

PROPUESTA PARA INTRODUCIR LA ENSEÑANZA DE LA
NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA EN LA EDUCACIÓN MEDIA
USANDO LOS NANOTUBOS DE CARBONO

EDGAR CASTILLO GAMBA

UNIVERSIDAD PONTIFICIA BOLIVARIANA

INGENIERÍA

MAESTRÍA EN CIENCIAS NATURALES Y
MATEMÁTICAS

MEDELLÍN

2017

PROPUESTA PARA INTRODUCIR LA ENSEÑANZA DE LA NANOCIENCIA Y LA
NANOTECNOLOGÍA EN LA EDUCACIÓN MEDIA USANDO LOS NANOTUBOS
DE CARBONO.

EDGAR CASTILLO GAMBA

Trabajo de grado para optar al título de magíster en ciencias naturales y
matemática con profundización en física

<http://ieducar.edu.co/fisica/>

Director

FREDDY RAFAEL PERÈZ

DR. EN FÍSICA

UNIVERSIDAD PONTIFICIA BOLIVARIANA

INGENIERÍA

MAESTRÍA EN CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA

MEDELLÍN

2017

Junio 09 de 2018)

PROPUESTA PARA INTRODUCIR LA ENSEÑANZA DE LA NANOCIENCIA Y LA
NANOTECNOLOGÍA EN LA EDUCACIÓN MEDIA USANDO LOS NANOTUBOS
DE CARBONO

“Declaro que este trabajo de grado no ha sido presentado para optar a un título, ya sea en igual forma o con variaciones, en esta o cualquier otra universidad” Art 82 Régimen Discente de Formación Avanzada.

Firma

A handwritten signature in black ink, consisting of stylized, overlapping loops and lines, positioned above a horizontal line.

DEDICATORIA

A MI MADRE MERCEDES GLORIA GAMBA

Por haberme apoyado por su amor y confianza, y que siempre ha estado presente en mi desarrollo personal, familiar y profesional.

A la memoria de mi padre Abel Castillo.

AGRADECIMIENTOS

A Dios por permitirme tener y disfrutar mi vida brindándome estas oportunidades.

A la Gobernación de Antioquia por haberme otorgado la beca, sin la cual no se hubiera logrado este sueño, al Dr. Freddy Rafael Pérez por su valiosa orientación y apoyo en este proyecto de alta envergadura dirigido a la educación media.

De igual forma quiero agradecer a todos los profesores que con su esfuerzo y dedicación me transfirieron el conocimiento y me animaron a continuar con este proyecto.

También a la Institución Educativa Antonio Roldán Betancur encabezada por el señor Rector, Jader Alberto Aguirre quien siempre estuvo abierto y colaborador al desarrollo e implementación de esta monografía.

Contenido

| | |
|--|----|
| LISTA DE FIGURAS..... | 8 |
| GLOSARIO | 10 |
| RESUMEN..... | 11 |
| INTRODUCCIÓN..... | 12 |
| CAPÍTULO 1..... | 14 |
| 1.1 HISTORIA DE LOS NANOTUBOS..... | 14 |
| 1.1.1 FULLERENOS..... | 14 |
| 1.1.2 NANOTUBOS DE CARBONO | 16 |
| 1.1.3 GRAFENO..... | 18 |
| 1.1.4 ACTIVIDAD HISTORIA DE LOS NANOTUBOS..... | 19 |
| CAPÍTULO 2..... | 21 |
| 2.1 HIBRIDACIÓN EN EL ÁTOMO DE CARBONO..... | 22 |
| 2.1.1 HIBRIDACIÓN SP ² | 22 |
| 2.1.3 CLASIFICACIÓN DE LOS NANOTUBOS DE CARBONO..... | 25 |
| 2.1.4 TIPOS BÁSICOS DE ESTRUCTURA DE LOS NANOTUBOS DE CARBONO..... | 25 |
| 2.1.5 actividad hibridación de átomo de carbono..... | 27 |
| CAPÍTULO 3..... | 30 |
| 3.1 MAGNITUD DE VECTOR QUIRAL..... | 30 |
| 3.1.1 DEMOSTRACIÓN DE $ \vec{ch} = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}$ | 35 |
| 3.1.2 ACTIVIDAD MAGNITUD DE VECTOR QUIRAL..... | 39 |
| CAPÍTULO 4..... | 41 |
| 4.1 ÁNGULO QUIRAL..... | 41 |
| 4.1.1 DEMOSTRACIÓN DE $\varphi = \cos^{-1} \frac{[2n+m]}{2[n^2+nm+m^2]^{\frac{1}{2}}}$ | 46 |
| 4.1.2 ACTIVIDAD ÁNGULO QUIRAL..... | 49 |
| CAPÍTULO 5..... | 50 |

