

V

Vértice: En teoría de grafos, un vértice o nodo es la unidad fundamental de la que están formados los grafos. Un grafo no dirigido está formado por un conjunto de vértices y un conjunto de aristas (pares no ordenados de vértices), mientras que un grafo dirigido está compuesto por un conjunto de vértices y un conjunto de arcos (pares ordenados de vértices).

INTRODUCCIÓN

Las redes de comunicaciones inalámbricas a nivel de los Terahertz (THz) proporciona muchas aplicaciones útiles para diferentes áreas como la electrónica, las telecomunicaciones, la biomedicina, el área ambiental y militar, que deberán satisfacer velocidades y tasas de transmisión de datos cada vez mayores en diversas aplicaciones y medios de propagación. Por ejemplo, la espectroscopía, la obtención de imágenes biomédicas, el suministro de medicamentos, dispositivos móviles flexibles y ligeros, la seguridad, la comunicación inalámbrica de alta velocidad, etc., por lo que se requieren de nuevos dispositivos y materiales.

En general los dispositivos a escalas nanométricas ($1 \text{ nanómetro} = 1 \text{ nm} = 1 * 10^{-9} \text{ m}$) presentan comportamientos interesantes en respuesta a las frecuencias de radio, frecuencias ópticas y variaciones mecánicas que los hace muy convenientes para la fabricación de antenas y sensores en algunas de las ya mencionadas aplicaciones [3].

El grafeno es un material nanométrico formado de átomos de carbono y enlaces covalentes, dando la apariencia de un teselado hexagonal (panal de abejas); proporciona propiedades únicas, como la transparencia óptica, la flexibilidad, alta movilidad de electrones y conductividad [9], que puede ser utilizado para el diseño y construcción de nanoantenas.

Las nanoantenas hechas a base de grafeno permiten operar eficientemente en longitudes de ondas de radio a nivel micrométrico, pero también puede darse la transmisión de los datos a nivel de los Tera Hertz, por la propagación de los plasmones polarizados superficiales, que es varios cientos de veces menor que la longitud de onda electromagnética de la misma frecuencia en la que se propagan libremente. Las dimensiones y las diferencias de velocidad de la transmisión de los datos permiten que las antenas hechas a base de grafeno sean mucho más pequeñas que las alternativas convencionales (antenas metálicas) [37].

Dicho lo anterior, el enfoque principal de esta tesis es, utilizar un sistema de cómputo para diseñar una nanoantena de parche hecha a base de grafeno asociándola con la teoría de grafos, estrictamente hablando de los índices topológicos de Zagreb, Múltiple Zagreb, Aumentado Zagreb, Hiper Zagreb, Armónico y Wiener, como descriptores moleculares para que transmitan en el rango de los Tera Hertz.

Esto es, desarrollar un modelo computacional que tome en cuenta los índices topológicos del grafeno, para predecir de forma más realista el comportamiento de una nanoantena hecha a base de grafeno, al utilizar la teoría de grafos en el diseño de una nanoantena donde se puede manipular y controlar las dimensiones, la forma geométrica y el rango de transmisión de los datos (Tera Hertz), los cuales pueden ser caracterizados a través de una herramienta de software de alto rendimiento que ofrezca un entorno de desarrollo integrado con un lenguaje de programación propio.

Este trabajo de tesis presenta la solución analítica de las ecuaciones matemáticas que correlacionan los índices topológicos del material de grafeno con diseño del parche de la nanoantena.

También se desarrolla un modelo computacional que calcula la conductividad del grafeno del diseño de la nanoantena de grafeno establecida por la ecuación de Kubo [62] (ecuación 2.22), en la que relaciona dos términos; el primer término es la intrabanda, que corresponde al proceso de dispersión del fonón y el segundo término, que es el paso de los electrones en la interbanda.

Este trabajo está dividido en cinco secciones. La primera de ellas se enfoca en dar un panorama general de los conceptos que se emplean a lo largo de todo el desarrollo de la tesis. En la segunda sección se muestra el estado del arte en términos del material de grafeno, teoría de grafos, haciendo énfasis en las nanoantenas hechas a base de grafeno y los índices topológicos como descriptores moleculares del grafeno.

Esta información se utiliza para elegir uno de los tipos de antenas que resultan representativas dentro de las aplicaciones y bandas de frecuencia mencionadas con anterioridad, las antenas de parche, una vez elegida la forma geométrica del parche de la nanoantena se realiza un análisis de su comportamiento a nanoescala.

En la sección tres se describe la metodología para realizar el diseño de una nanoantena de parche hecha a base de grafeno, es decir, consiste en realizar el código fuente de los programas realizados, escritos en un lenguaje de programación de alto rendimiento para simular el comportamiento del patrón de radiación de la antena, mediante el análisis matemático de las ecuaciones de los índices topológicos, obteniendo los parámetros de interés en este estudio.

En la sección cuatro de este proyecto se presentan los resultados obtenidos del diseño de la nanoantena utilizando los parámetros propuestos, después de la compilación de los programas formulados, para la obtención de la frecuencia de resonancia de la nanoantena y la conductividad con respecto a los índices topológicos calculados.

Por lo que el diseño de la nanoantena de parche propuesta se obtuvo una frecuencia de resonancia de alrededor de 2 Tera Hertz, y la influencia de la topología de las nanoantenas en la sección transversal es similar a la observada en el régimen de radio frecuencia (RF) de las microondas, donde el área geométrica es más pequeña.

Finalmente, en la sección cinco, se concluye que los resultados de ajustar las dimensiones de la nanoantena hecha a base de grafeno, en particular su longitud, la frecuencia de radiación se puede sintonizar en un amplio rango de los Tera Hertz. A medida que que la frecuencia es más grande la antena es más pequeña, lo que hace más difícil su construcción por las dimensiones nanométricas obtenidas.

MOTIVACIÓN

Al realizar un análisis de los trabajos de investigación de nanoantenas hechas a base de grafeno y de los índices topológicos del grafeno, presentados por diversos investigadores e instituciones, se observa que se exploran como líneas de investigación por separado.

Lo que motiva al desarrollo de esta tesis que se centra en utilizar la teoría de grafos en el diseño de una nanoantena, específicamente los índices topológicos de Zagreb, Múltiple Zagreb, Aumentado Zagreb, Hiper Zagreb, Armónico y Wiener, como descriptores moleculares de la geometría del parche para el diseño de una nanoantena hecha a base de grafeno que transmita en un ancho de banda a nivel de los Tera Hertz (THz).

El análisis del diseño se hace con un sistema de cómputo empleando el método de elementos finitos a través de una herramienta de software de alto rendimiento que ofrece un entorno de desarrollo integrado con un lenguaje de programación propio. Con la cual se puede manipular y controlar las dimensiones, la forma geométrica y el rango de transmisión de los datos (Tera Hertz). Para el estudio del comportamiento de nanoantenas hechas a base de grafeno.

OBJETIVOS

Objetivo general

Diseñar una nanoantena de parche de grafeno asociándola con la teoría de grafos, estrictamente hablando de los índices topológicos de Zagreb, Múltiple Zagreb, Aumentado Zagreb, Hiper Zagreb, Armónico y Wiener para que transmitan en el rango de los Terahertz.

Objetivos particulares

1. Análisis del estado del arte del diseño de la nanoantena de parche y teoría de grafos del grafeno.
2. Estudio de la teoría de grafos para la obtención de los índices topológicos asociados a la forma geométrica del grafeno destinados al diseño de la nanoantena.
3. Utilizar un sistema de cómputo para diseñar una nanoantena de parche hecha a base de grafeno asociándola con la teoría de grafos, estrictamente hablando de los índices topológicos de Zagreb, Múltiple Zagreb, Aumentado Zagreb, Hiper Zagreb, Armónico y Wiener, para que transmita a nivel de los Tera Hertz.

HIPÓTESIS

Existe una relación entre los índices topológicos dados por teoría de grafos (de Zagreb, Múltiple Zagreb, Aumentado Zagreb, Hiper Zagreb, Armónico y Winer) y el comportamiento de una nanoantena tal que, nos permita predecir las dimensiones, la forma geométrica y el rango de transmisión de los datos de ésta.



CAPÍTULO 1



1. ANTECEDENTES

Con el fin de tomar como base lo efectuado hasta el momento, en este capítulo se muestran los trabajos referentes al estudio del arte perteneciente a nanoantenas plasmónicas polarizadas superficialmente (SPP por sus siglas en inglés) hechas a base de grafeno. Los cuales están enfocados al análisis, comportamiento y diseño, para la transmisión de datos a escalas nanométricas.

También se presentan estudios sobre diversos trabajos relacionados con teoría de grafos, que han proporcionado una variedad de herramientas útiles, como los índices topológicos, específicamente los de Zagreb, Múltiple Zagreb, Aumentado Zagreb, Hiper Zagreb y Winer, que son los descriptores moleculares que representan a las estructuras de los compuestos químicos y que ayudan a predecir ciertas propiedades fisicoquímicas en el grafeno como el punto de ebullición, la entalpía de vaporización, la estabilidad, etc.

1.1 Grafeno

Philip Russell Wallace [1] calculó por primera vez (en 1949) la estructura electrónica de bandas del grafito. El propósito de su investigación fue desarrollar una base para la explicación de algunas de las propiedades físicas del grafito a través de la teoría de bandas de sólidos. Esta se refiere principalmente a una discusión sobre su conductividad eléctrica, pero el tratamiento dado hace posible la explicación, no solo de la conductividad eléctrica y su anisotropía sino también, de la conductividad térmica, la susceptibilidad diamagnética y la absorción óptica.

Durante los siguientes años no hubo gran avance en el desarrollo de las propiedades del grafeno por considerarse un material inestable termodinámicamente. Fue hasta el 2004 que A. K. Geim y K. S. Novoselov [2] lograron sintetizar por primera vez al grafeno, utilizando el método de exfoliación micromecánica (método de “scotch-tape”), extrayendo por medio de una cinta adhesiva el material bidimensional, y posteriormente depositándolo en un sustrato.

Dos años después (2006) L.A. Falkovsky et al. [3] presentan un cálculo analítico de la conductividad del grafeno puro en función de la frecuencia ω , del vector de onda k y de la temperatura para el rango en el que las energías relacionadas con todos estos parámetros son pequeñas en comparación con el parámetro de banda $\gamma = 3$ eV. Por lo que obtienen que las expresiones asintóticas simples que se dan en varios casos limitantes, por ejemplo, la conductividad es independiente de los parámetros de la estructura de banda γ y v_0 . Sus resultados los utilizan para explicar la dependencia de la conductividad del grafito sobre la temperatura y la presión.

Ese mismo año (2006) Victor Ryzhii [4] estudia el espectro de ondas de plasma (variaciones espaciotemporales de la densidad electrónica y campo eléctrico autoconsistente) en una heteroestructura de grafeno bloqueado con un sistema de grafeno bidimensional de electrones

degenerado (2DEG). Y determina que las heteroestructuras del grafeno bloqueadas pueden usarse en diferentes dispositivos en el rango de los Terahertz (THz) sintonizables por voltaje.

Un año después (2007), Motohiko Ezawa [5] estudia las propiedades electrónicas de derivados de grafeno que tienen bordes cerrados, como los nanodiscos hexagonales, paralelogramo y triangulares con zigzag o bordes de armchair. Su trabajo se concentra en las nanocintas en zigzag de longitud finita. Primero los clasifica tomando una cadena básica de W hexágonos de carbono conectados, y después repiten esta cadena L veces, y construyen una nanocinta indexada por un conjunto de dos enteros (W, L). Con lo que establece que no hay estados de energía cero en nanocintas de longitud finita y que los nanodiscos se pueden considerar como puntos cuánticos hechos por el grafeno.

En 2007 P. Blake et al. [6] utilizan un modelo basado en la ley de Fresnel, donde describen cuantitativamente los datos experimentales. En este artículo estudian la visibilidad del grafeno depositado en un sustrato de dióxido de silicio y muestran que depende fuertemente del espesor de SiO_2 y de la longitud de onda de la luz. Encontrando que, mediante el uso de iluminación monocromática, el grafeno puede ser aislado para cualquier espesor de SiO_2 , aunque se usan 300 nm (el estándar actual) y, especialmente ≈ 100 nm, que son los espesores más adecuados para su detección visual.

Ese mismo año (2007), Melinda et al. [7] investigan el transporte electrónico en cintas de grafeno con dibujos litográficos donde el confinamiento lateral de los portadores de carga crea un espacio de energía cerca del punto de neutralidad de carga. Las capas individuales de grafeno se ponen en contacto con electrodos metálicos y se modelan en cintas de diferentes anchuras y diferentes orientaciones cristalográficas.

Las medidas de conductancia dependientes de la temperatura muestran aperturas de energía más grandes que se abren para cintas más estrechas. Con ello determinan que los tamaños de estos espacios de energía se obtienen midiendo la conductancia en el régimen de respuesta no lineal a bajas temperaturas.

Para 2008 George W. Hanson [8] obtiene una solución exacta para el campo electromagnético del grafeno debido a una corriente eléctrica en presencia de un modelo de conductividad superficial en el que representan una superficie de conductividad bilateral infinitesimalmente delgada, local e isotrópica.

Para el grafeno aislado caracterizado por la conductividad superficial compleja, George W. Hanson [8] establece la existencia de una onda superficial transversal-eléctrica apropiada si y sólo si la conductividad mayor a cero (asociada con la conductividad interbanda), y una onda superficial magnética transversal adecuada para para la conductividad compleja menor a cero (asociada con la conductividad intrabanda).

En el año 2009 A. H Castro Nieto et al. [9] revisan los aspectos teóricos básicos del grafeno, con excitaciones electrónicas bidimensionales inusuales de tipo Dirac y establecen que los electrones de Dirac pueden controlarse mediante la aplicación de campos eléctricos y magnéticos externos, o alterando la geometría y/o topología de la muestra. También argumentan que los electrones de Dirac se comportan de forma inusual en el efecto túnel,

confinamiento y efecto Hall cuántico entero, donde las propiedades electrónicas de las pilas de grafeno varían según el orden de apilamiento, el número de capas y de los estados de superficie del borde en el grafeno, que dependen de la terminación del borde, en zigzag o armchair, por lo que esto afecta a las propiedades físicas de las nanocintas. Por consiguiente, establecen que diferentes tipos de desorden modifican la ecuación de Dirac que conduce a propiedades espectroscópicas y de transporte inusuales.

Un año después (2010) Katsunori Wakabayashi et al. [10] investigan los efectos a nanoescala sobre las propiedades físicas de las nanocintas de grafeno, aclaran el papel de los límites de los bordes, establecen que la orientación del borde del grafeno determina el espectro de energía de los π -electrones. Los bordes en zigzag poseen estados de borde localizados con energías cercanas al nivel de Fermi. También proporcionan soluciones analíticas para la dispersión electrónica y la función de onda correspondiente en nanofibras de grafeno con su derivación detallada utilizando la mecánica ondulatoria basada en el modelo de estrecha unión.

Recientemente, los avances en la electrónica basada en el grafeno han abierto la puerta a las comunicaciones electromagnéticas a nanoescala. En 2010 Josep Miquel Jornet [11] estudia un nuevo marco mecánico cuántico para analizar las propiedades de los nanotubos de carbono (CNTs, por sus siglas en inglés) como antenas nanodipolo. Para esto, primero obtiene las propiedades de la línea de transmisión del CNT usando el modelo de unión fuerte en función de la longitud, diámetro y geometría del borde del CNT.

Posteriormente, se calculan los parámetros pertinentes de la antena, tales como la frecuencia de resonancia fundamental y la impedancia de entrada, y se comparan con los de una antena tipo nanoparache hecha de una nanocinta de grafeno (GNR por sus siglas en inglés) con dimensiones similares [11].

Los resultados de Josep Miquel Jornet [11], muestran que para un tamaño máximo de antena del orden de varios cientos de nanómetros (el tamaño máximo esperado para un nanodispositivo), tanto una antena nanodipolo como una nanoparache serán capaces de radiar ondas electromagnéticas en la banda de los terahertz.

Un año más tarde (2011) F. H. L. Koppens et al. [12] reportan una fuerte interacción de los plasmones en el grafeno y predicen altas tasas de decaimiento sin precedentes de emisores cuánticos en la proximidad de una lámina de carbono en secciones transversales de extinción que exceden el área geométrica en cintas de grafeno y discos de tamaño nanométrico. Establecen que los plasmones de grafeno proporcionan una alternativa adecuada a los plasmones de metales nobles porque exhiben un confinamiento mucho mayor y distancias de propagación relativamente largas, con la ventaja de ser altamente ajustables a través de la activación electrostática. Proporcionan resultados que son la base para el campo emergente y potencialmente de gran alcance de los plasmones polarizados de grafeno, que ofrecen una plataforma ideal para la electrodinámica cuántica de cavidades que respaldan la posibilidad de dispositivos de un solo plasmón.

Dos años después (2012), en un trabajo que presentan K. S. Novoselov et al. [13] revisan los avances recientes del Grafeno y el desarrollo de métodos de producción, y analizan críticamente la viabilidad de varias aplicaciones de Grafeno. Sin embargo, indican que los

materiales de referencia establecidos, solo se reemplazarán si las propiedades del grafeno, por atractivas que sean, pueden traducirse en aplicaciones que sean lo suficientemente competitivas como para justificar el costo y la interrupción de los procesos industriales existentes.

En un estudio del grafeno hecho en 2016 por H. G. Roberto [14] sobre las propiedades electrónicas a bajas energías, observa a los enlaces que dan lugar al grafeno, su estructura periódica y electrónica. En su estudio obtiene la relación de dispersión característica de este material mediante la aproximación tight-binding. Esto ayuda a entender por qué sus electrones se mueven con gran velocidad, como si no tuvieran masa. Estableciendo una ecuación de Dirac-Weyl, con la cual se describe al grafeno a bajas energías.

1.2 Teoría de grafos

La teoría de grafos ha proporcionado una variedad de herramientas útiles, como los índices topológicos que describen el comportamiento de las moléculas que ayudan a predecir ciertas propiedades fisicoquímicas como el punto de ebullición, la entalpía de vaporización, la estabilidad molecular, etc.

A continuación, se presentan los trabajos relacionados a los índices topológicos del grafeno.

1.2.1 Índices Topológicos del grafeno

En el año 2004, Iban Gutman et al. [15] establecen que el grafo invariante M1, conocido bajo el nombre de primer índice de Zagreb, es igual a la suma de los cuadrados de los grados de los vértices de los respectivos grafos (moleculares).

En el trabajo realizado en 2007 por J. Braun et al. [16] calculan los coeficientes de correlación entre muchos índices topológicos y descriptores moleculares de otros tipos, sobre la base de datos para un conjunto muy grande y diverso de compuestos. Establecen que la similitud de 608 descriptores moleculares (incluidos los índices topológicos y geométricos) se miden utilizando coeficientes de correlación. Sus cálculos se basan en una biblioteca de 10946 compuestos diversos.

Ese mismo año (2007) Y. Hatsugai et al. [17] describen los aspectos topológicos de las propiedades electrónicas del grafeno, incluidos los efectos de borde, con el modelo de unión fuerte en una red de panal de abejas y sus extensiones. Primero muestran la presencia del par de dispersiones de Dirac sin masa; que es el origen de un peculiar efecto Hall cuántico (QHE). Después obtienen la dispersión de Dirac sin masa, solo alrededor de energía cero ($E = 0$), en el que QHE anómalo lo asocian con el cono de Dirac. El QHE permanece en un amplio rango del potencial químico, para predecir una transición al comportamiento de fermiones ordinarios acompañados de grandes saltos en el QHE con un cambio de signo.

Posteriormente, Y. Hatsugai et al. [17] establecen una coincidencia entre el efecto Hall cuántico en el volumen y el efecto Hall cuántico para los estados de borde, que es otro efecto topológico. Demuestran explícitamente que los estados de borde $E = 0$ en una red de panal de abejas en campo magnético cero persisten en el campo magnético. También identifican el origen topológico de la duplicación del fermión en términos de la simetría quiral.

Un año después (2008) Jiannis K. Pachos [18] establece que los efectos topológicos pueden codificarse en el grafeno, como la generación de vórtices y la fraccionalización de carga. Además, presenta un análisis del teorema del índice Atiyah-Singer y revisan sus diversas aplicaciones para el grafeno. En sus resultados establecen que el índice es la fraccionalización de la carga, la cual normalmente se conoce a partir del efecto Hall cuántico fraccionario. También hacen mención de que la fraccionalización de carga da lugar a la posibilidad de tener grafeno a partir de cualquier factor que a diferencia de bosones o fermiones muestra estadísticas fraccionales.

Posteriormente Bo Zhou y Nenad Trinajstić en 2010 [19] informan algunas propiedades de otros grafos invariantes para el índice general de conectividad de suma. Especialmente los límites inferior y superior, los cuales generalizan tanto el índice de conectividad suma (sum) como el primer índice de Zagreb. Ellos obtienen los límites para la suma de los índices de suma-conectividad general de un grafo y su complemento en términos del número de vértices del grafo a partir del método de Nordhaus-Gaddum.