| | |
|--|----|
| 5.1 DIAMETRO Y RADIO DEL NANOTUBO | 50 |
| 5.1.1 DEMOSTRACIÓN DE $r = \frac{\sqrt{3}a_{c-c}\sqrt{n^2+m^2+mn}}{2\cdot\pi}$ | 52 |
| 5.1.2 ACTIVIDAD RADIO Y DIAMETRO DE UN NANOTUBO..... | 53 |
| CAPÍTULO 6..... | 55 |
| 6.1 ÀREA DEL HEXÁGONO (red panal)..... | 55 |
| 6.1.1 DEMOSTRACIÓN $ \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = a^2 \frac{\sqrt{3}}{2}$ | 56 |
| 6.1.2 ACTIVIDAD ÀREA DEL HEXÁGONO (RED PANAL) | 59 |
| CAPÍTULO 7..... | 60 |
| 7.1 VECTOR TRANSLACIÓN..... | 60 |
| 7.1.1 DEMOSTRACIÓN DE $\vec{T} = \frac{2m+n}{d_R}\vec{a}_1 - \frac{2n+m}{d_R}\vec{a}_2$ | 62 |
| 7.1.2 ACTIVIDAD VECTOR TRANSLACIÓN..... | 63 |
| CAPÍTULO 8..... | 64 |
| 8.1 CELDA UNITARIA | 64 |
| 8.1.1 DEMOSTRACIÓN $ \vec{Ch} \times \vec{T} = \frac{\sqrt{3}}{d_R} a^2 (n^2 + nm + m^2)$ | 67 |
| 8.1.2 ACTIVIDAD CELDA UNITARIA..... | 73 |
| CAPITULO 9..... | 74 |
| 9.1 ESTRUCTURA CRISTALINA DEL GRAFENO..... | 74 |
| 9.1.1 ACTIVIDAD ESTRUCTURA CRISTALINA GRAFENO..... | 76 |
| CAPÍTULO 10..... | 77 |
| 10.1 RED RECIPROCA | 77 |
| 10.1.1. ZONA DE BRILLOUIN | 77 |
| CONCLUSIONES Y PERPECTIVAS..... | 82 |
| REFERENCIAS..... | 83 |

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1. Nanotube modeler 2005-2016 JCristalSoft

Figura 1.2 Wikipedia

Figura 1.3 Wikipedia

Figura 1.4 Los árboles invisibles

Figura 1.5 Nanotube modeler 2005-2016 JCristalSoft

Figura 1.6 Nanotube modeler 2005-2016 JCristalSoft

Figura 1.7 Nanotube modeler 2005-2016 JCristalSoft

Figura 1.8 Nanotube modeler 2005-2016 JCristalSoft

Figura 2.1 Autor

Figura 2.2 Jorio et al Raman_Spectroscopy_in_Graphene_Related_Systems

Figura 2.3

Figura 2.4

Figura 2.5 Alcca Quispe Fernando

Figura 2.6 carbonalfa.com/nanotubos

Figura 2.7 carbonalfa.com/nanotubos

Figura 2.8 carbonalfa.com/nanotubos

Figura 3.1 Autor

Figura 3.2 Autor

Figura 3.3 Autor

Figura 3.4 Autor

Figura 3.5 Autor

Figura 3.6 Autor

Figura 3.7 Autor

Figura 3.8 Autor

Figura 3.9 Autor

Figura 4.1 Autor

Figura 4.2 Autor

Figura 5.1 Nanotube modeler 2005-2016 JCristalSoft

Figura 5.2 Autor

Figura 5.3 Autor

Figura 5.4 Autor

Figura 5.5 Autor

Figura 6.1 Autor

Figura 6.2 Autor

Figura 6.3 Autor

Figura 7.1 Autor

Figura 7.2 Autor

Figura 7.3 Autor

Figura 8.1 Autor

Figura 9.1 Revista de Mecánica y Física de Sólidos

Figura 9.2 young.physics.ucsc

Figura 9.3 Autor

GLOSARIO

NANOTUBO: Estructura en forma de cilindro hueco que tiene un diámetro nanométrico, formado por distintos elementos químicos como el carbono.