Por su parte, inspirados por el trabajo reciente sobre el índice de conectividad átomo-enlace (ABC), Boris Furtula et al. [20] en el año 2010, proponen un nuevo índice topológico, conocido como el índice de Zagreb aumentado (AZI). En el que obtienen los límites estrictos superior e inferior para los árboles químicos. Además, demuestran que, entre todos los árboles, la estrella tiene el valor mínimo de AZI. Y que, la caracterización de los árboles con el índice máximo de Zagreb aumentado sigue siendo un problema abierto para futuras investigaciones.

Un año después (2011), Franco Cataldo et al. [21] topológicamente caracterizan completamente el enrejado infinito de grafeno. Esto mediante el cálculo de polinomios, utilizando el índice Wiener en su retícula; el cual actúa como un potencial topológico puro para determinar la estabilidad química relativa de la capa de grafeno en comparación con el nanocono de tipo fullereno fabricado con un número similar de anillos. Sus consideraciones se realizan en espacios topológicos duales y directos. Obtenen una nueva malla invariante, que predice un cierto grado de reactividad en el anillo fullerénico pentagonal.

Un año después (2011), Gutman I. [22] presenta un análisis matemático para contribuir a una mejor comprensión de los índices multiplicativos de Zagreb. Para ello analiza grafos simples, que son finitos y no dirigidos, así como, grafos sin bucles y con múltiples bordes. Obteniendo las propiedades de los índices multiplicativos de Zagreb; los cuales no se habían estudiado. Por lo que concluyen que, utilizando un razonamiento análogo, aunque un poco más complicado, es posible caracterizar los árboles que tienen los segundos mínimos y segundos índices multiplicadores máximos de Zagreb.

Por otro lado, en 2012, Lingping Zhong [23] define el índice armónico de un grafo G , como la suma de los pesos $\frac{2}{d(u)+d(v)}$ de todos los bordes uv de G , donde $d(u)$ indica el grado de un vértice u en G . Y presenta los valores mínimos y máximos de los índices armónicos para grafos y árboles de conexión simple. Con lo que concluye que se pueden caracterizar los grafos extremos correspondientes.

En ese mismo año (2012), Modjtaba Ghorbani y Nasrin Azimi [24] en su trabajo definen las versiones de los índices múltiples de Zagreb en función de los grados de los vértices en un grafo dado y luego calculan los grafos extremos, primeros y segundos a ellos; por lo que proponen dos nuevos índices topológicos, los cuales los definen como: $PM(G) = \prod_{u \in E(G)} (du + dv)$ y $PM_2(G) = \prod_{u \in E(G)} (du \times dv)$. Concluyen que, al usar la definición de los índices múltiples de Zagreb, se pueden calcular los grafos extremos con respecto a estos nuevos índices topológicos.

En 2012, Eliasi et al. [25] demuestran que, entre todos los grafos conectados con un número dado de vértices, el camino tiene un mínimo de Π_1^* , al igual que los árboles con el segundo mínimo Π_1^* ; dan como resultado los números que reflejan ciertas características estructurales de las moléculas orgánicas que se obtienen a partir del grafo molecular, con grafos finitos, sin bucles, múltiples y con bordes dirigidos.

Huang et al. [26] en 2012 caracterizan a los grafos vecinos extremos correspondientes. Y presentan los límites superiores e inferiores en el índice aumentado de Zagreb para varias clases de grafos conectados. En sus conclusiones, marcan que sus resultados pueden ser obtenidos utilizando un sistema de cómputo.

Para 2013, Wu et al. [27] definen el índice armónico de un grafo (un grafo libre de triángulos) con n vértices y un grado mínimo de al menos dos. Para caracterizar a los grafos extremos, estableciendo un mejor límite inferior posible para el índice armónico.

El trabajo que desarrolla Shirdel et al [28] en 2013 contribuye al cálculo del índice Hyper Zagreb del producto cartesiano, la composición, la unión y separación de los grafos. Además, define al índice topológico Superior (G) de un grafo G , como un número. Es decir, para cada grafo H isomorfo a G , $\text{Superior}(H) = \text{Superior}(G)$. Solo consideran grafos conectados simples, es decir, grafos conectados sin bucles y con múltiples bordes. Con el que establecen un lema relacionado con las propiedades de distancia de algunas operaciones gráficas. Dan como resultado, las aplicaciones de este lema al calcular fórmulas exactas para algunas operaciones de grafos bajo el índice Hyper Zagreb.

Dos años después (2015) G. Sridhara et al. [29] determinan los índices topológicos de conectividad átomo-enlace que se pueden utilizar para el modelado de las propiedades termodinámicas de compuestos químicos orgánicos; en los que consideran a todos los grafos moleculares como finitos, conectados, sin protuberancias y sin bordes múltiples. Establecen una fórmula general para obtener los índices de conectividad de Suma, el cuarto átomo-enlace, de Randic, geométrico-aritmético y el quinto índice geométrico-aritmético del Grafeno, de manera analítica. Se utilizan como una herramienta para explicar la estabilidad de los alcanos ramificados.

En 2016, Jagadeesh et al [30] presentan expresiones exactas para calcular los índices topológicos basados en grados y sus variantes, los cuales se utilizan para estudiar la complejidad molecular, la quiralidad, etc. Los índices topológicos del grafeno que calculan son el primer y segundo índice de Zagreb, el primer y segundo índice múltiple de Zagreb, el índice aumentado de Zagreb, el índice armónico y el índice de grafeno hiper Zagreb.

1.3 Nanoantenas hechas a base de grafeno

En 2009, Marinko Jablan et al. [31] señalan que los SPP en el grafeno dopado permiten simultáneamente bajas pérdidas, y una localización significativa de las ondas para frecuencias inferiores a las de la rama óptica del fonón $\hbar\omega_{\text{oph}} \approx 0.2$ eV (electron-Volts). Plantean que las grandes pérdidas de energía del plasmón que ocurren en el régimen interbanda a través de la excitación de pares, agujero-electrón, ya que pueden ser empujados hacia frecuencias más altas para valores de alto-dopaje.

Marinko Jablan et al. [31] establecen que las pérdidas se realizan en el marco de una aproximación de fase aleatoria y una aproximación de conservación del tiempo de relajación, en el que las propiedades ópticas de los plasmones en el grafeno son en muchos aspectos relevantes, esto por el hecho de que los plasmones en el grafeno puedan tener bajas pérdidas para ciertas frecuencias. Lo que los hace potencialmente interesantes para aplicaciones nanofotónicas.

Un año después (2010), J. M. Jornet e I. F. Akyildiz [32] estudian un nuevo marco mecánico cuántico para analizar las propiedades de los nanotubos de carbono (CNT por sus siglas en inglés) como antenas nano-dipolo. Para esto, primero establecen las propiedades de la línea de transmisión de los CNT, las obtienen utilizando el modelo de unión ajustada en función de la longitud, el diámetro y la geometría del borde de CNT.

Luego, establecen y calculan los parámetros de la antena que son relevantes, tales como la frecuencia de resonancia fundamental y la impedancia de entrada. Los resultados de J. M. Jornet e I. F. Akyildiz [32] los comparan con los de una antena de tipo nanoparche basada en nanocintas de grafeno (GNR por sus siglas en inglés) con dimensiones similares. Finalmente, en sus resultados establecen que para un tamaño de antena máximo del orden de varios cientos de nanómetros (el tamaño máximo esperado para un nanodispositivo), tanto una antena nanodipolo como una antena nanopache podrán irradiar ondas electromagnéticas en un ancho de banda, alrededor de los terahercios (0.1-10.0 THz).

En 2011 Ashkan Vakil y Nader Engheta [33] divulgan un estudio teórico en el que demuestran que diseñando y manipulando patrones de conductividad no homogéneos a través de una hojuela de grafeno, se puede tener este material como una plataforma de un átomo de espesor para metamateriales infrarrojos y dispositivos ópticos. En el que concluyen que, al variar el potencial químico del grafeno mediante el uso de un campo eléctrico estático, se obtiene una forma de ajustar la conductividad y las frecuencias infrarrojas del grafeno en el rango de los Tera Hertz. Por ello fijan que un grado de libertad que ofrece la posibilidad de tener diferentes "parches" con diferentes conductividades en una sola hojuela de grafeno.

Ese mismo año (2011), Long Ju et al. [34] demuestran que las resonancias del plasmón de grafeno se pueden sintonizar en un amplio rango de frecuencias, a niveles de los Terahertz al cambiar el ancho de la microcinta. Manifiestan un comportamiento de la ley de potencia característico de los electrones de Dirac sin masa bidimensionales, estableciendo las dependencias del ancho de banda y el portador de la frecuencia del plasmón de grafeno. Los resultados que obtienen los representan como una primera mirada al acoplamiento de plasmones de luz en el grafeno, y apuntan a posibles metamateriales formados de grafeno en el rango de los Terahertz.

Un año después (2012), I. Llatser et al. [35] analizan numéricamente la dispersión de la radiación en Tera Hertz de una antena tipo parche a nanoescala hecha a base de grafeno. Calculan la sección transversal de la nano antena soportada por sustratos de silicio y dióxido de silicio de diferentes espesores para establecer que las resonancias de dispersión de los plasmones polarizados superficiales en la banda en Tera Hertz resistidos por la película de grafeno. También demuestran numéricamente que hay una buena sintonía de las resonancias de la antena mediante polarización electrostática. Con lo que marcan la posibilidad para diseñar nano-antenas ajustables hechas a base de grafeno. Por lo que concluyen que estas antenas están previstas para habilitar las comunicaciones inalámbricas a nanoescala.

Ese mismo año (2012), M. Tamagnone et al. [36] presentan el concepto y el análisis de una antena reconfigurable en una frecuencia de Terahertz (THz) usando grafeno. Establecen que la antena explota resonancias plasmónicas tipo dipolo, con lo que se pueden sintonizar en un amplio rango de frecuencias a través del efecto de campo eléctrico en una pila de grafeno. Además de un control dinámico eficiente, el enfoque que proponen permite una alta miniaturización y un buen emparejamiento directo con fuentes de onda continua a niveles de los THz. Usan un modelo cualitativo para explicar la excelente estabilidad de la impedancia bajo la reconfiguración. En sus resultados indican que son muy prometedores para los futuros transceptores y sensores en THz hechos de grafeno.

En este mismo año (2012), Philippe Tassin et al. [37] desarrollan para los metamateriales resonantes una figura de mérito para los conductores, que permite una clasificación directa de los materiales conductores de acuerdo con la pérdida disipativa resultante en el metamaterial. Aplican un método que predice que el grafeno y los superconductores de alta-Tc no son alternativas viables para los metales en los metamateriales. También proporcionan una descripción general de una serie de metales de transición, metales alcalinos y óxidos conductores transparentes. Para los sistemas plasmónicos, predicen que el grafeno y los superconductores de alta-Tc no pueden superar al oro como una plataforma para los plasmones polarizados superficiales, porque el grafeno tiene una menor relación de longitud de propagación a longitud de onda.

Posteriormente en 2013, J. M. Jornet and I. F. Akyildiz [38] proponen, modelan y analizan una novedosa antena basada en grafeno, describiendo el comportamiento de las ondas de los Plasmones Polarizados Superficiales (SPP) en tamaño semi-finito de nanocintas de grafeno (GNR). En primer lugar, estudian analítica y numéricamente la conductividad de las GNR partiendo de la ecuación de Kubo para capturar el impacto del confinamiento lateral de electrones en las GNR.

En segundo lugar, Jornet and Akyildiz [38] investigan analíticamente y numéricamente la propagación de ondas SPP en GNRs, calculan el vector de onda SPP y la longitud de propagación. Finalmente, modelan la nano-antena como una cavidad plasmónica resonante y determinan su respuesta de frecuencia. En sus resultados muestran que, explotando el factor de compresión en modo alto de ondas SPP en GNR, las nano-antenas plasmónicas basadas en grafeno son capaces de operar a frecuencias mucho más bajas que sus contrapartes metálicas. Establecen en sus conclusiones que este resultado tiene el potencial de habilitar la comunicación electromagnética (EM) en redes nano.

Un año después (2014), J. M. Jornet et al. [39] modelan y analizan un nano-transceptor plasmónico para la comunicación inalámbrica en la banda de los Terahertz (0.1-10 THz). Donde exponen que el nano-transceptor se basa en un transistor de alta movilidad de electrones (HEMT, High Electron Mobility Transistor, por sus siglas en inglés) construido con un semiconductor III-V y mejorado con grafeno. Explican que la transmisión, cuando se aplica una tensión entre el canal HEMT y la fuente, los electrones se aceleran en el canal HEMT. Este movimiento de electrones resulta en la excitación de una onda de plasma que, a su vez, induce una onda del Plasmon Polarizado Superficial (SPP, por sus siglas en inglés) en la compuerta de grafeno.

J. M. Jornet et al. [39] investigan de manera analítica la transmisión, acoplando las ecuaciones hidrodinámicas que gobiernan la generación de ondas de plasma en el HEMT, con la conductividad compleja dinámica del grafeno y las ecuaciones de Maxwell. Los resultados numéricos que obtienen es que el nano-transceptor propuesto puede generar efectivamente la onda SPP necesaria para conducir una nanoantena plasmónica a frecuencias de los Terahertz. Además, establecen que la utilización del mismo nanomaterial que en las nano-antenas plasmónicas facilita la integración antena-transceptor. Dejando ver la posibilidad de utilizar a los nano-transceptores compactos sintonizables para la comunicación de la banda en Tera Hertz.

Ese mismo año (2014) M. Tamagnone et al. [40] presentan un modelo de circuito analítico capaz de predecir la impedancia de entrada de dipolos plasmónicos de grafeno reconfigurables. Utilizan una definición adecuada de la impedancia característica plasmónica, empleando corrientes naturales para el modelado consistente de la conexión antena-carga en el circuito. En su forma puramente analítica, el modelo que proponen muestra buena concordancia con las simulaciones de onda completa. Finalmente, concluyen que el enfoque de modelado también permite una estimación justa de la eficiencia de la radiación. Este enfoque se aplica a antenas plasmónicas delgadas realizadas con metales nobles o semiconductores.

En 2014, M. Aldrigo et al. [41] presentan dos configuraciones de antenas inteligentes de grafeno, en las que el patrón de radiación de la antena o el de las matrices metálicas periódicas, está controlado por los sesgos de los conos Dirac (DC por sus siglas en inglés), los cuales inducen transiciones reversibles de las monocapas de grafeno con un aislante de metal. Determinan que dicha transición de una alta resistencia superficial (sin sesgo) a un bajo estado de resistencia superficial (voltaje de polarización finita) hace que el patrón de radiación de las antenas metálicas respaldadas con grafeno cambie drásticamente, de omnidireccional a un

costado. Y concluyen que las matrices de reflexión corrigen el campo debido a la misma transición metal-dieléctrico.

Los estudios relacionados en 2016 sobre nanoantenas SPP hechas a base de grafeno por Luke Zakrajsek et al. [42] plantean una antena hecha a base de grafeno, utilizan el método de Deposición de Vapor Químico y una técnica de litografía. Para lo cual se corta la forma con un haz de iones enfocado para depositar el material en un sustrato, que normalmente es una oblea de silicio (Si) cubierta por oxido de silicio (SiO₂) como dieléctrico.

Luke Zakrajsek et al. [42] obtienen la conductividad eléctrica y *la frecuencia de resonancia* de la antena con el *modelo de conductividad compleja del grafeno*. Para demostrar que, al comparar soluciones numéricas de las antenas de grafeno definidas litográficamente, deberían comportarse como si estuvieran aisladas electromagnéticamente, siempre y cuando el ancho del corte circundante sea comparable a la longitud de onda plasmónica. Por lo que concluyen, que sus resultados establecen una opción para el diseño de antenas más prácticas y avanzadas.

1.4 Conclusión

La nanotecnología está permitiendo el desarrollo de dispositivos en una escala que va de uno a unos pocos cientos de nanómetros. La coordinación y el intercambio de información entre estos nanodispositivos conducirá al desarrollo de futuras nanoredes, impulsando una gama de aplicaciones de la nanotecnología en los campos de la electrónica, las telecomunicaciones, la biomedicina, el área ambiental y militar.

Por lo cual, el análisis del estado del arte revela que existen diversos trabajos relacionados con nanoantenas. Los cuales están enfocados al análisis, comportamiento y diseño, para que puedan transmitir datos en el rango de los Terahertz, como los sensores moleculares.

Uno de los métodos para mejorar las nanoantenas es con su construcción a base de grafeno. Por lo que, en este capítulo se revisaron referencias sobre nanoantenas a base de grafeno. En estos estudios se caracterizan, simulan y modelan de forma teórica y experimental.

Uno de los métodos utilizados para obtención del grafeno es el método de exfoliación micromecánica, que es el utilizado para la fabricación de las nanoantenas hechas a base de grafeno. El cual consiste en raspar el grafito y recolectar el grafeno por medio de cintas adhesivas, conocidas como nanocintas de grafeno. Posteriormente se depositan en un sustrato, comúnmente silicio y un dieléctrico de SiO_2 .

Una vez obtenida la nanoantena a base de grafeno se estudia de manera teórica utilizando el modelo de conductividad compleja y la ecuación de dispersión del plasmón polarizado superficial. Estos involucran para su análisis propiedades principales del grafeno y de la nanoantena, como son la calidad de obtención del grafeno, las dimensiones de la nanocinta, la conductividad magnética, la energía de fermi, la frecuencia de resonancia, la directividad, la impedancia, la reactancia y el nivel de transmisión de los datos en el rango de los Tera Hertz.

Los estudios reportados sobre los índices topológicos de Zagreb, Múltiple Zagreb, Aumentado Zagreb, Hiper Zagreb y Wiener, describen el comportamiento de las moléculas que ayudan a predecir ciertas propiedades fisicoquímicas, como el punto de ebullición, la entalpía de vaporización, estabilidad molecular, etc., en el grafeno.

Al realizar un análisis de los trabajos de investigación de nanoantenas hechas a base de grafeno y de los índices topológicos del grafeno, presentados por diversos investigadores e instituciones, se observa que se exploran como líneas de investigación por separado.

De lo anterior, ésta tesis se desarrolla para diseñar un modelo computacional que tome en cuenta los índices topológicos del grafeno para predecir de una manera mas realista el comportamiento de una nanoantena heca abase de grafeno, donde se puede manipular y controlar las dimensiones, la forma geomética y el nivel de transmisión de datos en Tera Hertz.



CAPÍTULO 2



2. MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presenta la teoría básica que describe el material de grafeno y su comportamiento. Además de los índices topológicos, específicamente los de Zagreb, Múltiple Zagreb, Aumentado Zagreb, Hiper Zagreb y Wiener para el diseño del parche de las nanoantenas. Se analiza la conductividad de las GNR (nanocintas de grafeno por sus siglas en inglés) de forma analítica y numéricamente utilizando la ecuación de Kubo de tipo Drude para obtener la estructura de la banda electrónica y las funciones de onda de los electrones de las GNR en función de su ancho y potencial químico.

2.1 Características del Grafeno

El grafeno es un material nanométrico bidimensional, formado por átomos de carbono y enlaces covalentes constituyendo una red hexagonal. Es una hojuela cuasiplana con pequeñas ondulaciones, cuyos átomos de carbono presentan orbitales sp^2 , con un grosor de un átomo de carbono (0.1nm).

Debido a sus propiedades químicas, térmicas, mecánicas, electrónicas y ópticas únicas del grafeno [43], se han divulgado numerosos estudios sobre su aplicación para dispositivos en el rango de los Tera Hertz (THz), circuitos de radio frecuencia (RF), microondas y ondas milimétricas. Por ejemplo, los transistores de efecto de campo (FET), los multiplicadores de frecuencia y los mezcladores [34], [45].

Dadas sus extraordinarias propiedades conductoras y semiconductoras, el grafeno procesa datos diez veces más rápido que el Silicio, por lo que también se puede utilizar como líneas de transmisión para guiar ondas electromagnéticas o como antenas, diseñadas con el objetivo de emitir y/o recibir ondas electromagnéticas hacia el espacio libre y la fuente de la señal [46], [47]. Su conductividad puede ajustarse electromagnéticamente, mostrando el potencial de diseño y realización de una nueva clase de antenas reconfigurables a nivel de los Tera Hertz [45].

2.1.1 Estructura geométrica del grafeno

El grafeno con una superficie plana ligeramente ondulada y con una configuración atómica hexagonal, tiene dos bordes diferentes. Los bordes superior e inferior tienen forma de *zig-zag* como se muestra en la figura 2.1(a) y los bordes izquierdo y derecho tienen forma de borde conocida como *armchair*, como se muestra en la figura 2.1(b).