CELDA UNITARIA: la porción más simple de la estructura cristalina que al repetirse mediante traslación reproduce todo el cristal.

FONÓN: es una cuasipartícula o modo cuantizado vibratorio que se haya en redes cristalinas como la red atómica de un sólido.

GRAFITO: Mineral de carbono casi puro, de textura compacta, color negro y brillo metálico, graso al tacto y buen conductor de la electricidad.

QUILARIDAD: es la propiedad de un objeto de no poder superponerse con su imagen especular.

RESUMEN

En este trabajo de carácter pedagógico y disciplinario de la física, se presenta una propuesta de cómo implementar las temáticas de la nanociencia y la nanotecnología en la educación media teniendo como planteamiento la estructura y algunas propiedades de los nanotubos de carbono. En la propuesta de aula se evidencia una buena aceptación del tema por parte de los estudiantes debido a que tiene aplicaciones a la geometría, la trigonometría y al álgebra vectorial. Los contenidos propuestos son compatibles con temáticas de grados básicos en aplicaciones de la física de la materia condensada; resultó muy interesante que en este proceso se trabajó temas de áreas, producto vectorial, producto escalar entre vectores, entre otros, introduciendo algunos conceptos del álgebra lineal con un grado de conceptualización matemática considerable; el uso de algunas tecnologías de la información y la comunicación, TIC, contribuyeron al avance y motivación de los estudiantes ayudando a vislumbrar otras expectativas en lo que se refiere a la educación media y básica.

Con este proyecto de implementación de la enseñanza de nanotubos de carbono, que son afines a la mecánica cuántica y a la materia condensada, se avanza en el desarrollo de lograr con los estudiantes la implementación de las competencias en las áreas introductorias de la nanociencia a través de un problema en particular. Durante la implementación de la propuesta en los grados noveno, décimo y once de la Institución Educativa Antonio Roldán Betancur durante los períodos cuarto del año 2016 y primero de 2017, se evidenció la viabilidad de introducir temáticas

novedosas en el aula de clase que motiven a los estudiantes a continuar un proceso de formación profesional en áreas de las ciencias y la tecnología. Esta propuesta está acompañada de una página WEB diseñada con el fin de ofrecer apoyo al material presentado aquí, que se puede encontrar en <http://ieducar.edu.co/fisica/>

PALABRAS CLAVE: NANOTUBOS; VECTOR QUIRAL; ÁNGULO QUIRAL;
CELDA UNITARIA, EDUCACIÓN MEDIA, NANOCIENCIA, NANOTECNOLOGÍA.

INTRODUCCIÓN

Se ha encontrado que la enseñanza de la física en los colegios colombianos está fundamentada esencialmente en los estándares y derechos básicos de aprendizaje, no se abordan temas de física de la materia condensada muy probablemente debido a la gran complejidad de esta. En este trabajo se propone abordar las propiedades estructurales de los nanotubos de carbono, tratadas desde el punto de vista geométrico, aplicando fundamentos de trigonometría, álgebra, álgebra vectorial, y cálculo diferencial, teniendo en cuenta las competencias de los estudiantes de la educación media y básica, con el fin de introducir el estudio de algunos elementos de la nanociencia y la nanotecnología. Concretamente se utilizan los nanotubos de carbono como tema detonante del aprendizaje de estas disciplinas en los estudiantes de la media y la básica; materiales relacionados con los nanotubos de carbono (NC) presenta múltiples aplicaciones como en artículos deportivos por ejemplo en bicicletas, raquetas de tenis (P.A., J.J. , N. TAKEUCHI , & J.D. , 2014), teniendo significativas repercusiones en el desarrollo de la ciencia y la tecnología. Se comienza este trabajo con una breve reseña histórica sobre los NC; el curso propuesto tiene contenidos como la hibridación del carbono y su aplicación en el grafeno de donde surgen los nanotubos de carbono; se calculan diámetro y radio de un NC, se discuten las diferentes clase de NC y su simetría; se abordan conceptos de la física del estado sólido como celda cristalina, vectores de red, espacio real y espacio recíproco, vectores de traslación, zona de Brillouin, puntos de gran simetría, longitud de onda y energía de dispersión y por último vibraciones sp^2 en nanocarbonos.