La relación de dispersión de energía para grafeno cambia a lo largo de cada borde. De estas configuraciones o arreglos atómico se desprenden las propiedades electrónicas, mecánicas y químicas excepcionales que se observaron desde los primeros experimentos dedicados a su estudio detallado. La estructura reticular del grafeno puede definirse mediante vectores reticulares primitivos, formando los tipos de borde en el grafeno.

Los vectores reticulares del grafeno están formados por los vectores de la celda unitaria y los vectores primitivos que generan las zonas de Brillouin (BZ, por sus siglas en inglés).

En la figura 2.1 (a), se expresan los vectores unitarios en el espacio real como \vec{a}_1 y \vec{a}_2 de la configuración hexagonal están expresados en la ecuación 2.1; son tres puntos los que representan alta simetría, Γ , K , M [48], que forman un triángulo, utilizado para calcular la relación de dispersión de la energía. La figura 2.1 (b), se representa en la ecuación 2.3 a \vec{b}_1 y \vec{b}_2 como los vectores de la red recíproca.

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2} \right), \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{a}{2} \right) \quad (2.1)$$

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

Otra forma de describir a la red del grafeno es como una red triangular de tipo A (círculos blancos) interpenetrada por una red triangular de tipo B (círculos negros). En la Figura 2.1 (a) puede verse que cada átomo de tipo A está rodeado de tres átomos de tipo B (primeros vecinos), y viceversa. Los tres vectores que conectan a un átomo de tipo A con sus tres primeros vecinos, expresados en la ecuación 2.2.

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1), \quad \delta_3 = a(0, -1) \quad (2.2)$$

Los vectores b_1 y b_2 de la red recíproca del grafeno pueden ser determinados por la ecuación 2.3, donde la configuración de $b = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$, correspondiente a una constante de en el espacio recíproco, usando la condición $\vec{a}_i * \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$.

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right), \quad \vec{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right) \quad (2.3)$$

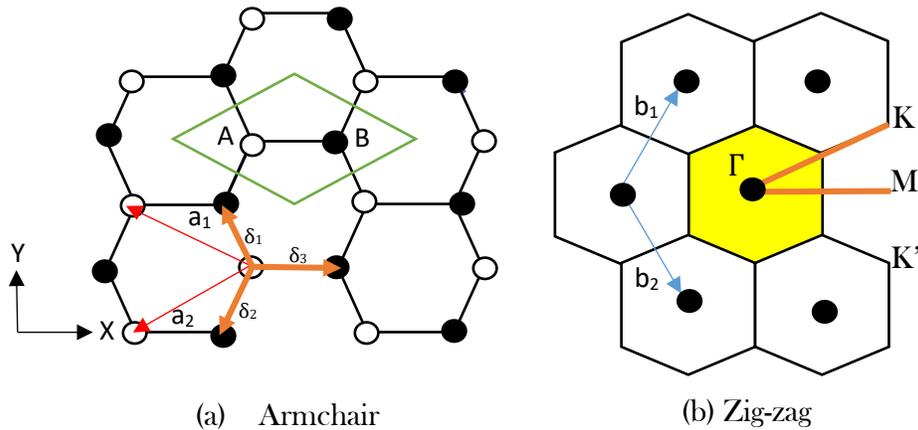


Figura 2.1 Estructura cristalina del grafeno. (a) Estructura cristalina del grafeno, cuyos vectores base son denotados por a_1 y a_2 . Los vectores δ_i conectan cada átomo de la subred A (círculos blancos) con sus tres primeros vecinos de la subred B (círculos negros). (b) Red recíproca del grafeno de vectores b_1 y b_2 .

El hexágono amarillo de la figura 2.1, representa la primera zona de Brillouin, donde de las 6 esquinas del hexágono amarillo está girado a 90° . Los puntos especiales se denominan K y K' y la ecuación 2.4 representa sus coordenadas.

$$\vec{K} = \frac{3\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{-1}{2} \right); \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \quad (2.4)$$

Cuando los átomos de carbono se ubican en las esquinas de la red hexagonal, las funciones de ondas de los diferentes átomos se traslapan. Sin embargo, debido a la simetría de la red, el traslape entre los orbitales p_z y los σ ó p_x y p_y es estrictamente cero. Por lo tanto, los electrones p_z que forman los enlaces π en el grafeno pueden ser tratados independientemente de otros electrones de la capa de valencia [48].

2.2 Confinamiento cuántico de los electrones del grafeno

Cuando los electrones en un material se encuentran restringidos a moverse en una región muy pequeña del espacio se dice que están confinados. Y cuando esta región es tan pequeña que es comparable a la longitud de onda asociada al electrón (llamada longitud de De Broglie), entonces comienza a observarse lo que se denomina *comportamiento cuántico*. Las longitudes típicas son del orden de décimas de micrón al nanómetro (o sea, de aproximadamente 0.0001mm a 10^{-9} m o una millonésima de mm), [48].

Los electrones de valencia logran separarse de los núcleos cuando reciben energía adicional externa: por ejemplo, cuando se aplica un campo eléctrico a un material, estos electrones se separan de sus núcleos y se convierten en electrones de conducción. En el caso de materiales

constituidos por átomos que no tienen sus capas electrónicas completas, existen huecos (ausencia de electrones en la banda de valencia) que también pueden separarse de los núcleos si se les adiciona energía. Ésta es la forma en que se producen corrientes de electrones o huecos en un semiconductor; no obstante, en el grafeno los electrones o huecos se comportan como partículas que se mueven a una velocidad constante [49].

La relación de dispersión lineal y no cuadrática de la ecuación 2.5, implica que los electrones en el grafeno se consideran fermiones relativistas de Dirac sin masa [50].

$$E(\mathbf{k}) \approx v_F k, \quad v_F \sim 10^6 \text{ m/s.} \quad (2.5)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi de los electrones y es una constante.

2.3 Fermiones de Dirac

En la figura 2.1 b) se pueden apreciar los puntos de alta simetría (puntos Dirac) Γ , M y K , dados en coordenadas cartesianas expresados en la ecuación 2.6.

$$\Gamma = (0,0,0), \quad \vec{K} = \frac{3\pi}{a} \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{1}{3} \right), \quad M = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, 0 \right) \quad (2.6)$$

Formando un triángulo que se utiliza para calcular la relación de dispersión de la energía. Para describir las propiedades electrónicas del grafeno (y poder saber si es aislante, metal o semiconductor) es necesario estudiar tanto la estructura de bandas como su respectiva densidad de estados. Esto fue hecho por primera vez en 1947 por P. R. Wallace [1] usando el método de Tight Binding a primeros vecinos. Wallace [1] obtuvo una expresión para las bandas de energía que describe la relación E-k en la vecindad del k-punto K de la forma expresada en la ecuación 2.7.

$$E = \hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \quad (2.7)$$

Los fermiones de Dirac en este caso corresponden a estados de excitación del grafeno a bajas energías alrededor de los puntos de Dirac (de ahí su nombre), en donde su energía es linealmente dependiente de k y su masa efectiva es nula.

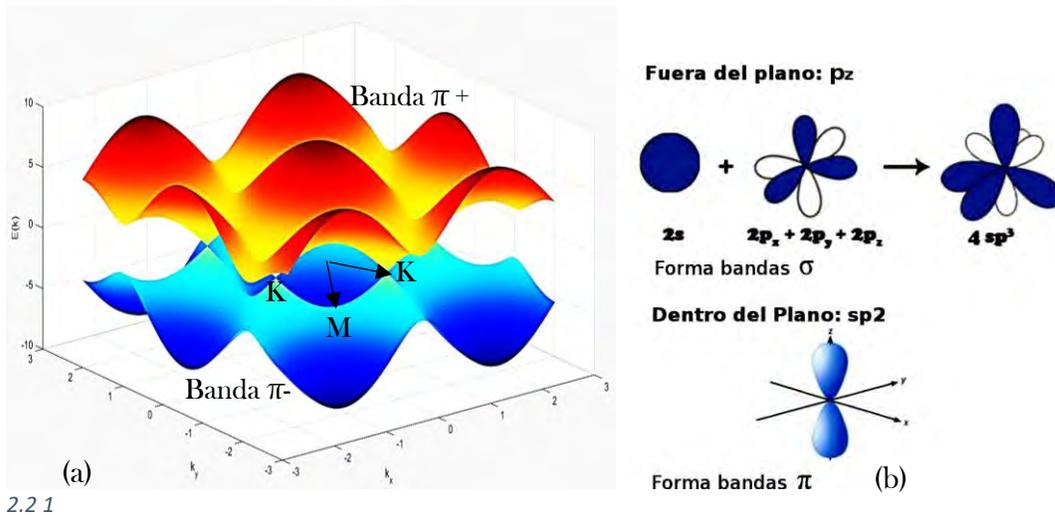


Figura 2.2 Fuente: Elaboración propia. Estructura de bandas del grafeno en toda la primera zona de Brillouin obtenida del algoritmo programado en Matlab. (a) Forma hexagonal del grafeno en 3D y (b) el grafeno es una red con dos átomos (A y B) por celda unidad. Los orbitales s y p forman las bandas σ y π .

Como puede verse en la figura 2.2, las bandas de valencia y de conducción, representadas por las soluciones $E(\vec{k}) < 0$ y $E(\vec{k}) > 0$ respectivamente, se cruzan en seis puntos, correspondientes a las esquinas de la primera zona de Brillouin (puntos de alta simetría de Dirac).

Como cada átomo de carbono aporta un electrón del orbital 2p a las bandas, se tiene que la banda de valencia estaría totalmente llena, mientras que la de conducción estará vacía, haciendo que el nivel de Fermi esté exactamente al nivel de energía correspondiente al plano que contiene los puntos de Dirac [49].

Así que tampoco se encuentra un gap en la estructura de bandas, se determina que el grafeno es un material semiconductor sin gap, que posee una alta movilidad electrónica a temperatura ambiente que le permite transportar electrones 100 veces más rápido que el silicio [50]. Por lo que se considera al grafeno en este trabajo de tesis para el diseño de nanoantenas que transmitan en el rango de los Tera Hertz.

2.4 Métodos de obtención del grafeno

Una serie de trabajos sobre los métodos de obtención del grafeno se han reportado desde 2004. Entre ellos, la exfoliación micromecánica (método de “scotch-tape”), a través de la cual el grafeno fue obtenido por primera vez [50], actualmente es el método más eficaz y fiable para producir láminas de grafeno de alta calidad y es muy utilizado para hacer nanoantenas. La

exfoliación es la separación de las capas más externas de un sólido en laminillas, hojuelas o escamas.

La técnica de exfoliación micromecánica consiste en un raspado fino, o bien, en el descascaramiento de las placas superpuestas. En el caso del grafito, las capas de grafeno débilmente unidas (interacciones de van der Waals) son separadas utilizando cinta adhesiva con el propósito de extraer hojuelas extremadamente delgadas.

Otros métodos para la obtención del grafeno son la descomposición térmica de carburo de silicio (SiC) [51], así como la técnica llamada *deposición química de vapor*, con la que se ha hecho crecer epitaxialmente el grafeno de pocas capas (o incluso el monocapa) [52]. A pesar de sus ventajas, estas técnicas aún no se han caracterizado lo suficiente [51], por lo que presentan un inconveniente relevante: la baja cantidad de material obtenido, haciéndolas por el momento inadecuadas para aplicaciones a gran escala [52]. Normalmente, hay cinco métodos para la preparación de grafeno [56]:

1. Exfoliación micromecánica de grafito (cinta Scotch o método de desprendimiento).
2. Creación de suspensiones coloidales a partir de compuestos de intercalación de óxido de grafito o grafito (CIG).
3. Deposición de vapor químico (CVD) de hidrocarburo.
4. Crecimiento epitaxial en superficies eléctricamente aislantes como SiC.
5. Síntesis orgánica total.

2.5 Teoría de grafos aplicada al grafeno

Las fases geométricas que son fundamentales en la física cuántica proporcionan herramientas básicas para caracterizar los órdenes topológicos [53-55].

La *teoría de grafos*, es una rama de las matemáticas y las ciencias de la computación que estudia las propiedades de los grafos. Formalmente, un grafo $G = (V, E)$ es una pareja ordenada en la que V es un conjunto no vacío de vértices y E es un conjunto de aristas. Donde V consta de pares no ordenados de vértices, tales como $\{x, y\} \in E$ entonces “x” y “y” son adyacentes; en la figura 2.3 se representa un grafo mediante una línea no orientada que une dichos vértices.

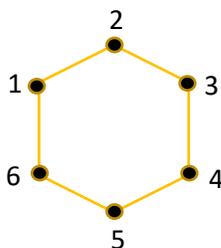


Figura 2.3 Fuente: Elaboración propia. Grafo hexagonal con vértices (puntos negros) y aristas (líneas amarillas).

La teoría de grafos está ligada habitualmente a la topología que proporciona una variedad de herramientas útiles, como los índices topológicos. Un índice topológico es usado como un

valor numérico asociado con la constitución química del grafo (molécula) que pretende correlacionar la estructura química con diversas propiedades físicas, la reactividad química o la actividad biológica.

La finalidad de los índices topológicos es codificar información de los descriptores moleculares del grafeno de forma puramente numérica. Este formato facilita la búsqueda de las propiedades del material, como el origen del fermión que se duplica en términos de la simetría quiral [54] y las funciones de onda del estado de borde (armchair o zigzag).

Varios estados topológicamente ordenados están relacionados con los estados de borde en el grafeno, dichos estados de borde son los de la partícula de Dirac, especialmente cuando la partícula es sin masa [12] [17]. Para ser más preciso, la malla hexagonal del grafeno tiene una simetría quiral, que es de importancia fundamental en la existencia de los estados de borde con energía cero ($E = 0$).

2.5.1 Índice Topológico De Zagreb (ZI)

Los índices topológicos de Zagreb son los invariantes más antiguos utilizados en química matemática para predecir los fenómenos químicos, por lo que se han considerado para el análisis numérico de la malla hexagonal del grafeno.

$$M_1(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} (du + dv) \quad (2.8)$$

$$M_2(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} (du * dv) \quad (2.9)$$

donde

$M_1(G)$: Primer índice de Zagreb

$M_2(G)$: Segundo índice de Zagreb

du : denota el grado (número de primeros vecinos) del vértice v en G .

dv : denota el grado (número de vértices que son adyacentes a u) de un vértice.

Los índices topológicos de Zagreb y sus variantes se han utilizado para estudiar la complejidad molecular, la quiralidad, etc. En general, han mostrado un potencial en la aplicabilidad para derivar modelos de regresión multilineal. Para un grafo conectado simple G el primer y segundo índice de Zagreb se define en la ecuación 2.8 y 2.9 respectivamente [24].

2.5.2 Índice Múltiple Zagreb

En 2012, Ghorbani y Azimi11[24] definieron el índice topológico múltiple de Zagreb de un grafo G basado en el grado del vértice G , para calcular los grafos extremos primeros y segundos a ellos. El primer y segundo índice múltiple de Zagreb se definen en la ecuación 2.10 y 2.11.

$$PM_1(G) = \prod_{e=uv \in E(G)} (du + dv) \quad (2.10)$$

$$PM_2(G) = \prod_{e=uv \in E(G)} (du * dv) \quad (2.11)$$

2.5.3 Índice Aumentado Zagreb

El índice aumentado de Zagreb fue introducido por Furtula et al [20]. Este grafo invariante es un valioso índice predictivo en el estudio del calor de formación en octanos y heptanos y es un nuevo índice topológico en teoría de grafos químicos, cuyo poder de predicción es mejor que el índice de conectividad átomo-enlace.

Algunas investigaciones básicas implican que el índice aumentado Zagreb (AZI por sus siglas en inglés) tiene mejores propiedades de correlación y sensibilidad estructural entre los muy bien establecidos índices topológicos basados en grados. De acuerdo con la definición de un grafo $G = (V, E)$, du es el grado de un vértice u , y el AZI es denotado por $AZI(G)$ y se define por la ecuación 2.12.

$$AZI(G) = \sum_{uv \in E(G)} \left[\frac{du * dv}{du + dv - 2} \right]^3 \quad (2.12)$$

2.5.4 Índice Hiper Zagreb

Como muchos grafos moleculares químicamente importantes y nano estructuras se forman de algunos componentes isomorfos (que tienen la misma estructura molecular), puede tratarse como un caso particular de los grafos de puente y cadena que se construyen a partir de varias copias de grafos isomórficos. Se introduce una nueva distancia basada en los índices Zagreb. El índice Hiper-Zagreb se define en la ecuación 2.13 [28].

$$HM(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} (du + dv)^2 \quad (2.13)$$

2.5.5 Índice Armónico

En 1975, el químico Milan Randić [27] propuso un índice topológico **R** bajo el nombre de "índice de ramificación", adecuado para medir el grado de ramificación del esqueleto del átomo de carbono de los hidrocarburos saturados. El índice de ramificación se renombró el índice de conectividad molecular y se denomina a menudo el índice de Randić. *Existe una buena correlación entre el índice Randić y varias propiedades fisicoquímicas de los alcanos: puntos de ebullición, entalpías de formación, tiempos de retención cromatográfica, etc.* [27].

$$H(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} \frac{2}{du + dv} \quad (2.14)$$

El índice armónico fue presentado por Zhong. [27]. El índice armónico se correlaciona bien con el índice Randic y la energía del π -electrón de los hidrocarburos benzenoides. Relacionado con la conectividad molecular, denotado en la ecuación 2.14.

2.5.6 Índice Wiener

El Índice de Wiener (**W**) introduce el concepto topológico de "Distancias", es decir, el camino más corto entre dos vértices, definido como el mínimo de aristas capaces de conectar esos dos vértices.

$$We = We(G) = \sum_{x < y} D_{xy} \quad (2.15)$$

El Índice de Wiener será igual a la mitad de la suma de la valencia de cada vértice.

$$W = \frac{1}{2} \sum_i^m \delta_i \quad (2.16)$$

Este índice se determina a partir de la Matriz de Distancias. Es igual a la suma de todas las distancias entre todos los pares de vértices del grafo [57]. Su expresión matemática tiene la forma de la ecuación 2.15 y 2.16.

2.6 Nanoantenas de parche hechas a base de grafeno

De acuerdo con el “Institute of Electrical and Electronics Engineers” (IEEE) definen una antena, como aquella parte de un sistema transmisor o receptor diseñada específicamente para radiar o recibir ondas electromagnéticas (IEEE Std. 145-1983). Es decir, es un dispositivo usado para las transmisiones en frecuencias de amplitud modulada (AM) o frecuencia modulada (FM), diseñado con el objetivo de emitir y/o recibir ondas electromagnéticas hacia el espacio libre.

Dependiendo de la frecuencia y/o longitud de onda, se elige el tipo de antena, con el fin de proveer el mejor medio por el cual las señales que son suministradas pueden radiar/recibir adecuadamente. Las dos funciones básicas de una antena son: *transmitir* y *recibir*. Estas funciones atribuyen una serie de condiciones particulares para cada aplicación:

- ☞ Su capacidad de radiar o recibir en determinadas direcciones (direccionalidad).
- ☞ La frecuencia o banda de frecuencias de trabajo.
- ☞ Los niveles de potencia que debe soportar.
- ☞ La eficiencia de la antena.

Estas características, y en particular el carácter directivo de la antena y la banda de frecuencia de trabajo, permiten la existencia de una gran variedad de tipos de antenas; una de las cuales es la *antena de parche*. Esta se estudiará a lo largo de este apartado. [58]

El mecanismo de operación de una nanoantena de parche se puede estudiar examinando el funcionamiento del dispositivo en los modos de recepción y transmisión. En el modo de recepción, el campo eléctrico incidente \vec{E}_{inc} en la superficie de la nanoantena de parche; se expresa mediante la representación estándar de onda plana (ecuación 2.17):

$$\vec{E}_{inc}(z, t) = \vec{e}E_0 \cos(\omega t + kz) \quad (2.17)$$

donde

E_0 es la amplitud del campo

k es la constante de propagación en el medio

ω es la frecuencia angular

Como \vec{E}_{inc} irradia el parche de la nanoantena, los electrones libres en la capa de grafeno se excitan. La respuesta electrónica de la capa de grafeno a un campo electromagnético, definido como modo electromagnético (EM, por sus siglas en inglés) viene dada por su conductividad compleja del grafeno, $\sigma(\omega)$, que es la ecuación de Kubo, ecuación 2.18, dependiente de la frecuencia [38].

$$\sigma(\omega) = \frac{2e^2 k_B T}{\pi \hbar \hbar} \ln \left[2 \cosh \left[\frac{\mu_c}{2k_B T} \right] \frac{i}{\omega + i\tau^{-1}} \right] \quad (2.18)$$

donde

e : carga del electrón

\hbar : constante de plank reducida ($\hbar = h/2\pi$; h es la constante de Plank)

k_B : constante de Boltzman

ω : frecuencia angular ($\omega = 2\pi f$)

τ_g^{-1} : tiempo de relajación de los electrones ($\tau = 10^{-13} s$)

E_F : energía de Fermi

T : temperatura (300°K)

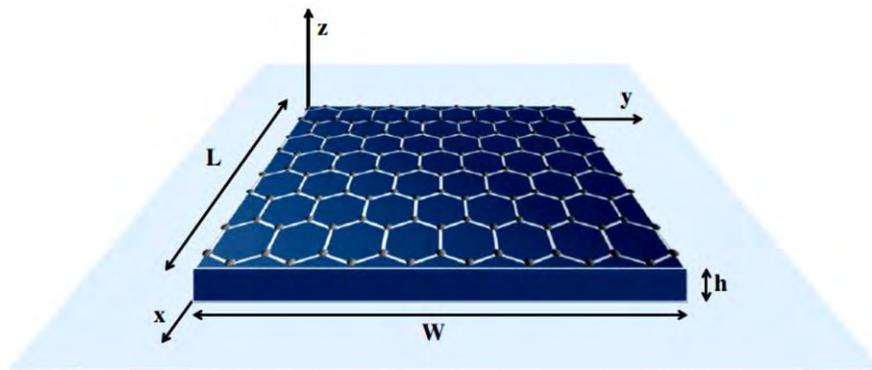


Figura 2.4. Nanoantena SPP de parche basada en grafeno. Imagen tomada de: *IEEE Journal on Selected Areas in Communications/Supplement, Part 2, Vol. 31, No. 12, December 2013.*

2.6.1 Dispersión de ondas de los plasmones polarizados superficiales (SPP)

Para modelar la propagación de ondas de los plasmones polarizados superficiales (SPP por sus siglas en inglés) en nanoantenas hechas a base de grafeno, se estudia la conductividad del grafeno, utilizando el modelo de conductividad compleja desarrollado para láminas infinitas de grafeno, tienen en cuenta los efectos de borde debido al tamaño de la antena [8].

La conductividad superficial del grafeno de una capa infinita de grafeno que se calcula por medio de la ecuación de Kubo [61] (ecuación 2.18), expresa la respuesta lineal de una cantidad observable debido a una perturbación dependiente del tiempo.

Por ejemplo, entre las aplicaciones de la fórmula de respuesta lineal, se pueden mencionar las susceptibilidades de carga y giro de sistemas de electrones debido a campos eléctricos o magnéticos externos [61].

En el contexto de la ecuación de Kubo (ecuación 2.18), la conductividad de la superficie del grafeno se puede obtener con el modelo de conductividad [59] superficial representado en forma local con la contribución intrabanda de tipo Drude.

Los plasmones tridimensionales isotrópicos y uniformes pueden soportar (en el campo magnético cero) modos longitudinales (plasmones) y transversales electromagnéticos. El acoplamiento de la radiación electromagnética incidente con los modos de los SPP correspondientes conduce a resonancias en la nanoantena de grafeno. La condición de resonancia está dada por la ecuación 2.19.

$$m \frac{\lambda/n_{eff}}{2} = L + 2\delta L \quad (2.19)$$

donde m es el índice del modo de resonancia, λ es la longitud de onda de la radiación incidente, L es la longitud de la nano antena y δL es una medida de la extensión del campo fuera de la nanoantenna. En base a la referencia [60], el índice de modo efectivo n_{eff} , es del orden de 10^{12} ; por lo tanto, las frecuencias resonantes de las nanoantenas basadas en grafeno se encuentran en la banda de Tera Hertz, alrededor de dos órdenes de magnitud por debajo de lo que se esperaría en una antena metálica con el mismo tamaño. Esta diferencia significativa implica antenas mucho más compactas y constituye una de las razones por las que las antenas basadas en grafeno se consideran una tecnología muy prometedora para los sistemas inalámbricos de nanocomunicación [62].

$$\eta_{eff}(\omega) = \sqrt{1 - 4 \frac{\mu_0}{\varepsilon_0} \frac{1}{\sigma(\omega)^2}} \quad (2.20)$$

El grafeno presenta excelentes condiciones para la propagación de las polaridades de los SPP, ondas que son guiadas a lo largo de una interfaz metal-dieléctrico, generadas por una radiación incidente de alta frecuencia. De hecho, una capa de grafeno independiente soporta ondas SPP transversales magnéticas (TM) con un índice de modo efectivo, η_{eff} dado por la ecuación 2.20 [33].

En la interfaz entre la capa de grafeno y la capa de material dieléctrico, las ondas del SPP se excitan. Por lo que se pueden desarrollar nanoantenas plasmónicas hechas a base de grafeno [63].

2.6.2 Hamiltoniano

El hamiltoniano de amarre fuerte, describe en el grafeno el salto de un electrón del átomo de tipo A(B) a uno de sus tres átomos vecinos de tipo B(A) y puede ser escrito como la ecuación 2.21. [64]

$$H = -t \sum_{R_i} \sum_{n=1}^3 (|A_{R_i}\rangle\langle B_{R_i+\delta_n}| + |B_{R_i+\delta_n}\rangle\langle A_{R_i}|) \quad (2.21)$$

donde t es la integral de salto entre primeros vecinos, R_i suma sobre todos los sitios de la subred A y el estado del vector $|A_{R_i}\rangle$ es tal que $\langle A_{R_i}|r = p_z(r - R_i)$ es la función de onda del orbital p_z de un átomo de carbono en el sitio R_i . Una notación similar es usada para $|B_{R_i+\delta_n}\rangle$. Según el *Ansatz* de Bloch, las autofunciones del hamiltoniano (ecuación 2.8) pueden ser desarrolladas por la ecuación de la forma 2.22.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{R_j} \left(e^{ik^*R_j} \Psi_A(k) |A_{R_j}\rangle + e^{ik^*(R_j+\delta_3)} \Psi_B(k) |B_{R_j+\delta_3}\rangle \right) \quad (2.22)$$

donde N_c es el número de celdas unitarias, $\Psi_A(k)$ y $\Psi_B(k)$ son coeficientes y k es el vector de onda del electrón. Si el solapamiento entre orbitales p_z de diferentes sitios es despreciado, la ecuación de Schrödinger $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ se convierte en una matriz de la forma 2.23.

$$\begin{pmatrix} 0 & -t \sum_{n=01}^3 e^{-ik^*\delta_n} \\ -t \sum_{n=01}^3 e^{ik^*\delta_n} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(k) \\ \Psi_B(k) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_A(k) \\ \Psi_B(k) \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

de donde inmediatamente se obtienen las dos bandas π ,

$$\begin{aligned} E_{\pm}(k) &= \pm |t \sum_{n=1}^3 e^{-ik^*\delta_n}| \\ &= \pm |t \sqrt{3 + 2\cos(\sqrt{3}ak_x) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)\cos(3k_y a/2)}| \end{aligned} \quad (2.24)$$

las cuales se ilustran en la figura 2.2 (a). La banda negativa corresponde a la banda de valencia, mientras que la banda de energía positiva corresponde a la banda de conducción, como se muestra en la ecuación 2.24, siendo $t=2.7$ eV [65], ambas bandas se anulan en las seis esquinas.

$$-i \frac{\sigma^g}{\omega \varepsilon_0} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \coth(k_{SPP} d)}{k_{SPP}} \quad (2.25)$$

Los Plasmones Polarizados Superficiales (SPP) son ondas electromagnéticas guiadas a lo largo de una interfaz metal-dieléctrico y generadas por medio de una radiación incidente de alta frecuencia [2] (ecuación 2.25).

2.6.3 Sustrato de la nanoantena de grafeno

De acuerdo con [62], un sustrato más grande mejora el rendimiento de la nanoantena de grafeno ya que la sección transversal de absorción aumenta hasta un límite dado con el tamaño del sustrato. Además, la sección transversal de absorción aumenta a medida que el parche de grafeno se ubica más cerca del lateral del sustrato, mientras que la frecuencia de resonancia aumenta cuando el parche está más alejado del centro [62]. Por lo tanto, la ubicación óptima para las nanoantenas de grafeno en chip puede estar cerca del borde del sustrato, para maximizar su eficiencia. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que la frecuencia de resonancia de la antena se muestra constante a 0,5 THz independientemente del tamaño del sustrato [62].

2.6.4 Potencial Químico

El potencial químico del parche de grafeno es el nivel en la distribución de las energías electrónicas en el que un estado cuántico se encuentre ocupado o vacío. En términos del potencial químico, existe una compensación entre la cantidad de energía que la nanoantena de grafeno puede absorber y su frecuencia de resonancia.

Las nanoantenas de grafeno con cero potenciales químicos, resuenan a baja frecuencia, pero con una sección transversal de absorción pequeña, lo que limita su eficiencia de radiación. Por otro lado, las nanoantenas con mayor potencial químico poseen mayores capacidades de absorción con una mayor frecuencia de resonancia. Por lo tanto, su rango de transmisión potencial se reduce. [62].

2.6.5 Tiempo de Relajación

El tiempo de relajación de un material se refiere al tiempo requerido para que una distorsión de carga se relaje a una densidad de carga uniforme después de ser introducido en el material. El tiempo de relajación en el grafeno es un parámetro fundamental de su modelo de conductividad. En realidad, el valor elegido para el tiempo de relajación, τ , tiene un gran impacto en el carácter resonante del grafeno de la nanoantena y su ancho de banda [62].

2.6.6 Parámetros de una antena

Los parámetros de una antena son susceptibles de ser medidos. Permiten hacer una comparación entre las propiedades de radiación. Se definen parámetros de tipo circuital y de tipo direccional. La mayoría de estos parámetros se definen en transmisión, pero son válidos también en la recepción. Los principales parámetros de las antenas se describen a continuación.

2.6.6.1 Banda de Frecuencia

En radiocomunicaciones se usan diferentes intervalos de frecuencias de espectro electromagnético para distintos usos. La designación está regulada por la Unión Internacional de Telecomunicaciones. En la Tabla 2-1 se puede ver la distribución de bandas de frecuencias [55].

Frecuencias (GHz)	Designación IEEE	Designación Militar
0.10 - 0.25	VHF	A
0.25 - 0.50	VHF-UHF	B
0.50 - 1.00	UHF	C
1.00 - 2.00	L	D
2.00 - 3.00	S	E
3.00 - 4.00		F
4.00 - 6.00	C	G
6.00 - 8.00		H
8.00 - 10.00	X	I
10.00 - 12.40		J
12.40 - 18.00	Ku	
18.00 - 20.00	K	K
20.00 - 26.50		
26.50 - 40.00	Ka	L
40.00 - 60.00	Ondas Milimétricas	
60.00 - 100.00		M
100.00 - 140.00		N
140.00 - 300.00		-
300.00 -	Ondas Submilimétricas	-

Tabla 2.1 Banda de Frecuencias

2.6.6.2 Directividad y Ganancia

Las Definiciones estándar de términos de la IEEE para antenas, la directividad de una antena se define como la relación entre la intensidad de radiación en una dirección dada desde la antena hasta la intensidad de radiación promediada en todas las direcciones. La intensidad de radiación promedio es igual a la potencia total radiada por la antena dividida por 4π . Si la dirección no se especifica, la dirección de máxima intensidad de radiación está implícita [55].

2.6.6.3 Diagrama de Radiación o Patrón de Radiación

El *diagrama de radiación* es la representación gráfica de las características de radiación de una antena, en función de la dirección (coordenadas en azimut y elevación). Lo más habitual es representar la densidad de potencia radiada, aunque también se pueden encontrar diagramas

de polarización o de fase (ver figura 2.1). Atendiendo al diagrama de radiación, podemos hacer una clasificación general de los tipos de antena y podemos definir la directividad de la antena (antena isotrópica, antena directiva, antena bidireccional, antena omnidireccional,) [55].

Los parámetros más importantes del diagrama de radiación son:

- ❧ Dirección de apuntamiento: Es la de máxima radiación. Directividad y Ganancia.
- ❧ Lóbulo principal: Es el margen angular en torno a la dirección de máxima radiación.
- ❧ Lóbulos secundarios: Son el resto de los máximos relativos, de valor inferior al principal.
- ❧ Ancho del haz: Es el margen angular de direcciones en las que el diagrama de radiación de un haz toma un valor de 3dB por debajo del máximo. Es decir, la dirección en la que la potencia radiada se reduce a la mitad.
- ❧ Relación de lóbulo principal a secundario (SLL): Es el cociente en dB entre el valor máximo del lóbulo principal y el valor máximo del lóbulo secundario.
- ❧ Relación delante-atrás (FBR): Es el cociente en dB entre el valor de máxima radiación y el de la misma dirección y sentido opuesto.

2.6.6.4 Ancho del Haz

El *ancho del haz* de una antena se define como el ancho del haz a la mitad de potencia. Se encuentra en el pico de intensidad de radiación, luego se localizan los puntos de ambos lados del pico que representan la mitad de la potencia de intensidad del pico [55].

La distancia angular entre los puntos de mitad de potencia se define como el ancho del haz. La mitad de la potencia expresada en decibeles es de -3 dB, por lo tanto, algunas veces el ancho del haz a mitad de potencia es referido como el ancho del haz a 3 dB. Generalmente se consideran tanto el ancho de haz vertical como horizontal. Suponiendo que la mayoría de la potencia radiada no se disperse en lóbulos laterales, entonces la ganancia directiva es inversamente proporcional al ancho del haz: cuando el ancho del haz decrece, la ganancia directiva se incrementa [55].

2.6.6.5 Impedancia

Es el cociente entre el voltaje aplicado a los terminales de entrada de la antena y la corriente resultante. En general tiene una componente resistiva y una reactiva; sin embargo, si el punto de alimentación de la antena está en un máximo de corriente, la componente reactiva resulta despreciable, por tanto, *la impedancia de entrada es igual a la suma de la resistencia de radiación más la resistencia de pérdida*. Si la impedancia no presenta una parte reactiva (puramente resistiva) a una frecuencia determinada se dice que es una antena resonante [55].

La resistencia de radiación es un valor asignado a una resistencia ficticia cuyo valor es el que tendría una resistencia que disipara la misma potencia eléctrica entregada por la antena con la misma potencia radiada por la antena. En la práctica no toda la potencia entregada por la antena es radiada totalmente al espacio que la rodea. Una parte se disipa bajo la forma de calor

a causa de las pérdidas resistivas provocada por los conductores, aisladores de soporte, la torre y los cables de anclaje [55].

Las pérdidas óhmicas están determinadas por la frecuencia de trabajo. En bajas frecuencias, estas pérdidas son pequeñas comparadas con la resistencia de radiación y la antena es un radiador muy eficiente. En altas frecuencias, donde la antena es relativamente corta con relación a su longitud, el suelo es un componente esencial que forma parte del sistema irradiante. La altura de la antena respecto al suelo conductor es un factor importante que afecta la resistencia de radiación. Algunas ondas son reflejadas por el suelo, y al regresar a la antena, inducen corriente cuya magnitud y fase dependen de la distancia entre la antena y el suelo. Si llegan en fase habrá más radiación y sucede lo contrario si llegan en oposición de fase [55].

2.6.6.6 Eficiencia de la Antena

Es la relación entre la potencia radiada por la antena y la potencia total entregada a la antena para una frecuencia dada de operación. Se puede considerar que la resistencia total de carga está formada por dos resistencias en serie, una de valor de R (resistencia de radiación) y otra de valor r que representa la disipación óhmica de la antena [55].

2.6.6.7 Polarización

La *polarización* se define como la orientación del campo eléctrico de una onda electromagnética. En general, la polarización se describe por una elipse. Hay dos casos especiales de la polarización elíptica: la *polarización lineal* y la *polarización circular* [55].

Con la polarización lineal, el vector del campo eléctrico se mantiene en el mismo plano del eje de la antena todo el tiempo. El campo eléctrico puede posicionar a la antena en una orientación vertical, horizontal o en algún ángulo intermedio entre los dos [55].

Con la antena en *polarización horizontal*, las reflexiones causan variaciones en la intensidad de la señal recibida. Las antenas horizontales tienen menos probabilidad de captar interferencias generadas por el hombre que las normalmente polarizadas verticalmente [55].

En la polarización circular el vector del campo eléctrico aparece rotando con un movimiento circular en la dirección de la propagación, haciendo una vuelta completa para cada ciclo de radio frecuencia (RF). Esta rotación puede ser hacia la derecha o hacia la izquierda [55].

2.6.6.8 Campos de Inducción de Radiación

De la energía de los campos electromagnéticos que se generan alrededor de la antena, una zona cercana a la misma forma parte de los **campos de inducción** donde la intensidad de los campos es una función inversa del cuadrado de la distancia. El dispositivo se comporta como un circuito resonante donde hay intercambio de energía entre el campo eléctrico y el campo

magnético y no hay radiación. Uno de los campos es máximo cuando el otro pasa por cero y a su vez se encuentran desfasados 90° en el tiempo [55].

Otra zona situada a unas pocas longitudes de onda de la antena la constituyen los **campos de radiación** donde se manifiesta la energía de radiación de la antena. La intensidad de los campos radiados es una función inversa de la distancia. Estos campos obedecen al hecho de que se requiere un cierto tiempo para que los campos se transfieran de un medio físico (antena) al espacio libre. Parte del campo original permanece en la antena y la otra parte se propaga como una onda electromagnética por el espacio libre [55].

2.6.6.9 Longitud Eléctrica y Longitud Física

La longitud de onda en una línea de transmisión es menor que la longitud de onda en espacio libre por el cambio de la velocidad de propagación de la onda respecto al espacio libre o vacío. De manera similar, una antena tendrá su propia longitud de onda física que será menor a la longitud de onda eléctrica que opera en el espacio libre, provocada por su cercanía con suelo y otros medios conductores, también los soportes y la torre de contención que introducen capacitancias que afectan la velocidad de la onda en la antena [55].

También si el área transversal del conductor de la antena aumenta, también lo hace su permeabilidad relativa y por tanto la velocidad de la onda disminuye. Solamente si el espesor es despreciable y el conductor se encuentra aislado en el espacio libre, las velocidades tienden a igualarse. La longitud física es la longitud real que debe tener la antena y es menor que la longitud eléctrica en el espacio libre. Este acortamiento se conoce en la práctica como efecto de borde [55].

2.6.6.10 Ancho de Banda

Es el intervalo de frecuencias en la cual debe funcionar satisfactoriamente la antena, dentro de las normas técnicas vigentes a su aplicación. Puede ser descrito en términos de porcentaje respecto a la frecuencia central de la banda [55].

2.6.6.11 Intensidad del Campo

La magnitud de la energía en la componente eléctrica y en la magnética es exactamente la misma. La variación de una componente resulta en la formación de la otra. Si ambas componentes tienen la misma energía, la determinación de una componente dará el valor de la otra. Se ha acordado expresar la intensidad de campo en términos de su componente eléctrica, es decir, en unidades de Volts/metro [55].

Los parámetros utilizados para el diseño de una nanoantena dados por [66], son:

- La impedancia de superficie del grafeno se puede expresar de la siguiente forma de la ecuación 2.26.

$$Z(\omega) = \frac{1}{\sigma(\omega)} \quad (2.26)$$

✎ La impedancia de superficie del parche en la banda en THz se puede aproximar por medio de la ecuación 2.27, [66].

$$Z_g = j \left(\frac{D}{D - \frac{g}{2}} \frac{1}{\sigma} - \frac{1}{\omega C_{eff}} \right) = \frac{1}{j\omega C_g(\omega)} \quad (2.27)$$

donde C_g representa la capacitancia del parche de grafeno y C_{eff} (ver ecuación 2.28) es la capacitancia efectiva relacionada con la geometría del parche y el entorno de fondo donde ϵ_0 es la permitividad del espacio libre, ϵ_r es la permitividad relativa del sustrato [66].

$$C_{eff} = \frac{1}{\pi} \epsilon_0 (\epsilon_r + 1) D \ln \left[\text{CSC} \left(\frac{\pi}{2} \frac{g}{D} \right) \right] \quad (2.28)$$

La impedancia de la línea de transmisión conectada a tierra se puede expresar como la ecuación 2.29.

$$Z_d = \frac{j\eta_0 \tan(k_d hp)}{\sqrt{\epsilon_r}} = j\omega L_d(\omega) \quad (2.29)$$

$$k_d = \omega \sqrt{\mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r} \quad (2.30)$$

donde η_0 es la impedancia de onda en el espacio libre, hp es el grosor del sustrato, k_d es el número de onda de la onda incidente (ecuación 2.30), y L_d representa la inductancia del sustrato conectado a tierra [66].

La impedancia total es la combinación paralela de Z_d y Z_g . La magnitud de reflexión de la onda incidente se puede calcular como se representa en la ecuación 2.31.

$$R = \frac{(Z_s - \eta_0)}{(Z_s + \eta_0)} \quad (2.31)$$

La frecuencia de resonancia de la superficie se puede expresar como la ecuación 2.32 [66].