Todos estos fundamentos conceptuales y teóricos se abordan desde un punto de vista pedagógico del aprendizaje significativo por medio de tutoriales y una página WEB interactiva, <http://ieducar.edu.co/fisica/>, enfocado en el ser, saber y saber hacer, visto desde las competencias adquiridas en matemáticas, lenguaje y ciencias naturales en la educación básica y en la media del sistema educativo colombiano.

Cada capítulo de esta monografía consiste en una unidad de estudio para los alumnos de la media y la básica en donde al final se encuentran actividades de autoevaluación de las competencias declaradas.

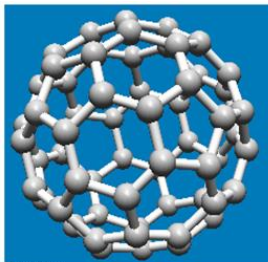
CAPÍTULO 1

1.1 HISTORIA DE LOS NANOTUBOS

Logro: Identifica y explica la historia del descubrimiento de los nanotubos.

Es muy importante reconocer los eventos históricos que rodean el descubrimiento de los nanotubos de carbono, con sus protagonistas, lo cual nos da una visión más completa de avances en este tema de alta vanguardia. A continuación, se describe el desarrollo histórico que llevó al descubrimiento de los nanotubos de carbono.

1.1.1 FULLERENOS



Fullereno
Utilizando el programa Nanotube Modeler

Fullereno esférico, se ve como un balón de fútbol, de gran belleza en su estructura, es el más pequeño de todos con 60 átomos de carbono.

Figura 1.1

El descubrimiento de los fullerenos como muestra la (figura 1.1), la historia se lo debe reconocer a Robert F. Curl, Sir Harold W. Kroto y Richard E. Smalley (figura 1.1.2) quienes en 1985 después de realizar una serie de experimentos con un rayo láser sobre un pedazo de grafito descubrieron el C₆₀; estos tres hombres de ciencia recibieron, por este hecho, el premio nobel de química de 1996.

Pero no sólo ellos los habían descubierto, del otro lado del pacifico, había un hombre llamado Eiji Osawa, un químico japonés quien 15 años atrás ya había propuesto la molécula C₆₀ en un trabajo publicado en japonés, pero el idioma se convirtió en la barrera por la cual estos científicos no conocían nada de sus respectivos trabajos.

Las expectativas tanto en investigación básica como sus previsibles aplicaciones tecnológicas han hecho de los fullerenos, uno de los sistemas más estudiados en ciencia a nivel internacional.



Robert F. Curl, Sir Harold W. Kroto y Richard E. Smalley descubrimiento de los fullerenos en el año 1985

Figura 1.2

Los fullerenos son compuestos manejables y químicamente modificables a partir del método puesto a punto por el físico nuclear Wolfgang Kratschmer quien, en 1990, invento un método para producir fullerenos a escala multigrano mediante la disolución del hollín obtenido en sus experimentos en benceno.

Kratschmer recibió el *European Inventor Award 2010*, por el desarrollo de la síntesis de fullerenos por el Príncipe D. Felipe de Borbón. La molécula C60 había sido propuesta antes de su descubrimiento por Eiji Osawa, un químico japonés de la universidad de Kyoto. Kroto (figura 1.3), quien no conocía el trabajo de Osawa en el momento de su descubrimiento el cual no se conocía en parte por la barrera del idioma, desde entonces, un gran crédito a este investigador.