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{C_g L_g}} \quad (2.32)$$

Dado que algunas de las ondas viajan en el sustrato ϵ_r y algunas en el aire ϵ_0 , además del sustrato, el parche también tiene una constante dieléctrica, se define una constante dieléctrica efectiva $\epsilon_{r,efec}$, que contempla ambos sustratos. En el caso de que $W > h$, la constante dieléctrica efectiva está dada por la ecuación 2.33.

$$\epsilon_{r,efec} = \frac{\epsilon_r + 1}{2} + \frac{\epsilon_r - 1}{2} * \left(1 + 12 \frac{h}{W}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2.33)$$

Puesto que el campo no queda totalmente confinado en los bordes del parche, hay un parámetro que toma en cuenta este efecto: La longitud efectiva (L_{efec}) calculada como se muestra en la ecuación 2.34, es la longitud física del parche con una pequeña extensión (ΔL), en cada extremo, la expresión analítica está dada por la ecuación 2.4:

$$L_{efec} = L_p + 2 * \Delta L \quad (2.34)$$

$$L_p = m * \frac{\pi}{\text{Re}\{k_{spp}\}} \quad (2.35)$$

donde ΔL , depende de $\epsilon_{r,efec}$ y la relación W/h , y se expresa en la ecuación 2.36.

$$\Delta L = 0.412 * h * \frac{(\epsilon_{efec} + 0.3) \left(\frac{W}{h} + 0.264\right)}{(\epsilon_{efec} - 0.258) \left(\frac{W}{h} + 0.8\right)} \quad (2.36)$$

Para diseñar la antena tipo parche, se especifica la frecuencia de resonancia, la constante dieléctrica y el grosor del sustrato. Por lo que se define la anchura del parche con la ecuación 2.37

$$Wp = \frac{\lambda_0}{2} \sqrt{\frac{2}{\epsilon_r + 1}} \quad (2.37)$$

donde λ_0 es la longitud de onda, dada por la ecuación 2.38:

$$\lambda_0 = \frac{c_0}{f_r} \quad (2.38)$$

siendo c_0 la velocidad de la luz en el espacio libre y f_r la frecuencia de resonancia.

De lo anterior se toma como base para el desarrollo de la metodología requerida en el diseño de una nanoantena hecha a base de grafeno utilizando la teoría de grafos, implementando una relación de los índices topológicos del parche obtenidos de un sistema de cómputo propuesto con lo que podemos definir la forma geométrica del parche y los parámetros de transmisión en el rango de los Tera Hertz.



CAPÍTULO 3



3. METODOLOGÍA

Para el análisis numérico sistemático de una nanoantena hecha a base de grafeno, se calculan los descriptores topológicos, específicamente el primero y segundo índice de Zagreb, el primero y segundo índice múltiple de Zagreb, el índice aumentado de Zagreb, el índice de armónico, el índice hiper Zagreb y el índice Wiener.

De las expresiones numéricas de los descriptores moleculares se obtiene la geometría del parche que se utiliza para el diseño de la nanoantena hecha a base de grafeno.

Preservando la simplicidad computacional que caracteriza a los modelos de diseño para una antena de parche hecha a base de grafeno. En este capítulo se obtiene la dispersión de radiación de los plasmones polarizados superficiales aplicando la ecuación de Kubo de tipo Drude, del modelo de conductividad compleja, para que la antena transmita en el rango de los Tera Hertz.

3.1 Método computacional para el diseño de nanoantenas

El método computacional utilizado para el desarrollo de esta tesis es el método de elementos finitos (FE por sus siglas en inglés). Este método lo empleamos de manera rutinaria en la obtención de los descriptores moleculares que representan las dimensiones del parche de la nanoantena.

En particular, este método permite estudiar la geometría del diseño de la nanoantena propuesta y aplicarse al estudio de la propagación de los plasmones polarizados superficialmente en el grafeno para determinar su conductividad.

Un modo de aplicación específico para simular la propagación de ondas electromagnéticas (EM) en un medio de dos dimensiones (2D) y su posterior publicación de resultados se utiliza MATLAB.

3.2 Diagrama de flujo de la metodología del diseño

En esta sección se presenta un diagrama de flujo (Figura 3.1) de la metodología propuesta para diseñar una nanoantena hecha a base de grafeno utilizando la correlación de los índices topológicos y programado en Matlab. El primer paso en la metodología es el establecer los índices topológicos del grafeno que se utilizan para el diseño del parche, después se establece la frecuencia de operación de la nanoantena. Enseguida se elige el sustrato (en esta tesis se utiliza silicio). Posteriormente se realiza el cálculo de las dimensiones de la geometría del parche y se continúa con el diseño de las líneas de alimentación.

Es necesario mencionar que, en cada etapa, después del cálculo de alguna dimensión de la antena, se compila el algoritmo propuesto para obtener una respuesta más cercana a los requerimientos de la nanoantena a diseñar.

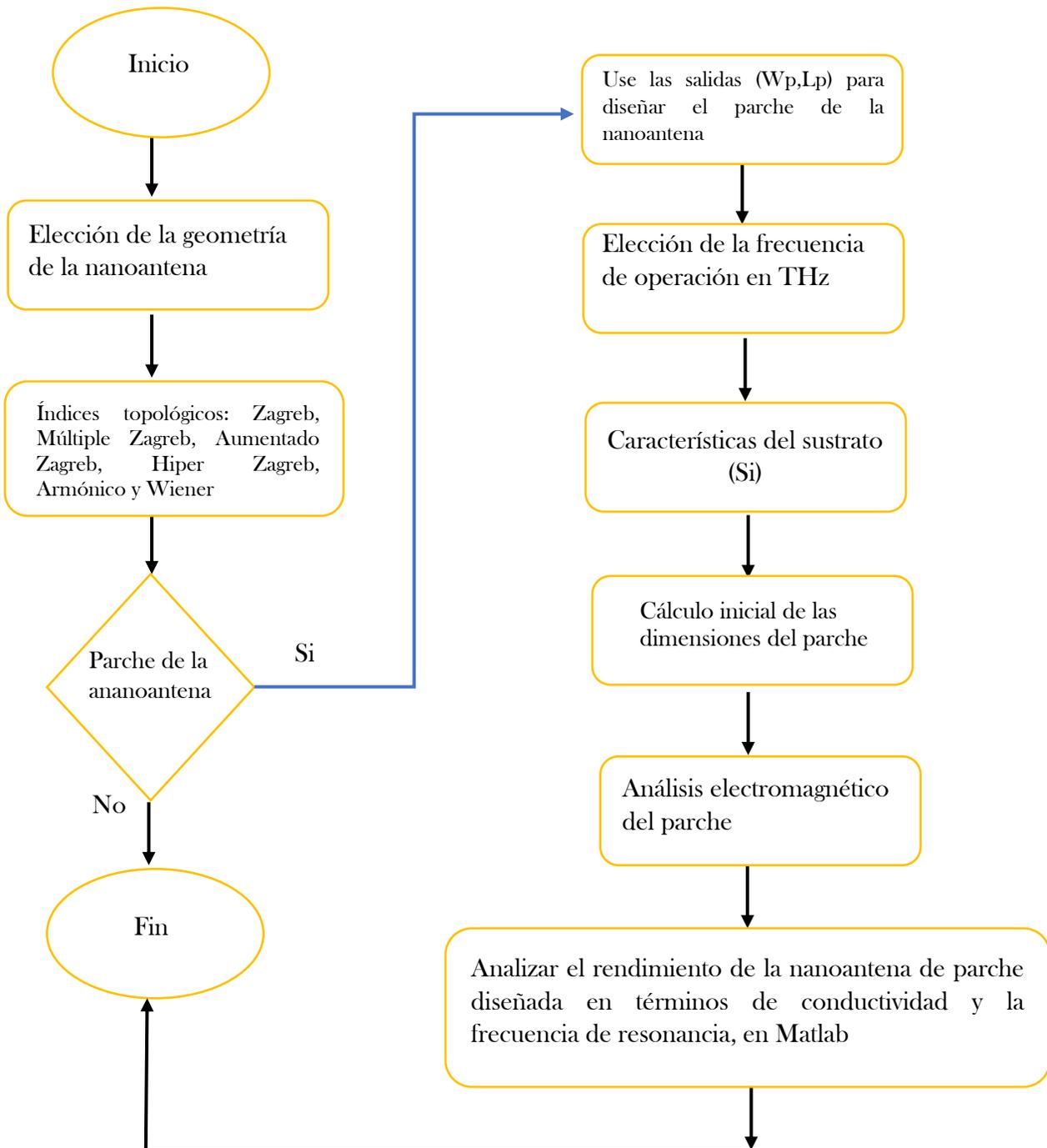


Figura 3.1. Fuente: Elaboración propia. Diagrama de flujo de la metodología de diseño de una nanoantena hecha a base de grafeno.

3.3 Índices topológicos del grafeno

Para definir los índices topológicos, el primer paso es representar a los átomos por puntos (llamados vértices) y a los enlaces por segmentos (a los que se les denomina “aristas”), de esta manera, se obtiene el “grafo” de la molécula. Después, se numeran aleatoriamente los distintos átomos (o “vértices” en expresión topológica) y se construye la “Matriz Topológica”. A partir de esta matriz y de los algoritmos adecuados, aplicando un sistema de cómputo, se obtienen los índices topológicos utilizados para el diseño de nanoantenas hechas a base de grafeno.

Los resultados de los índices topológicos que se describen a continuación fueron obtenidos del algoritmo programado utilizando un software computacional de alto rendimiento, el cual considera al grafeno con ‘t’ filas y ‘s’ anillos de hexágonos en cada fila y a m_{ij} , son las aristas o bordes que conectan los vértices de los grados d_i y d_j . Se contempla una estructura bidimensional que contiene solo $m_{2,2}$, $m_{2,3}$ y $m_{3,3}$ aristas o bordes de la tabla 3.1 [30], para definir los bordes.

Fila	$ m_{2,2} $	$ m_{2,3} $	$ m_{3,3} $
1	3	2s	3s-2
2	1	2	3s-1
3	1	2	3s-1
4	1	2	3s-1
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.
t	3	2s	s-1
Total	t+4	4s+2t-4	3ts-2s-t-1

Tabla 3.1 Relación de aristas o bordes con la configuración de $m_{2,2}$, $m_{2,3}$ y $m_{3,3}$ [30].

3.3.1 Índice Zagreb para el Grafeno

Por ejemplo, el primer y segundo índice de Zagreb, son obtenidos del algoritmo programado, se sustituyen los valores de $|m_{2,2}| = t+4m_{2,2}$, $|m_{2,3}| = 4s+2t-4$ y $|m_{3,3}| = 3ts-2s-t-1$ en la ecuación 2.8, que da como resultado la ecuación 3.1 para el primer índice Zagreb cuando $t \neq 1$ y la ecuación 3.2 para $t=1$.

$$\text{Muv} \begin{cases} m_{2,2}: du = 2, dv = 2 \\ m_{2,3}: du = 2, dv = 3 \\ m_{3,3}: du = 3, dv = 3 \end{cases}$$

$$M_1(G) = 8t + 8s + 18ts - 10 \quad \text{para } t \neq 1 \quad (3.1)$$

Para cuando $t = 1$, se considera a $|m_{2,2}| = 6$, $|m_{2,3}| = 4s-4$ y $|m_{3,3}| = s-1$, los cuales se sustituyen en la ecuación 2.8.

$$M_1(G) = 26s - 2 \quad \text{para } t = 1 \quad (3.2)$$

Para el Segundo índice de Zagreb del grafeno con 't' filas y 's' anillos hexagonales en cada fila, cuando $t \neq 1$ y sustituyendo $|m_{2,2}| = t+4$, $|m_{2,3}| = 4s+2t-4$ y $|m_{3,3}| = 3ts-2s-t-1$ en la ecuación 2.9, se obtiene la ecuación 3.3.

$$M_2(G) = 7t + 6s + 27ts - 17 \quad \text{para } t \neq 1 \quad (3.3)$$

En el segundo índice Zagreb para $t = 1$, considerando $|m_{2,2}| = 6$, $|m_{2,3}| = 4s-4$ y $|m_{3,3}| = s-1$ y sustituyendo en la ecuación 2.9 se obtiene la ecuación 3.4.

$$M_1(G) = 33s - 9 \quad \text{para } t = 1 \quad (3.4)$$

3.3.2 Índices Múltiples de Zagreb para el Grafeno

El primer índice múltiple de Zagreb del grafeno con 't' filas y 's' anillos hexágonos de grafeno en cada fila para $t \neq 1$ y sustituyendo $|m_{2,2}| = t+4$, $|m_{2,3}| = 4s+2t-4$ y $|m_{3,3}| = 3ts-2s-t-1$ en la ecuación 2.10, y para $t=1$ se sustituye $|m_{2,2}| = 6$, $|m_{2,3}| = 4s-4$ y $|m_{3,3}| = s-1$, se obtienen la ecuación 3.5 y 3.6 respectivamente.

$$PM_1(G) = [(2)^{2t+8}] * [(5)^{4s+2t-4}] * [(6)^{3st-2s-t-1}] \quad \text{para } t \neq 1 \quad (3.5)$$

$$PM_1(G) = (1.092267) * (5^{4s}) * (6^s) \quad \text{para } t = 1 \quad (3.6)$$

En el segundo índice múltiple de Zagreb del grafeno cuando $t \neq 1$ y sustituyendo $|m_{2,2}| = t+4$, $|m_{2,3}| = 4s+2t-4$ y $|m_{3,3}| = 3ts-2s-t-1$ en la ecuación 2.11 y para $t=1$, $|m_{2,2}| = 6$, $|m_{2,3}| = 4s-4$, $|m_{3,3}| = s-1$, obtenemos las ecuaciones 3.7 y 3.8 respectivamente.

$$PM_2(G) = [(2)^{2t+8}] * [(6)^{4s+2t-4}] * [(3)^{6st-2t-4s-2}] \quad \text{para } t \neq 1 \quad (3.7)$$

$$PM_2(G) = (0.351166)(6^{4s})(9^s) \quad \text{para } t = 1 \quad (3.8)$$

3.3.3 Índices Aumentado de Zagreb para el Grafeno

Utilizando la ecuación 2.12, el índice aumentado de Zagreb del grafeno y sustituyendo $|m_{2,2}|=t+4$, $|m_{2,3}|=4s+2t-4$ y $|m_{3,3}|=3ts-2s-t-1$ para $t \neq 1$ y $|m_{2,2}|=6$, $|m_{2,3}|=4s-4$, $|m_{3,3}|=s-1$ para $t=1$ se obtienen las ecuaciones 3.9 y 3.10 respectivamente.

$$AZI(G) = (12.609375)t + (7.953125)s + (34.171875)ts - 11.390625 \quad \text{para } t \neq 1 \quad (3.9)$$

$$AZI(G) = (43.390625)s + (4.609375) \quad \text{para } t = 1 \quad (3.10)$$

3.3.4 Índice Hiper Zagreb para el Grafeno

El índice Hiper Zagreb del grafeno con 't' filas y 's' anillos hexagonales en cada fila, para $t \neq 1$, se sustituye en la ecuación 2.13 $|m_{2,2}|=t+4$, $|m_{2,3}|=4s+2t-4$ y $|m_{3,3}|=3ts-2s-t-1$ y para $t=1$, se sustituye $|m_{2,2}|=6$, $|m_{2,3}|=4s-4$, $|m_{3,3}|=s-1$ dando como resultado la ecuación 3.11 y 3.12 respectivamente.

$$HM(G) = 30t + 28s + 108ts - 72 \quad \text{para } t \neq 1 \quad (3.11)$$

$$HM(G) = 136s - 40 \quad \text{para } t = 1 \quad (3.12)$$

3.3.5 Índice Armónico para el Grafeno

El índice armónico con 't' filas y 's' anillos hexagonales en cada fila, para $t \neq 1$ se sustituye con $|m_{2,2}|=t+4$, $|m_{2,3}|=4s+2t-4$ y $|m_{3,3}|=3ts-2s-t-1$ en la ecuación 2.14 y para $t=1$, $|m_{2,2}|=6$, $|m_{2,3}|=4s-4$, $|m_{3,3}|=s-1$, obteniendo las ecuaciones 3.13 y 3.14 respectivamente.

$$H(G) = (0.9667)t + (0.93334)s + ts + (0.0667) \quad \text{para } t \neq 1 \quad (3.13)$$

$$H(G) = (1.9333)s + (1.0667) \quad \text{para } t = 1 \quad (3.14)$$

3.3.6 Índice Wiener para el Grafeno

Los índices basados en la matriz de distancias se llaman a veces índices geométricos, para distinguirlos de aquellos derivados de la matriz de adyacencia. El índice Wiener fue definido originalmente como el número de enlaces entre todos los pares de átomos de una molécula acíclica. El índice Wiener es uno de los índices topológicos más estudiado debido a su simplicidad y buena correlación con las propiedades estructurales del grafo molecular.

El índice Wiener se determina a partir de la Matriz de Distancias. Se utiliza grafo de la figura 2.3 en la que se encuentran numerados los vértices (unión entre dos o más aristas o bordes).

1. Se procede a hacer un recorrido en sentido horario, empezando por el vértice 1 con coordenadas D_{ij} donde i, j son los vértices.
2. Se pretende llegar del vértice 1 al 1, como no hay distancia o número de aristas para llegar a dicho vértice se coloca en la matriz un “cero” en la posición 1,1.
3. Para llegar del vértice 1 al 2, se tiene una sola arista o borde, por lo que se coloca un “uno” en la posición 1,2.
4. El procedimiento se sigue hasta recorrer todo el grafo quedando el siguiente arreglo y la matriz de distancias:

$$\begin{array}{l}
 D_{11} = 0, D_{12} = 1, D_{13} = 2, D_{14} = 3, D_{15} = 2, D_{16} = 1 \\
 D_{21} = 1, D_{22} = 0, D_{23} = 1, D_{24} = 2, D_{25} = 3, D_{26} = 2 \\
 D_{31} = 2, D_{32} = 1, D_{33} = 0, D_{34} = 1, D_{35} = 1, D_{36} = 3 \\
 D_{41} = 3, D_{42} = 2, D_{43} = 1, D_{44} = 0, D_{45} = 1, D_{46} = 2 \\
 D_{51} = 2, D_{52} = 3, D_{53} = 2, D_{54} = 1, D_{55} = 0, D_{56} = 1 \\
 D_{61} = 1, D_{62} = 2, D_{63} = 3, D_{64} = 2, D_{65} = 1, D_{66} = 0
 \end{array}$$

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cccccc}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\
 1 & 0 & 1 & 2 & 3 & 2 & 1 \\
 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 3 & 2 \\
 3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\
 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\
 5 & 2 & 3 & 2 & 1 & 0 & 1 \\
 6 & 1 & 2 & 3 & 2 & 1 & 0
 \end{array}
 \end{array}$$

Matriz de Distancias

El Índice de Wiener será igual a la mitad de la suma de la valencia de cada vértice del grafo hexagonal.

Los cálculos para el grafo de la figura 2.3 y utilizando la ecuación 2.15 y 2.16 se obtiene:

$$\begin{array}{l}
 We(G_6) = (0 + 1 + 2 + 3 + 2 + 1) = 9 \\
 (1 + 0 + 1 + 2 + 3 + 2) = 9 \\
 (2 + 1 + 0 + 1 + 2 + 3) = 9 \\
 (3 + 2 + 1 + 0 + 1 + 2) = 9 \\
 (2 + 3 + 2 + 1 + 0 + 1) = 9 \\
 (1 + 2 + 3 + 2 + 1 + 0) = 9 \\
 \hline
 \overline{54}
 \end{array}$$

$$W = \frac{1}{2} \sum_i^m \delta_i = \frac{9 + 9 + 9 + 9 + 9 + 9}{2} = \frac{54}{2} = 27$$

Así para un grafo hexagonal (figura 2.3) que representa la forma geométrica del grafeno, el índice de Wiener es: $W=27$.

```
clear all;
opcion=0;
while opcion~=7
    disp ('Bienvenido, selecciona una opcion');
    disp ('1.- INDICE WIENER');
    disp ('2.- INDICES ZAGREB');
    disp ('3.- INDICES MULTIPLES DE ZAGREB');
    disp ('4.- INDICE AUMENTADO DE ZAGREB');
    disp ('5.- INDICE ARMONICO');
    disp ('6.- INDICE HIPER ZAGREB');
    disp ('7.- SALIR');
    opcion=input(' ');
```

Figura 3.2 Fuente: Elaboración propia. Datos programados en el archivo de Matlab de los índices topológicos.

Para determinar los índices topológicos como el índice de Zagreb, el índice Múltiple Zagreb, el índice Aumentado Zagreb, el índice Hiper Zagreb, el índice Armónico y el índice Wiener del grafeno, como se muestra en la figura 3.2, se implementa el algoritmo de la figura 3.1, ya que en este trabajo de tesis describen una geometría mas realista del parche de una nanoantena hecha a base de grafeno.

3.4 Correlación de los índices topológicos del grafeno

Los índices topológicos proveen una forma para determinar ciertas propiedades del grafeno, como la conductividad. Su aplicación proporciona la diagonalización del Hamiltoniano para establecer las dimensiones del parche en el diseño de la nanoantena que genera la aproximación de amarre fuerte (tight-binding por sus siglas en ingles), dado por la ecuación 2.8, la cual brinda información sobre el número de estados de energía cero que están presentes en la malla hexagonal del grafeno, relacionado con el número de celdas (número de hexágonos presentes en la geometría del parche de la nanoantena de diseño).

Da como resultado una matriz de la forma de la ecuación 2.23 donde se obtienen las bandas π y de conductividad de acuerdo con la geometría del borde, es decir, los bordes en zig-zag o armchair como se muestra en la figura 3.3 obtenidos del algoritmo programado en MATLAB.

Es común que los hamiltonianos empleados tengan espectros simétricos alrededor de la energía cero, (ver figura 3.3). La parte negativa del espectro es la banda de valencia y la parte positiva es la banda de conducción.

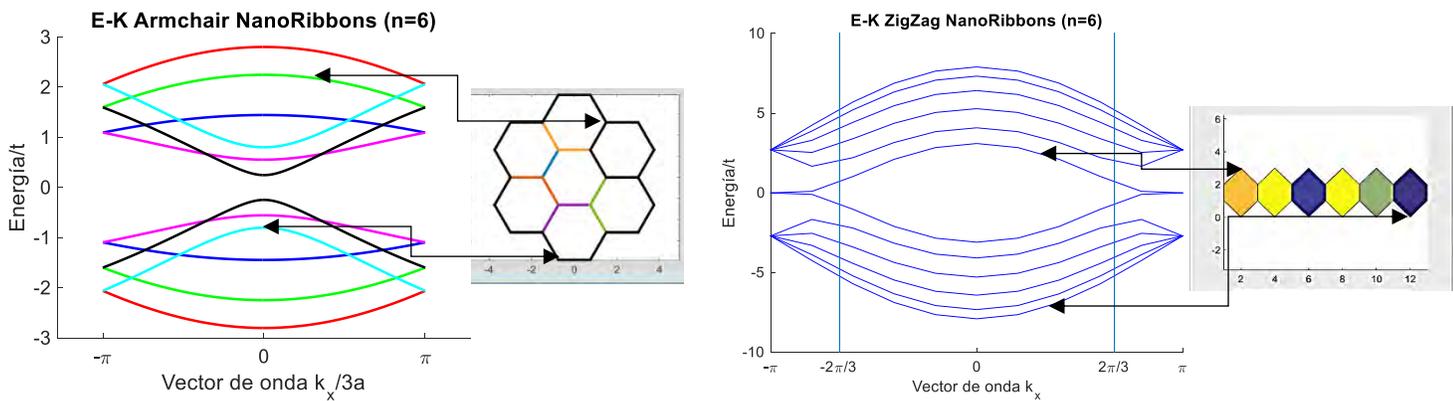


Figura 3.3. Fuente: Elaboración propia. (a) Estructura de bandas π de los bordes en armchair y (b) estructura de bandas π de los bordes en zig-zag, graficas obtenidas del algoritmo programado en MATLAB.

Los colores de las bandas de conducción son distintivos que indican el número de hexágonos utilizados para generar la geometría del parche que sirve como referencia para determinar la conductividad de la nanoantena.

Se analiza analítica y numéricamente la conductividad de las nanocintas de grafeno (GNR por sus siglas en inglés). Primero, la estructura de la banda electrónica y las funciones de onda de los electrones en las nanocintas de grafeno (GNR), y posteriormente se usa la ecuación de Kubo para estudiar la conductividad de las GNR en función del ancho y potencial químico de la nanocinta.

3.5 Análisis y diseño de una nanoantena hecha a base de grafeno

El diseño de la nanoantena de parche basada en nanocintas de grafeno tiene dimensiones en el orden de los nanómetros. La estructura básica de la nanoantena de parche consiste en un parche conductor de grafeno, separado por un delgado sustrato de silicio (Si) y un dieléctrico de óxido de silicio (SiO_2). Las formas geométricas cuadradas y rectangulares del parche radiante son las más utilizadas debido a su fácil análisis y fabricación.

Se calcula la sección transversal de extinción de la nanoantena depositada en un sustrato de silicio y dióxido de silicio, en el que las resonancias de la nanoantena vía polarización electrostática de los SPP se calculan numéricamente, manifestando perspectivas para diseñar nanoantenas a base de grafeno sintonizables. Estas antenas están diseñadas para permitir comunicaciones inalámbricas a nanoescala.

El diseño del parche se analiza mediante el método de línea de transmisión que establece una permitividad eléctrica efectiva, combinada con la permitividad eléctrica del aire y del sustrato, se asume que la nanoantena se encuentra inmersa dentro de un medio homogéneo con permitividad constante en toda su superficie.

Las características del campo y resonancia del parche se determinan por las ecuaciones establecidas en el capítulo 2, que están en base al largo y ancho del parche para una frecuencia en particular, las cuales se programaron en un sistema de cómputo.

Para diseñar una nanoantena de parche hecha a base de grafeno, se requiere definir el espesor, la constante dieléctrica y el grosor del material utilizado como sustrato; para este trabajo de tesis se utiliza silicio, además de la frecuencia de resonancia a la que se quiere trabajar, de lo anterior se procede a hacer el diseño de una nanoantena, que se describe en el siguiente apartado.

3.6 Implementación del algoritmo para el diseño de una nanoantena

A continuación se presenta el comportamiento de una nanoantena de grafeno en función del modelo matemático desarrollado en esta tesis, utilizando el código de la figura 3.5. Los parámetros considerados para la compilación se muestran en la tabla 3.2.

Tabla 3.2. Parámetros de entrada de una nanoantena de grafeno propuesta por de Luke Zakrajsek, et al. [42].

Parámetros	Descripción	Unidades
$\epsilon_r=11.9$	Dieléctrico del sustrato de Silicio	Adimensional
$H=500e-9$	Espesor del sustrato	Metros
$W_s=100e-9$	Ancho del sustrato	Metros
$L_p=5e-6$	Largo del parche	Metros
$W_p=10e-6$	Ancho del parche	Metros
$F_o=8e12$	Frecuencia de operación	Tera Hertz
$z=50$	Impedancia de entrada	Ohms

Se sigue el diagrama de flujo (figura 3.1) y se implementa el código programado ingresando los parámetros de la tabla 3.2 en el archivo de Matlab (figura 3.3), para este caso particular, la primera compilación de la nanoantena de grafeno no se consideran los índices topológicos.

```

disp('*****');
disp('**DISEÑO DE UNA NANOANTENA A BASE DE
GRAFENO **');
disp('*****');
Er=11.9;('Dielectrico del sustrato Si
H=90e-9;('Espesor del sustrato
Ws=(1000e-9);%'Ancho del sustrato
Lp=25e-9;%'Largo del parche Lp
Wp=600e-9;%'Ancho del parche Wp
Fo=8e12;%'Frecuencia de operación en Thz
z=50;%'Impedancia en ohm Zin

```

Figura 3.4 Fuente: Elaboración propia. Datos de ingreso en el archivo de Matlab, tomados de Luke Zakrajsek [42].

```

delta=pi/1000;
th=0: delta:pi;
th=th+0.00001;
W=(3e8/(2*f)) *sqrt(2/(er+1)) %Calculo del ancho del parche
Eeff=(er+1)/2+((er-1)/2)*(1+12*h/W)^(-1/2); %constante dieléctrica efectiva
ΔL=0.412*h*(((eff+0.3)*(W/h+0.264))/((eff-0.258)*(W/h+0.8))); %incremento de L Leff=3e8/(f*sqrt(eff)*2);
%Longitud efectiva mediante (2-2) L=Leff-2*ΔL %Longitud
lambda=Leff*2;
ko=2*pi/lambda; I1=(sin(th).^3).*(sin(ko*W*cos(th)/2)./cos(th)).^2; %Función para calcular G1
G1=(sum(I1)*delta)/120/pi/pi; %Conductancia
I2=besselj(0,ko*Leff*sin(th)).*(sin(th).^3).*(sin(ko*W*cos(th)/2)./cos(th)).^2; % Previa G12
G12=(sum(I2)*delta)/120/pi/pi; %Conductancia producida por las ranuras
Rin_0=1/2/(G1+G12); %Resistencia de entrada en el borde
y0=acos(sqrt(50/Rin_0))*Leff/pi; %distancia para que tenga 50 de impedancia de entrada

```

Figura 3.5 Fuente: Elaboración propia. Código Matlab utilizado para el diseño simple de una antena de parche.

Para la compilación del diseño de la nanoantena (Luke Zakrajsek [42]) se diseñó el archivo de Matlab de la figura 3.5, del que se obtiene una frecuencia de resonancia de 7.9 Tera Hertz, por lo que es un valor muy proximo al que publica Luke Zakrajsek et al. [42] (figura 3.6).

Command Window

```

Ancho del Parche (W_p) es: 6e-09 m
Longitud del Parche (L_p)es: 2.5e-08 m
Longitud de la Ranura (Fi) es: 0+8.4797e-22i m
Ancho de la Microcinta (Wf) es: 1.8095e-09 m
Ancho de la Ranura (Gpf) es;}: 6.942340097997297e+24 m
Longitud = Linea de Transmision (Lf) es: 9.8971e-23 m
Ancho del Plano de Tierra (Wg) es: 2.7e-07 m
Longitud del plano de Tierra (Lg) es: 2.7e-07m
Frecuencia de resonancia (fres) es: 7.90 THz
Ancho de banda (B) es:5.9218THz

```

Figura 3.6. Fuente: Elaboración propia. Resultados de la compilación de los datos de entrada correspondientes Luke Zakrajsek [42].

La figura 3.7 (a) muestra una frecuencia de resonancia de 8 THZ, y en la figura 3.6 (b) se muestran los resultados de la compilación del algoritmo propio con una frecuencia de resonancia de operación que es de 7.9 Tera Hertz. Al hacer una comparación de dichos resultados, aporta una certeza del algoritmo desarrollado en esta tesis, al considerar que son aproximadamente convergentes a los de Luke Zakrajsek et al.[42].

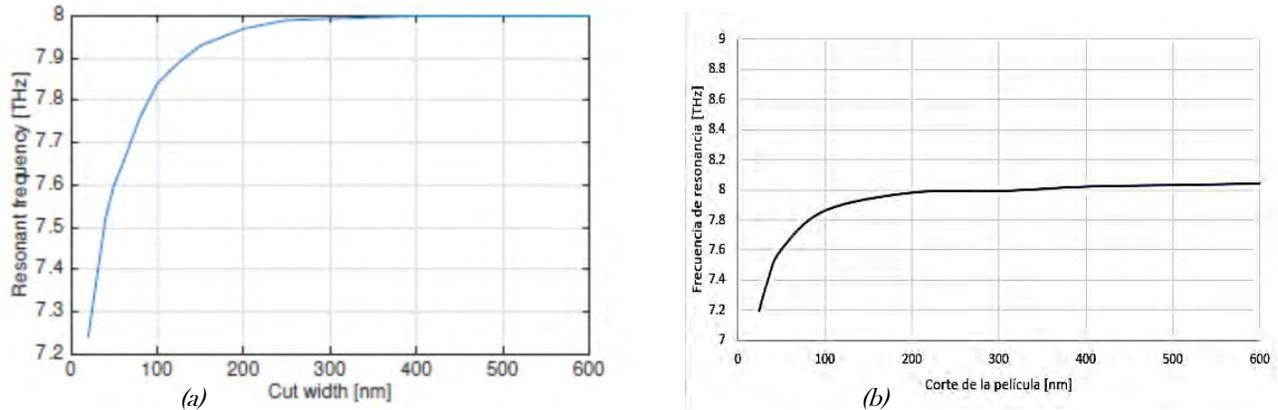


Figura 3.7 (a) Resultados obtenidos de Luke Zakrajsek, et. al [42], (b) Fuente: Elaboración propia. Resultados de la compilación.

Cabe resaltar que Luke Zakrajsek, et. al [42], no consideran los índices topológicos en el diseño de la nanoantena hecha a base de grafeno.

La importancia de implementar los índices topológicos en este trabajo de tesis es para determinar la geometría del parche de grafeno en el diseño de nanoantenas, ya que son descriptores moleculares, es decir, los índices topológicos describen las estructuras de los compuestos químicos y ayudan a predecir ciertas propiedades fisicoquímicas como el punto de ebullición, la entalpía de vaporización, la estabilidad molecular, la conductividad, la geometría molecular, etc.



CAPÍTULO

4



4. RESULTADOS

En este capítulo se presentan los resultados de diseño de una nanoantena hecha a base de grafeno, en el que se determinan los índices topológicos, como el índice de Zagreb, el índice Múltiple Zagreb, el índice Aumentado Zagreb, el índice Hiper Zagreb, el índice Armónico y el índice Wiener del grafeno, como se muestra en la figura 3.2, que describen una geometría mas realista del parche de la nanoantena.

4.1 Resultados del método numérico del diseño de una nanoantena hecha a base de grafeno y su conexión con los índices topológicos.

Los resultados obtenidos de la compilación del archivo de Matlab programado de la figura 3.2 del cálculo numérico de los índices topológicos del diseño de la nanoantena propuesta por Luke Zakrajsek, et. al [42] se presentan en la Figura 4.1, utilizando los parámetros propuestos de la tabla 3.2.

De lo anterior se consideró una capa de grafeno infinitesimalmente delgada y se realizó una discretización de tamaño finito del espacio.

Para modelar la hoja de grafeno, se aproxima una capa de grafeno a una hoja delgada equivalente con un ancho pequeño (parámetros de la tabla 3.2, pero finito y se establece una conductividad efectiva normalizada.

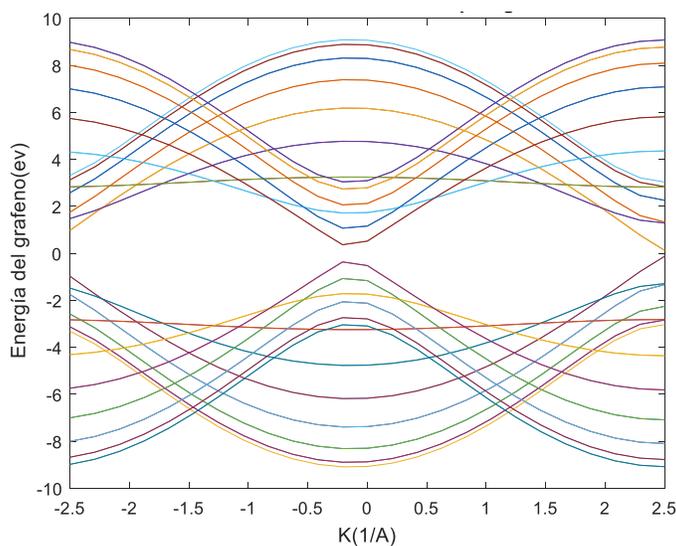


Figura 4.1 Fuente: Elaboración propia. Campo magnético de la geometría del parche de grafeno [42].

El campo electromagnético dispersado por la geometría del parche de grafeno, se acopla al modelo de la conductividad compleja del grafeno y se obtiene como resultado la figura 4.1, en función de las dimensiones del parche de grafeno.

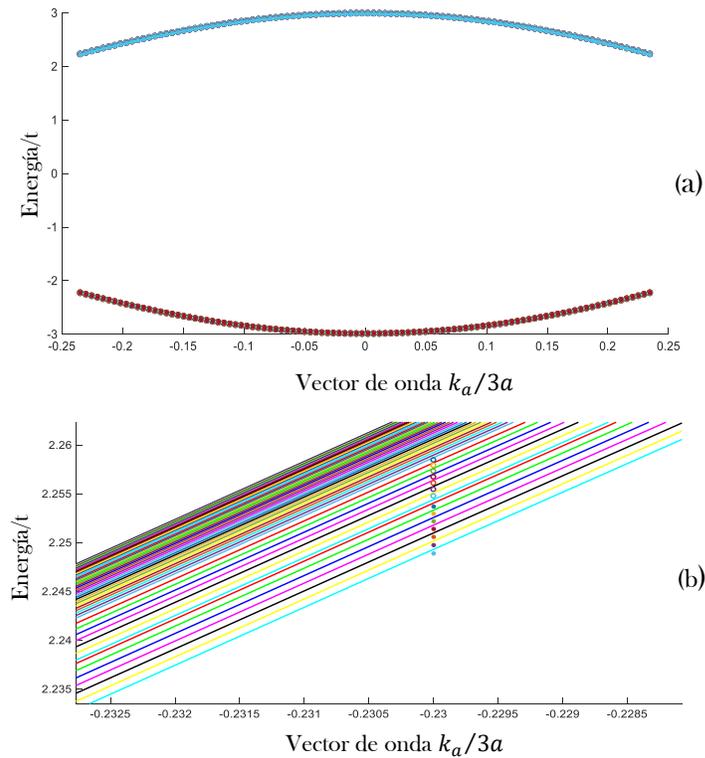


Figura 4.2 Fuente: Elaboración propia. (a) Índices topológicos en un arreglo del parche en configuración armchair; (b) aumento de la estructura de bandas.

Los resultados obtenidos de la figura 4.2 a partir de los índices topológicos indican que las nanocintas de grafeno en una configuración de borde en armchair tienen bandas gaps que dependen del ancho de borde y, además, tienen una dependencia en el número de cadenas presentes, es decir, del número de hexágonos en cada fila lo que determina la forma geométrica y dimensiones del parche para el diseño de la nanoantena.

Para una configuración en zigzag se observan los resultados de los índices topológicos en la figura 4.3, los colores de los grafos y de la estructura de bandas son solo para diferenciar una de otra. Se consideró el número de hexágonos por fila y su estructura de bandas de acuerdo a la densidad la nanocinta de grafeno.

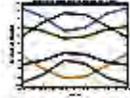
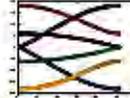
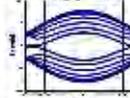
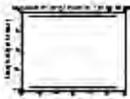
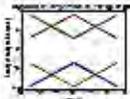
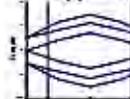
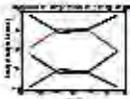
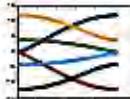
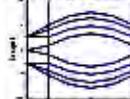
Geometría	Filas Hexágonos	Primer índice de Zagreb	Segundo índice de Zagreb	Primer índice múltiple de Zagreb	Segundo índice múltiple de Zagreb	Índice Aumentado de Zagreb	Índice Armónico	Índice Hiper-Zagreb
	$F=1$ $Hex=1$	MI(G): 24	M2(G): 24	PM1(G): $4.096001e-03$	PM2(G): $4.096000e-03$	AZI(G): 48	H(G): 3	HM(G): 96
Relación de dispersión de la energía								
	$F=1$ $Hex=2$	MI(G): 30	M2(G): 57	PM1(G): $1.536000e-07$	PM2(G): $4.777575e-07$	AZI(G): $9.139063e-01$	H(G): $4.933300e-00$	HM(G): 232
Relación de dispersión de la energía								
	$F=1$ $Hex=3$	MI(G): 76	M2(G): 90	PM1(G): $5.760002e-10$	PM2(G): $5.573563e-11$	AZI(G): $1.947813e-02$	H(G): $6.866500e-00$	HM(G): 368
Relación de dispersión de la energía								
	$F=1$ $Hex=4$	MI(G): 102	M2(G): 123	PM1(G): $2.160001e-14$	PM2(G): 6499837582238472	AZI(G): $1.781719e-02$	H(G): $8.799900e-00$	HM(G): 504
Relación de dispersión de la energía								

Figura 4.3 Fuente: Elaboración propia. Índices topológicos en un arreglo del parche en configuración zigzag y de la estructura de bandas.

Los arreglos en zigzag se comportan como semiconductores con bandas gaps inversamente proporcionales al ancho de éstas mismas cintas. Podemos comparar tanto la dispersión de los estados de borde, como el decaimiento y las oscilaciones obtenidas analíticamente, con los resultados numéricos del modelo tight-binding.

La conductividad superficial de una película infinita de grafeno consta de dos partes: el primer término es intrabanda y el segundo término es interbanda, las cuales se calcularon con el algoritmo propio programado en MATLAB y los resultados se muestran en la figura 4.4.