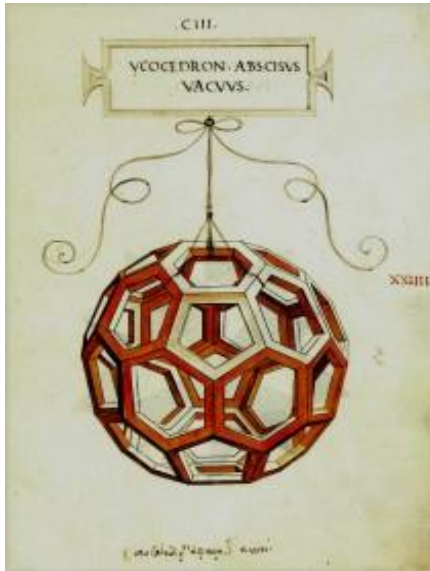


Tomado de https://en.wikipedia.org/wiki/Eiji_Osawa

Eiji descubrió los fullereno C60 y Iijima descubrió los nanotubos de carbono, por la barrera idiomática se les dio merito posteriormente.

1.3

La idea de una estructura en forma de jaula de carbono fue inicialmente propuesta por David E. H. Jones, en un artículo que escribió en el *New Scientist* con el nombre de "Daedalus". Él sugirió que sería posible crear moléculas gigantes huecas distorsionando una red plana de carbonos hexagonales por adición de



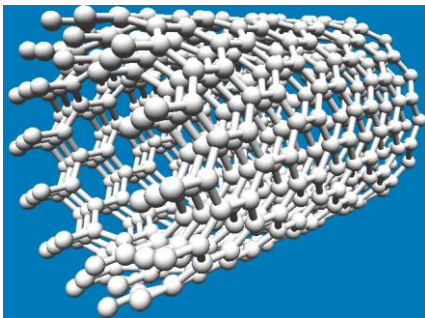
Primer modelo realizado por Leonardo da Vinci que encaja con la estructura de los fullerenos.

Leonardo da Vinci

Tomado de <http://losarbolesinvisibles.com/tag/divina-proporcion/>

Figura 1.4

1.1.2 NANOTUBOS DE CARBONO



Nanotubo de pared múltiple

Utilizando el programa Nanotube Modeler

Figura 1.5

átomos de impureza. Esto, podría introducir la curvatura necesaria para llegar a una capa esférica. Sin embargo, él nunca llegó a explicar cómo se podría conseguir.

Algunos químicos han visto en Leonardo da Vinci el primer científico que “modelizó” la molécula de fullereno en su ya famosa ilustración (figura 1.4) para el libro de Luca Pacioli titulado “De Divina Proportione”, publicado en Venecia en 1509. En esta ilustración puede verse el icosaedro truncado con forma de balón de fútbol que Leonardo llamó *Ycocedron Abscisus Vacuus*. (Martín, 2011)

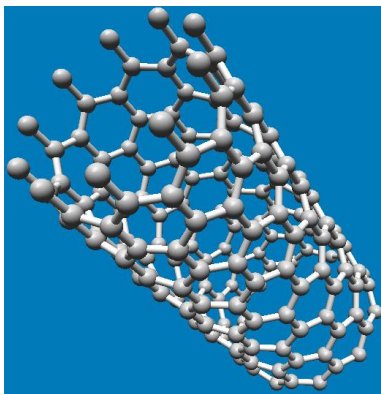
En general un nanotubo es una estructura en forma de cilindro que tiene el diámetro típico del orden de los nanómetro, de distintos materiales (sobre todo carbono) y diversas propiedades, Se le asigna el descubrimiento de los *nanotubos de carbono* de pared múltiple (figura 1.5) (MWCNTs) a Iijima por su famoso trabajo publicado en la revista *Nature* de título: “Helical microtubules of graphitic carbon”. Sin embargo, existe un elevado

número de publicaciones previas que tratan sobre este tipo de sistemas, cuyos autores han quedado prácticamente en el olvido.

En el editorial de la revista *Carbon*, M. Monthieux y V. L. Kuznetsov actuando como editores invitados escribieron un artículo cuyo título: “Who should be given the credit for the discovery of carbon nanotubes?” es lo suficientemente explícito. En este editorial, se da el crédito debido a A. Oberlin quien, en 1976, mostró una imagen Microscopía Electrónica de Transmisión, TEM, por sus siglas en inglés, de un nanotubo de carbono que, de acuerdo a su diámetro de unos 5 nm debía ser, probablemente, de pared múltiple.

No obstante, la primera mención de la posibilidad de formar filamentos de carbono por descomposición térmica de metano fue descrita ya en 1889. Aunque existen algunas otras publicaciones de esos años, no es posible hacer una asignación inequívoca debido a las limitaciones de los microscopios de la época. Ha sido con el desarrollo del primer microscopio de transmisión electrónica (TEM) comercial a partir de 1939, cuando se ha logrado establecer la morfología y textura interna de los filamentos de carbono. Fue un grupo de investigadores rusos quienes en 1952 aportaron las primeras evidencias mediante TEM de la formación de tubos de

carbono, seguramente de pared múltiple, conteniendo de 15 a 20 capas. Naturalmente, la resolución de los TEM de la época no permitió distinguir el número de capas presentes en el nanotubo de carbono.



Nanotubo de pared sencilla

Utilizando el programa Nanotube

Modeler

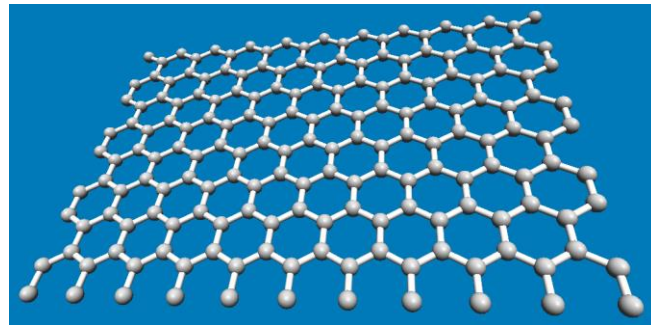
Figura 1.6

Curiosamente, la historia del descubrimiento de los nanotubos de carbono de pared sencilla (figura 1.6) no presenta polémica alguna ya que, queda bien establecido, que estos fueron descubiertos simultáneamente por los grupos de investigación de lijima e Ichihashi en 1993, con una diferencia en el envío de sus respectivos manuscritos a la revista *Nature* de tan solo un mes. Los nanotubos

de carbono ya eran conocidos cuarenta años antes de su descubrimiento en 1991, la meta de la comunidad científica era comprender su mecanismo de crecimiento e impedir su formación en la industria del carbón y del acero, así como en los canales de refrigeración de los reactores nucleares y la comunidad científica estaba desvinculada de las revistas habituales de química. La segunda razón tiene que ver con la *madurez de la ciencia*, no solamente en la evolución de las herramientas de medida como el TEM sino, aún más importante, con el hecho de que las mentes de los científicos implicados aún no pensaban en términos “nano” según Monthioux y Kuznetsov. (Martín, 2011)

1.1.3 GRAFENO

El descubrimiento del *grafeno* puede ser considerado más ortodoxo desde el punto de vista científico. Para comprender el grafeno es preciso conocer el grafito, el cual se conoce como mineral desde hace más de 500 años y que ya era utilizado en la edad media de forma parecida a como utilizamos hoy los lapiceros. Entre las múltiples propiedades del grafito destacan su elevada conductividad eléctrica y térmica a lo largo del plano, así como una elevada dureza mecánica. Las propiedades del grafito, al estar constituido por láminas de carbono con hibridación sp^2 unidas débilmente entre sí, se caracterizan por su elevada anisotropía.



Grafeno

Utilizando el programa Nanotube Modeler

Figura 1.7

Aunque se han llevado a cabo diferentes estudios dirigidos a separar un número cada vez menor de capas de grafeno a partir de grafito, el impulso definitivo en el estudio del grafeno se produjo en 2004 cuando Andrew Geim y el que fuera su

alumno de doctorado, Konstantin Novoselov, de la Universidad de Manchester, aislaron las primeras muestras de grafeno a partir de grafito mediante un proceso de exfoliación mecánica. El proceso es muy simple y consistió en la exfoliación de grafito produciendo láminas de grafeno mediante el uso de una cinta de celofán, permitiendo, así, un acceso fácil a este material en el que se han depositado tantas expectativas.