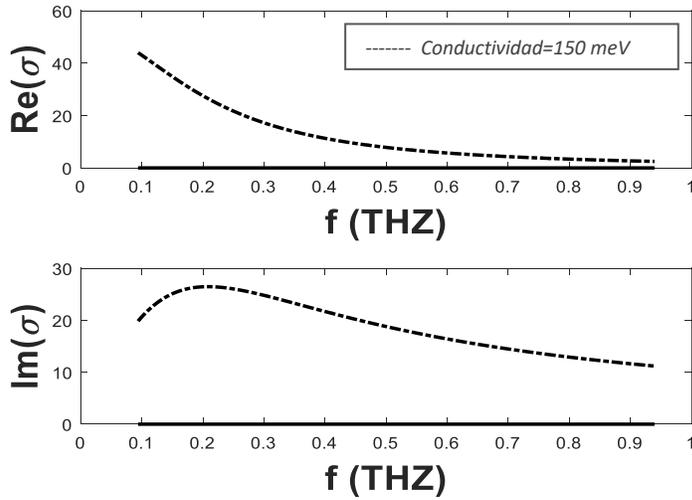


Figura 4.4 Fuente: Elaboración propia. Archivo de salida de los resultados obtenidos del código programado en Matlab, de la conductividad del grafeno con los parámetros de una nanoantena propuesta por Luke Zakrajsek, et al. [42].

Por lo que la nanoantena a una longitud resonante del SPP de 25 nm, está en función de la frecuencia, que se obtiene por el algoritmo propuesto del modelo de conductividad del la lámina de grafeno, y que da como resultaio 150 eV, para el diseño de Luke Zakrajsek, et al. [42].

Cabe aclarar que estos resultados son una aportación de este trabajo te tesis ya que Luke Zakrajsek, et al. [42] no considera en su iversticación los índices topoloógicos para el diseño de sus nano antenas.

4.2 Propuesta de una nanoantena hecha a base de grafeno y su conexión con los índices topológicos.

Se propone el diseño para una nanoantena hecha a base de grafeno con los parámetros de la tabla 4.1.

Parametros de la nanoantena			
Name	Expression	Value	Description
D	5[nm]	5E-9 m	Substrate thickness
W_line	11.9[nm]	0.0000113 m	50-ohm line width
W_Patch	500[nm]	0.0005 m	Patch width
L_Patch	500[nm]	0.0005 m	Patch length
W_Stub	50[nm]	0.00005 m	Tubing stub width
L_Stub	160[nm]	0.00016 m	Tuning stub length
W_Sub	600[nm]	0.0006 m	Substrate width
L_Sub	600[nm]	0.0006 m	Substrate length

Tabla 4.1. Fuente: Elaboración propia. Parámetros de la nanoantena propuesta.

Los resultados del patrón de radiación en 3D de la directividad obtenido del diseño propuesto programado de una nanoantena con los parámetros de la tabla 4.1 (geometría cuadrada), se observan en la figura 4.5

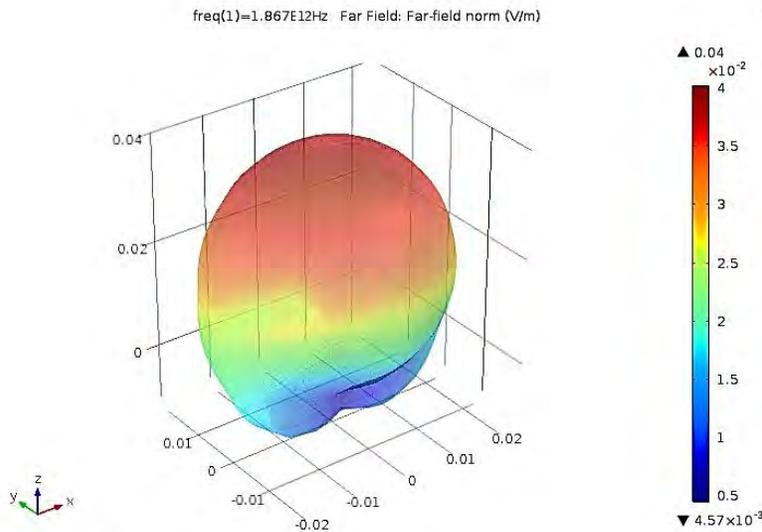


Figura 4.5. Fuente: Elaboración propia. Patrón de radiación 3D de la directividad.

La Figura 4.6 muestra el gráfico polar 2D para la ganancia en dB en el plano de acimut $\varphi = 0^\circ$ y $\varphi = 90^\circ$.

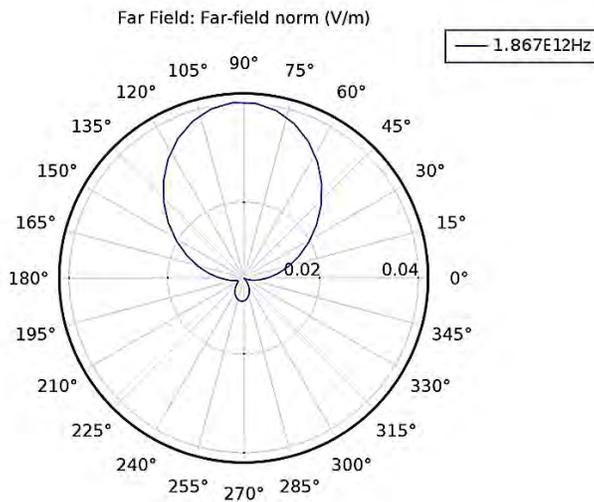


Figura 4.6 Gráfico polar 2D para la ganancia en dB en el plano de acimut $\varphi = 0^\circ$ y $\varphi = 90^\circ$.

La representación polar de la figura 4.6 se hace mediante el trazado de segmentos proporcionales a una magnitud de referencia y un ángulo $\varphi = 90^\circ$ que nos da la dirección respecto a una semirecta de referencia. Los resultados obtenidos son generalmente

normalizados. El valor máximo de la señal recibida para -4×10^{-2} dB de referencia, facilita la interpretación de los lóbulos secundarios en relación al frente de los bordes.

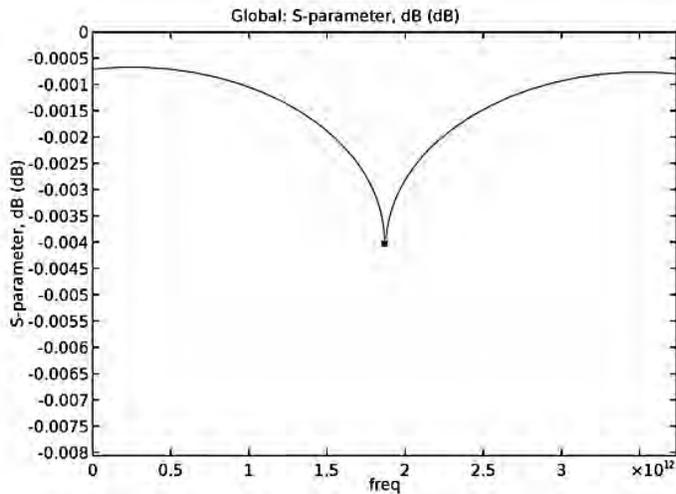


Figura 4.7 Fuente elaboración propia. Resultados obtenidos de la Pérdida de retorno de la nanoantena diseñada.

Global: S-parameter, dB (dB) Far Field: Far-field norm (V/m) Nyquist Plot: Voltage standing wave ratio (1)

La pérdida de retorno para la antena diseñada se representa en la figura 4.7, con un valor máximo de -4×10^{-2} dB a una frecuencia de resonancia de 1.867 THz.

En la figura 4.8 se muestra el resultado del patrón de radiación de la nanoantena de grafeno del diseño propuesto.

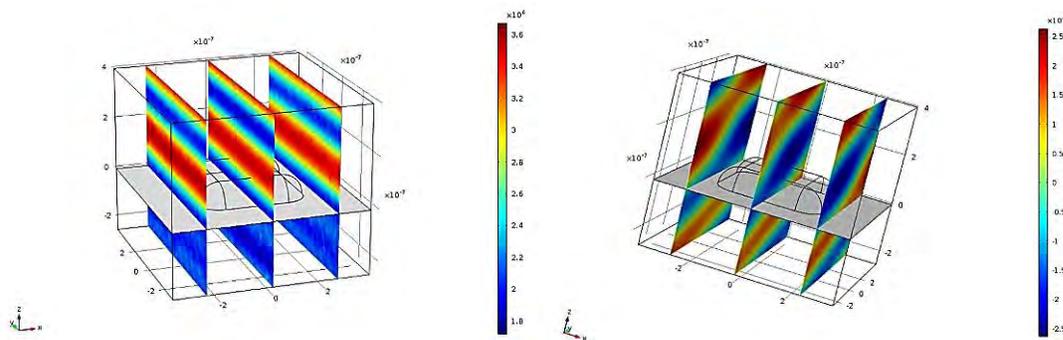


Figura 4.8 Fuente: Elaboración Propia. Resultados obtenidos del Patrón de radiación de la nanoantena diseñada con geometría cuadrada.

En la figura 4.9 se muestra el resultado del patrón de radiación del parche de grafeno de la nanoantena propuesta.

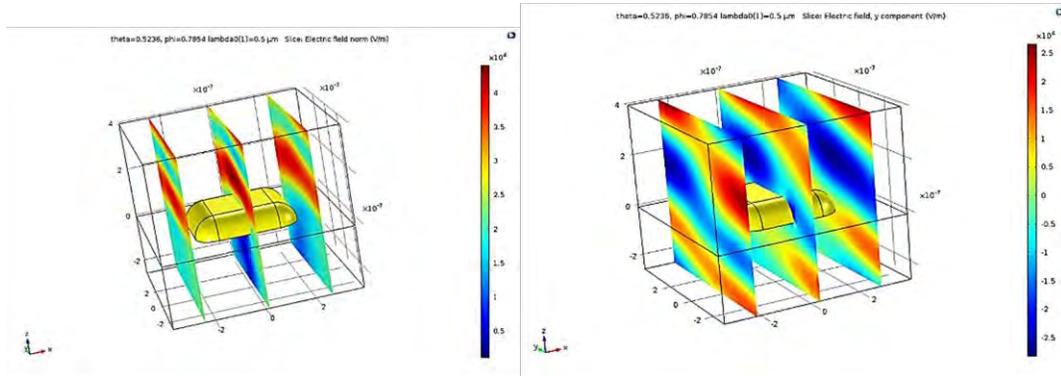


Figura 4.9 Fuente: Elaboración propia. Patrón de radiación del diseño del parche de grafeno de la nanoantena.

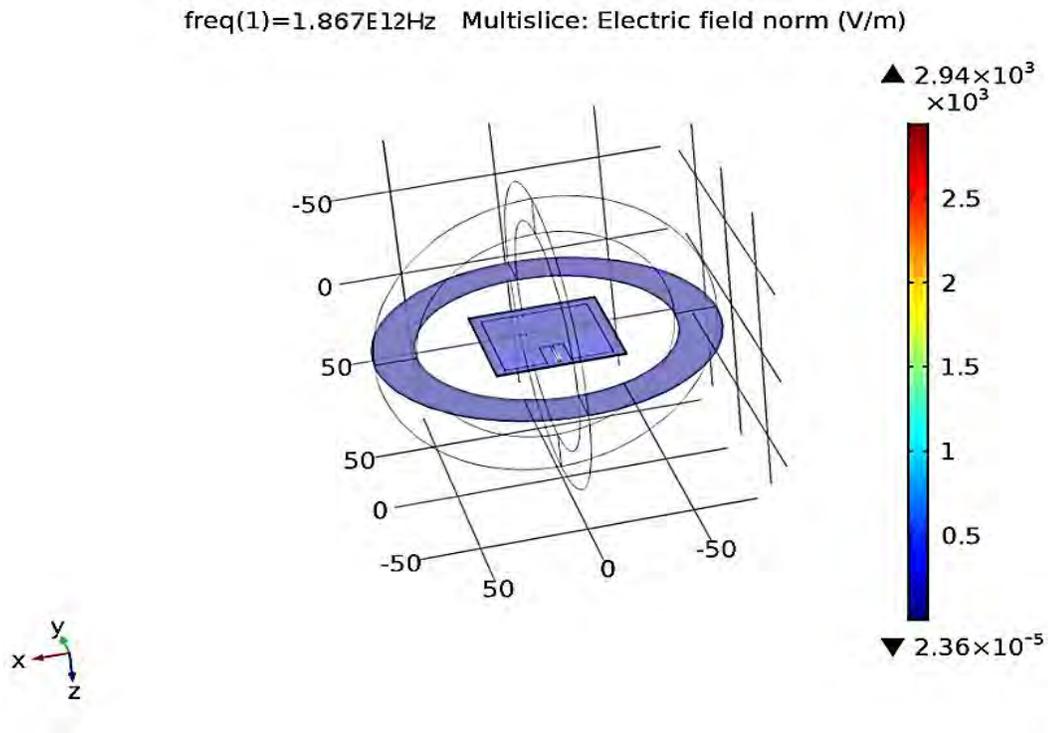


Figura 4.10 Fuente: Elaboración propia. Geometría del diseño de la nanoantena de parche de grafeno de los parámetros propuestos.

Para determinar el campo electromagnético dispersado por la estructura de grafeno, es necesario acoplar el modelo de la conductividad compleja del grafeno con la *Ecuación de Dispersión de las ondas SPP* y su resultado se muestra en la figura 4.10.

La estructura de bandas de las bandas π y π^* obtenida del algoritmo propuesto y programado en Matlab se consideró el caso ideal de una hoja infinita de grafeno que se obtiene por el modelo de tight-binding o amarre fuerte.

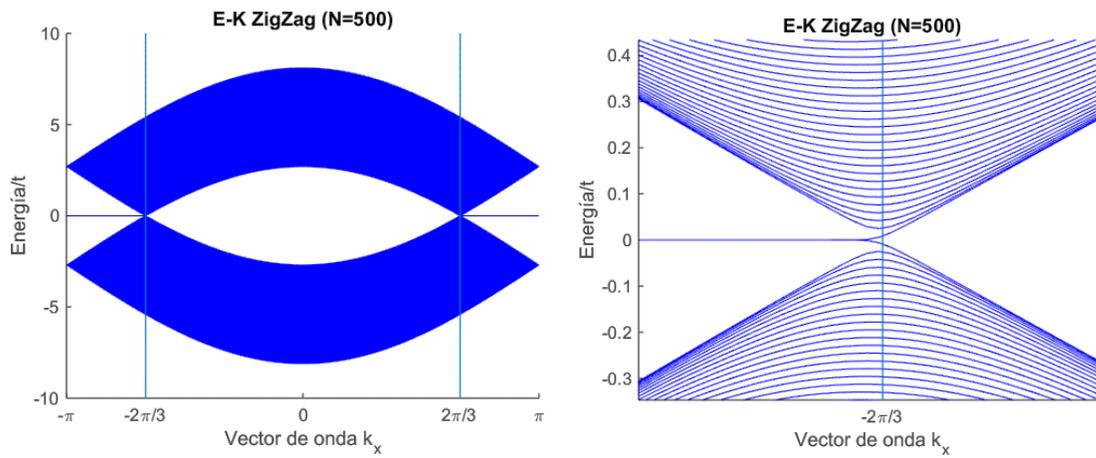


Figura 4.11 Fuente: Elaboración propia. Resultado de la estructura de banda de la Nanocinta en configuración zigzag.

La relación de dispersión efectiva para la nanocinta de grafeno mostrada en la figura 4.11 de borde en zigzag, muestra una nanocinta de 500nm de ancho. Los resultados obtenidos de este diseño propuesto modelando el material de grafeno funciona a nivel de los Tera Hetz (1.867 THz), para la nanoantena diseñada. El grafeno está representado por una superficie de conductividad que surge de un modo intrabanda y un modo interbanda de 7.812 eV como se observa en la figura 4.12. El gap dinámico aparece mas claramente para cuando el ancho de la cinta crece.

El arreglo en zigzag se comporta como un semiconductor con bandas gap inversamente proporcionales al ancho de la misma cinta. Por lo que se puede comparar tanto la dispersion de los estados de borde, como el decaimiento y las oscilaciones obtenidas analíticamente, con los resultados numericos del modelo tight-binding.

Al confinar la función de onda electronica dentro de una nanocinta, los modos electronicos dependa del ancho de la nanocinta y tambien de las condiciones de borde, es decir, de la configuración en zigzag o armchair.

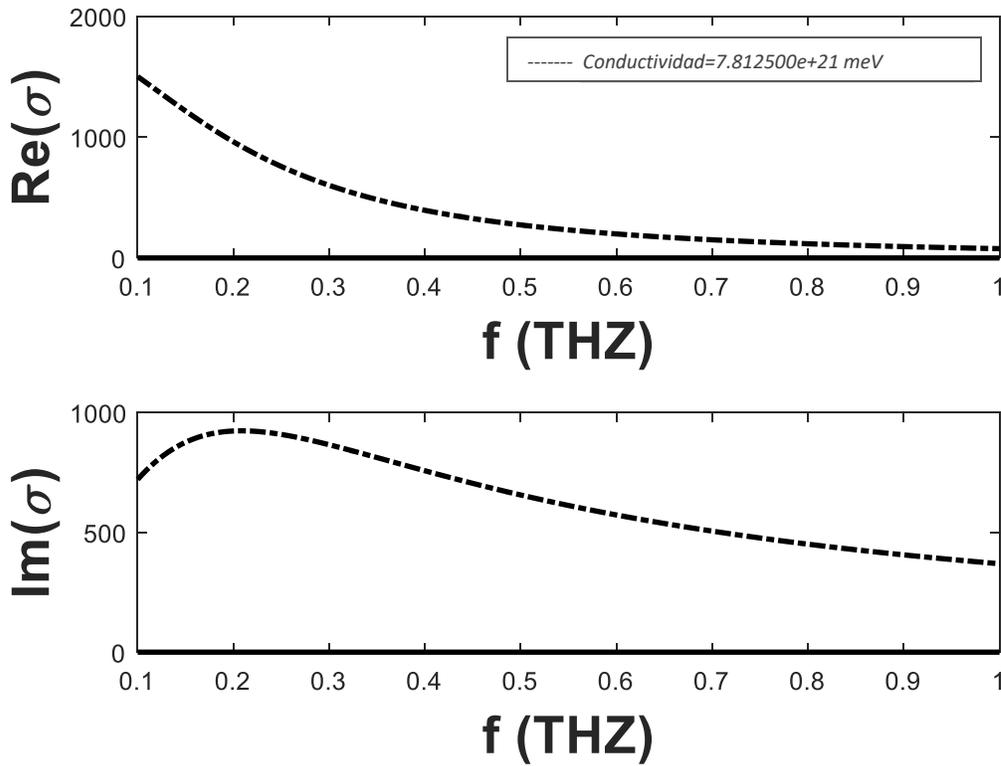


Figura 4.12 Fuente: Elaboración propia. Conductividad de la nanoantena propuesta, interbanda e intrabanda.

Se utilizó, la ecuación de Kubo [62] (ecuación 2.22) para calcular la conductividad de la superficie del grafeno en función de la frecuencia, y los resultados obtenidos de la figura 4.12 representan la conductividad del parche de diseño propuesto es de 7.812 eV. La parte imaginaria del factor de propagación de onda SPP se ilustra en función de la frecuencia de excitación. Se puede ver que la longitud de propagación de la onda SPP es de hasta unas pocas longitudes de onda SPP, que debería ser suficiente para que la nanoantena pueda transmitir datos a nivel de los THz.

Estos resultados se obtienen para un parche de grafeno cuadrado de 500 nm por lado, con un tiempo de relajación de electrones de 0.5 ps, que es un valor bastante conservador, a una temperatura $T = 300 \text{ }^\circ\text{K}$. Para esta frecuencia y potencial de resonancia de la onda del plasmón, la hoja de grafeno admite la propagación de ondas SPP con un factor de confinamiento de 1.867 THz.

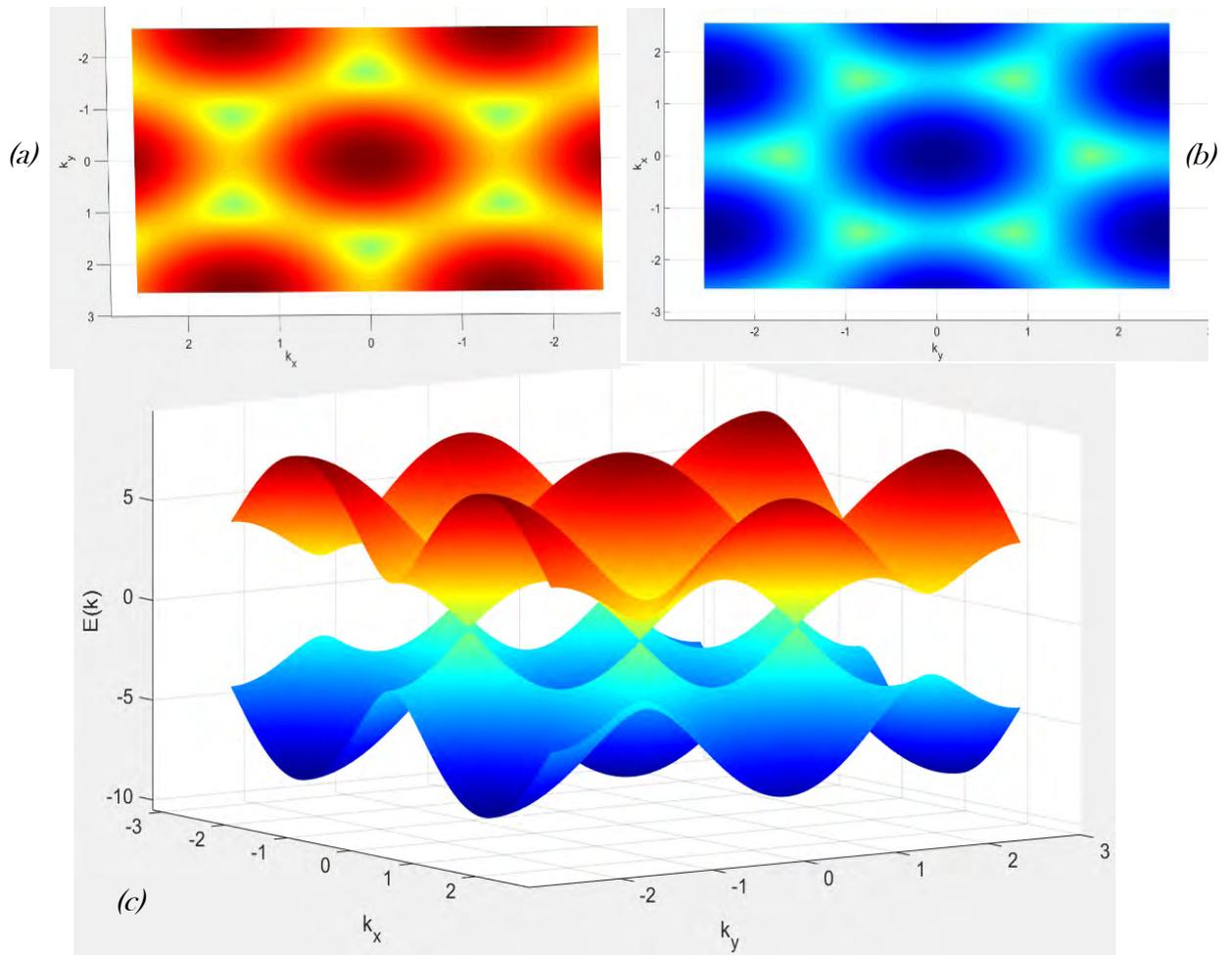


Figura 4.13. Fuente : Elaboración propia. Estructura de bandas del grafeno obtenida del algoritmo programado en MATLAB. (a) parte positiva o superior (color rojo) representa la banda de conducción, (b) parte negativa o inferior (color azul), representa la banda de valencia, (c) estructura de bandas acopladas.

En la figura 4.13 se obtienen las bandas de valencia y de conducción que se generan en el punto \mathbf{K} , lo que produce un intervalo de banda de energía cero, que genera lo que se conoce como conos o puntos de Dirac, que se forman por contacto de los orbitales de tipo p que crean los enlaces π fuera del plano hexagonal.

4.2.1 Índices topológicos del diseño propuesto de una nanoantena.

En la tabla 4.2 se muestran los resultados obtenidos de la compilación del archivo de Matlab de la figura 3.2 a partir de las dimensiones de la tabla 4.1 para el diseño propuesto de una nanoantena hecha de grafeno.

Tabla 4.2. Indices Topológicos del diseño de una nanoantena de grafeno

INDICES ZAGREB		Indice Aumentado de Zagreb	Indice Armonico	Indice Hiper-Zagreb	Indice Wiener
Primer indice de Zagreb	Segundo indice de Zagreb				
M1(G): 4507990	M2(G): 6756483	AZI(G): 8.553239e+06	H(G): 2.509501e+05	HM(G): 27028928	W: 6750e+03

Estos resultados representan los índices topológicos (grado de conexión, presencia de anillos, etc) del parche de la nanoantena propuesta diseñada, que hará posible buscar, comparar y establecer sus propiedades, para darle potenciales aplicaciones.



CAPÍTULO

5



5. CONCLUSIONES

Esta tesis es una contribución del cómputo científico al diseño y fabricación de nanoantenas de grafeno para la transmisión de datos a nivel de los Tera Hertz.

Por medio de un sistema de cómputo se programaron diferentes algoritmos con los cuales se diseñó la nanoantena propuesta y la nanoantena de Luke Zakrajsek, et. al [42], hechas a base de grafeno.

Se observó que podemos variar los parámetros de diseño de una nanoantena hecha a base de grafeno y la relación de los índices topológicos con el modelo computacional propuesto aplicando el método de elementos finitos y obtener un resultado que nos permite estudiar diferentes geometrías que pueda adquirir el diseño de la nanoantena.

Los resultados obtenidos mostraron una frecuencia de resonancia de alrededor de 2 THz, por lo que se satisfacen los objetivos planteados, concluyendo que la influencia de la geometría de las nanoantenas en la sección transversal es similar a la observada en el régimen de radio frecuencia (RF) de las microondas, donde el área geométrica es más pequeña.

Los índices topológicos derivados del diseño del parche propuesto para la nanoantena de grafeno se resalta que son una representación matemática formal codificada dentro de una representación simbólica en un valor numérico útil que pueden utilizarse para establecer la caracterización las propiedades de la nanoantena como su conductividad térmica y eléctrica, entalpía, conexión molecular para el diseño del parche, etc., y hacer diseños más efectivas.

Este trabajo de tesis muestra los resultados esperados que satisfacen las necesidades del diseño programado y el impacto de variar la geometría y los parámetros que afectan la frecuencia de resonancia de las nanoantenas hechas de grafeno, que proporcionan patrones que ayudan a diseñar nuevas geometrías que abren el campo de nuevas aplicaciones y tecnología para su producción.

Al ajustar las dimensiones de la nanoantena hecha a base de grafeno, en particular su longitud, la frecuencia de radiación se puede sintonizar en un amplio rango de los THz.

Se logra percibir que a medida que la frecuencia es más grande la antena es más pequeña lo que hace más difícil su construcción por las dimensiones obtenidas.

5.1 Trabajo Futuro

Finalmente, como líneas futuras, se podrían incluir nuevas geometrías de antenas a analizar como por ejemplo espiras, ranuradas, circulares, etc. También un aspecto interesante sería estudiar agrupaciones de antenas planares. También se podría incluir una base de datos de la geometría y la conexión de los descriptores moleculares que a partir de su estructura de bandas indique la conductividad generada por la topología de la nanoantena elegida.

Jean-Pierre Sauvage, Fraser Stoddart y Bernard Feringa galardonados con el premio nobel de química 2016, por el desarrollo de moléculas con movimientos controlables, es una línea de investigación potencial e interesante que se puede seguir para la aplicación de nanoantenas hechas a base de grafeno y su relación con los índices topológicos para la comunicación máquina-máquina de estos nanobots que pueden realizar una tarea cuando se les añade energía.

El diseño, la mejora y la producción a nanoescala de este tipo de antenas para la miniaturización de nuevos dispositivos, permitirá aplicaciones efectivas en los campos de la computación, electrónica, medicina, química, etc. De lo cual es motivo de investigación y considerarlo como trabajo futuro.

6. BIBLIOGRAFÍA

1. P. R. Wallace, “The Band Theory of Graphite”, *Physical Review*, Volume 71, Number9 May 1,1947.
2. “Electric Field Effect in Atomically, thin Carbon Films”, K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva,1 A. A. Firsov
3. L. Falkovsky and A. A. Varlamov, “Space-time dispersion of graphene,conductivity,” *The European Physical Journal B*, vol. 56, pp. 281-284,2006.
4. V. Ryzhii, “Terahertz plasma waves in gated graphene heterostructures”, *Japanese journal of applied physics*, vol. 45, no. 9L, p. L923, 2006.
5. Motohiko Ezawa, “Graphene Nanoribbon and Graphene Nanodisk”, Department of Physics, University of Tokyo, Hongo 7-3-1, Tokyo 113-0033, Japan,2007.
6. P. Blake, E. Hill, A. C. Neto, K. Novoselov, D. Jiang, R. Yang, T. Booth, and A. Geim, “Making graphene visible,” *Applied Physics Letters*, vol. 91, no. 6, p. 063124, 2007.
7. Melinda Y. Han, Barbaros Ö zylmaz, Yuanbo Zhang and Philip Kim, “Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons”, *PRL* 98, 206805 (2007) *Physical Review Letters*
8. G. W. Hanson, “Dyadic Green’s functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene,” *Journal of Applied Physics*, vol. 103, no. 6, p. 064302, 2008.
9. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene”, *Reviews of Modern Physics*, Volume 81, January-March 2009 Published 14 January 2009.
10. Katsunori Wakabayashi¹, Ken-ichi Sasaki, Takeshi Nakanishi and Toshiaki Enoki⁴ “Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions”, *Topical Review*.
11. J. M. Jornet and I. F. Akyildiz, “Graphene-based nanoantennas for electromagnetic nanocommunications in the terahertz band,” in *Proc. of 4th European Conference on Antennas and Propagation, EUCAP*,Apr. 2010.
12. F. H. L. Koppens, D. E. Chang, and F. J. Garcia de Abajo, “Graphene plasmonics: a platform for strong light matter interactions,” *Nano, Letters*, vol. 11, no. 8, pp. 3370-3377, Aug. 2011.

13. K. S. Novoselov, V. Fal, L. Colombo, P. Gellert, M. Schwab, K. Kim et al., "A roadmap for graphene," *Nature*, vol. 490, no. 7419, pp. 192-200, 2012.
14. García Hernández Roberto, "Aproximación continua del grafeno", Tesis de grado en Física/Tutor Dr. Negro Vadillo Javier, Depto. De Física Teórica, Atómica y Óptica, Universidad de Valladolid, Valladolid, 14 de julio de 2016.
15. Ivan Gutman and Kinkar Ch. Das, "The First Zagreb Index 30 Year After", *Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 54 (2005) 163-176 ISSN 0340 - 6253, 2004.
16. J. Braun, A. Kerber, M. Meringer, C. Rücker, "Similarity Of Molecular Descriptors: The Equivalence Of Zagreb Indices And Walk Counts" *Communications in Mathematical and in Computer Chemistry MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 54 (2005) 163-176 ISSN 0340 - 6253, D-95440 Bayreuth, Germany (September 20, 2004)
17. Y. Hatsugai, T. Fukui and H. Aoki, "Topological aspects of graphene. Dirac fermions and the bulk-edge correspondence in magnetic fields". *The European Physical Journal, Special Topics* 2007.
18. Jiannis K. Pachos, "Manifestations of topological effects in graphene", *Contemporary Physics*, Vol. 50, No. 2, March-April 2009, 375-389, (Received 4 November 2008; final version received 20 November 2008).
19. Zhou B and Trinajstić N. "On general sum-connectivity index", *J Math Chem* 2010; 47: 210-218.
20. Furtula B, Graovac A and Vukicević D. "Augmented Zagreb index". *J Math Chem* 2010; 48: 370-380.
21. Franco Cataldo and Ante Graovac, "Graphene Topological Modifications", *International Journal of Chemical Modeling* ISSN: 1941-3955 Volume 3, Issue 1-2, pp. 45-63 2011 Nova Science Publishers, Inc.
22. Gutman I. "Multiplicative Zagreb indices of trees". *Bull Soc. Math Banja Luka* 2011; 18: 17-23.
23. Zhong L. "The harmonic index on graphs", *Appl Math Lett* 2012; 25: 561-566.
24. Ghorbani M and Azimi N. "Note on multiple Zagreb indices". *Iran J Math Chem* 2012; 3: 137-143.
25. Eliasi M, Iranmanesh A and Gutman I. "Multiplicative versions of first Zagreb index", *MATCH Commun Math Comput Chem* 2012; 68: 217-230.

26. Huang Y, Liu B and Gan L. "Augumented Zagreb index of connected graphs", MATCH Commun Math Comput Chem 2012; 67: 483-494.
27. Wu R, Tang Z and Deng H. "A lower bound for the harmonic index of a graph with inimum degree at least two", Filomat 2013; 27: 51-55.
28. Shirdel GH, Rezapour H and Sayadi AM. "The hyper-Zagreb index of graph operations". Iran J Math Chem 2013; 4: 213-220.
29. G. Sridhara, M. R. Rajesh Kanna and R. S. Indumathi "Computation of Topological Indices of Graphene", Research Article. Received 21 May 2015; Accepted 15 July 2015
30. Jagadeesh R., MR Rajesh Kanna, and RS Indumathi, "Some results on topological indices of graphene", Nanomaterials and Nanotechnology Volume 6: 1-6, 2016.
31. Marinko Jablan, Hrvoje Buljan and Marin Soljačić 245435 _2009. "Plasmonics in graphene at infrared frequencies", Physical Review B 80, Received 30 September 2009; published 23 December 2009.
32. J. M. Jornet and I. F. Akyildiz, "Graphene-based nano-antennas for electromagnetic nanocommunications in the terahertz band," in Proc. of 4th European Conference on Antennas and Propagation, EUCAP, Apr. 2010.
33. A. Vakil and N. Engheta, "Transformation optics using graphene." Science, vol. 332, no. 6035, pp. 1291-4, Jun. 2011.
34. Long Ju1, Baisong Geng, Jason Horng, Caglar Girit, Michael Martin "Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials", Nature Nanotechnology Letters, Published Online: 4 September 2011 Doi: 10.1038/Nnano.2011.146.
35. I. Llatser, C. Kremers, A. Cabellos-Aparicio, J. M. Jornet, E. Alarcon, and D. N. Chigrin, "Graphene-based nano-patch antenna for terahertz radiation," Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications, vol. 10, no. 4, pp. 353-358, Oct. 2012.
36. M. Tamagnone, J. S. Gomez-Diaz, J. R. Mosig, and J. Perruisseau-Carrier, "Reconfigurable terahertz plasmonic antenna concept using a graphene stack," Applied Physics Letters, vol. 101, no. 21, p. 214102, 2012.
37. Philippe Tassin, Thomas Koschny, Maria Kafesaki and Costas M. Soukoulis "A comparison of graphene, superconductors and metals as conductors for metamaterials and plasmonics" NATURE PHOTONICS | VOL 6 | APRIL 2012.
38. J. M. Jornet and I. F. Akyildiz, "Graphene-based plasmonic nanoantenna for terahertz band communication in nanonetworks," IEEE JSAC, Special Issue on Emerging Technologies for Communications, vol. 12, no. 12, pp. 685-694, Dec. 2013.

39. J. M. Jornet and I. F. Akyildiz, "Graphene-based plasmonic nanotransceiver for terahertz band communication," in Proc. of European Conference on Antennas and Propagation (EuCAP), 2014.
40. M. Tamagnone and J. Perruisseau-Carrier, "Predicting input impedance and efficiency of graphene reconfigurable dipoles using a simple circuit model," *Antennas and Wireless Propagation Letters, IEEE*, vol. 13, pp. 313-316, 2014.
41. M. Aldrigo, M. Dragoman, and D. Dragoman, "Smart antennas based on graphene", *Journal of Applied Physics*, vol. 116, no. 11, 2014.
42. Luke Zakrajsek, Erik Einarsson, Michael Medley and Josep Miquel Jornet "Lithographically Defined Plasmonic Graphene Antennas for Terahertz-band Communication" 2016" *IEEE*
43. Y. M. Lin, A. V. Garcia, S.J. Han, D.B. Farmer, I. Meric, Y. Sun, Y. Wu, C. Dimitrakopoulos, A. Grill, P. Avouris, and K. A. Jenkins, "Wafer-scale Graphene integrated circuit", *Science*, vol. 332, no. 635, pp. 1294-1297, jun. 2011.
44. M.C. Lemme, T.J Echtermeyer, M. Baus, and H. Kurz, "A graphene field effect device," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 28, no.4, pp. 282-284, Apr. 2007.
45. M. Tamagnone, J. S. Gomez-Diaz, J. R. Mosig, and J. Perruisseau-Carrier, "Reconfigurable terahertz plasmonic antenna concept using a Graphene stack" *Appl. Phys. Lett.*, vol.101, pp. 214402-1-214102-4, 2012.
46. G. Deligeorgis, M. Dragoman, D. Neculoiu, D. Dragoman, G. Konstantinidis, A. Cismaru, and R. Plana, "Microwave propagation in graphene", *Phys. Rev. Lett.*, vol.95, pp.073107-1-073107-3, 2009.
47. M. Tamagnone, J. S. Gomez-Diaz, J. R. Mosig, and J. Perruisseau-Carrier, "Analysis and design of terahertz antennas based on plasmonic resonant graphene sheets," *Appl. Phys. Lett.*, vol.112, pp. 114915-1-214102-3, 2012.
48. Saito, R, G. Dresselhouse y M. S. Dresselhouse. Physical properties of carbon nanotubes, Imperial College press, Singapur, 2a. reimpr. De la 1a. ed de 1988, pp. 24 - 25.
49. J. Chen, C. Jang, S. Xiao, M. Ishigami, M. S. Fuhrer, *Nature Nanotechnology*, 3, 206 (2008).
50. Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon film. *Science* 306(5696): pp. 666-669.
51. Berger, C., Song, Z., Li, T., Li, X., Ogbazghi, A. Y., Feng, R., Dai, Z., Marchenkov, A. N., Conrad, E. H., First, P. N., de Heer, W. A. (2004). Ultrathin epitaxial graphite: 2D

- electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics. *Phys. Chem.* 108(52): pp. 19912-19916.
52. Berger, C., Song, Z., Li, X., Wu, X., Brown, N., Naud, C., Mayou, D., Li, T., Hass, J., Marchenkov, A. N., Conrad, E. H., First, P. N., de Heer, W. A. (2006). Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene. *Science* 312(5777): pp. 1191-1196.
 53. Caterina Soldano. Ather Mahmood. Erik Dujardin. "Production, properties and potential of Graphene," *Carbon*, vol. 48, pp 2127-2150, July 2010.
 54. Mircea V. Diudea and Ivan Gutman "Wiener-Type Topological Indices", a Received May 8, 1997; revised September 15, 1997; accepted November 3, 1997, ISSN-0011-1643 CCA-2476 Original Scientific Paper.
 55. BALANIS, Constantine A. "Antenna Theory: analysis and design". John Wiley and Sons, Inc., 2005.
 56. I. Llatser, C. Kremers, D. Chigrin, J. Jornet, M. C. Lemme, A. Cabellos-Aparicio, and E. Alarcon, "Characterization of graphene-based nanoantennas in the terahertz band," in *Antennas and Propagation (EUCAP)*, 2012 6th European Conference on, March 2012, pp. 194-198.
 57. A. Vakil and N. Engheta, "Transformation optics using graphene," *vol.332*, no. 6035, pp. 1291-1294, 2011.
 58. P. Rennert, "Many-particle physics," *Crystal Research and Technology*, vol. 17, no. 8, pp. 1046-1046, 1982. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1002/crat.2170170827>.
 59. I. Llatser, C. Kremers, D. N. Chigrin, J. M. Jornet, M. C. Lemme, A. Cabellos-Aparicio, and E. Alarcon, "Radiation characteristics of tunable graphennas in the terahertz band," *Radioengineering*, vol. 21 no. 4, pp. 946-53, 2012.
 60. C. Bena and G. Montambaux, "Remarks on the tight-binding model of graphene", *New J. Phys.* 11, 095003 (2009).
 61. S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejon, "Tight-binding description of graphene", *Phys. Rev. B* 66, 035412 (2002).
 62. Riffat T. Hussien, Dheif I.Abood. "A wideband hybrid plasmonic fractal patch nanoantenna". *IJECET*, 5, Sep. 2014, pp. 1-8.
 63. Rajni Bala, Anupma Marwaha, Sanjay Marwaha, "Material Modeling Approach for Graphene Antenna Desig" *Telkommika Indonesian Journal of Electrical Engineering*, Vol. 16, No. 3, (2015).

64. Hendrik Timmerman, Roberto Todeschini, Viviana Consonni, Raimund Mannhold, Hugo Kubinyi, "Manual de Descriptores Moleculares ", Wiley-VCH, 2002, ISBN 3-527-29913-0.
65. Teijón, José María; Pérez, José Antonio García (1996). "Química: Teoría y problemas". Editorial Tebar. ISBN 9788473601559. Consultado el 29 de enero de 2018.
66. Sokołowski, Damian; Kamiński, Marcin. "Homogenization of carbon/polymer composites with anisotropic distribution of particles and stochastic interface defects", 3727-3765. doi:10.1007/s00707-018-2174-7.
67. Schwarzschild, Bertram. "Physics Nobel Prize Goes to Tsui, Stormer and Laughlin for the Fractional Quantum Hall Effect". Physics Today Bibcode:1998PhT....51l..17S. doi:10.1063/1.882480, 1998.
68. Ball, Philip "Quantum objects on show", Nature **462** (7272): 416. doi:10.1038/462416, 2016.
69. Streetman, Ben G.; Sanjay Banerjee. Solid State electronic Devices (5th edition edición). Nueva Jersey: Prentice Hall. p. 524. ISBN 0-13-025538-6, 2000.