El interés del *grafeno* ya ha superado el ámbito puramente científico y ha interesado a la sociedad en general por sus múltiples posibles usos y aplicaciones como: Chips, ordenadores, baterías, sensores, electrodos o fabricación de la primera pantalla táctil que puede enrollarse y doblarse de grafeno. Simultáneamente, IBM anuncia la fabricación de chips de grafeno que son 10 veces más veloces que los de silicio. (Martín, 2011)

1.1.4 ACTIVIDAD HISTORIA DE LOS NANOTUBOS

1. El año en que se ganaron el premio Nobel de química por el descubrimiento de los fullerenos fue:
 - a) 1987
 - b) 1985
 - c) 2010
 - d) 1996

Completa la oración

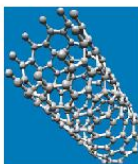
2. El Fullerenos fue declarado la molécula del año por la revista _____, siendo su descubrimiento inicial en la ciudad de _____.
3. El físico nuclear Wolfgang Kratschmer quien, en el año _____, inventó un método para producir fullerenos a escala multigrano mediante la disolución del hollín.
4. La sigla TEM significa _____
5. Los fullerenos son compuestos _____ y _____ a partir del _____ puesto punto a punto por el físico nuclear Wolfgang Kratschmer.
6. El grafito, el cual se conoce como mineral desde hace más de 500 años y que ya era utilizado en la edad media de forma parecida a como utilizamos hoy los _____
7. ¿A quién se le ha atribuido el descubrimiento de los nanotubos de carbono de pared múltiple? _____
8. Relaciona el tipo de Fullerenos o Nanotubo con su descubridor



Harold
Walter Kroto



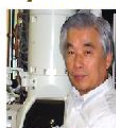
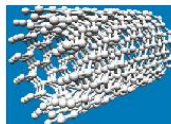
Robert Floyd



Eiji Osawa



Richard
Smalley



Sumio Iijima

9. La idea de una estructura en forma de jaula de carbono fue inicialmente propuesta por Leonardo Da Vinci.
- Verdadero
 - Falso

CAPITULO 2

2.1 HIBRIDACIÓN EN EL ÁTOMO DE CARBONO

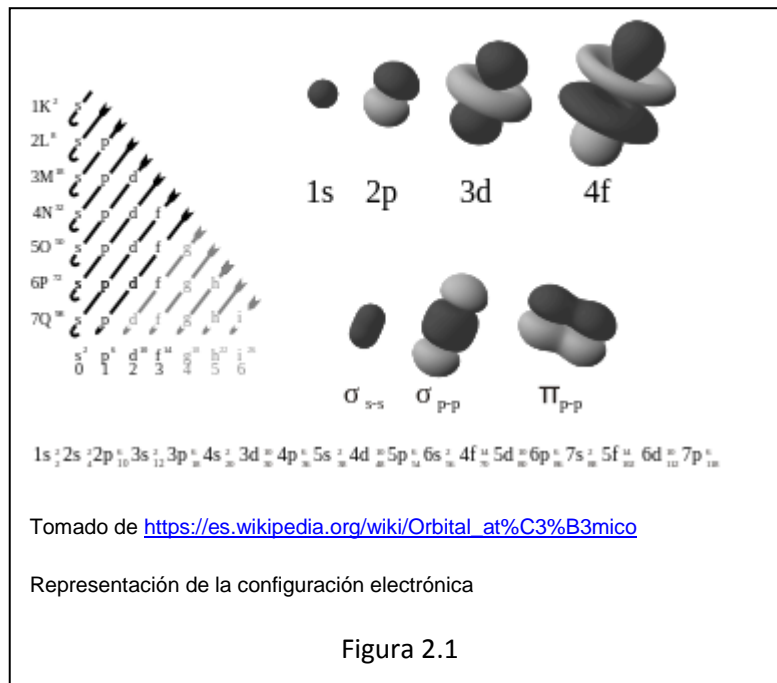
Logro: Comparó las propiedades de hibridación del carbono y sus enlaces π y σ

2.1.1 HIBRIDACIÓN SP²

En general el concepto de *hibridación* se refiere a la combinación de orbitales atómicos para generar nuevos orbitales.

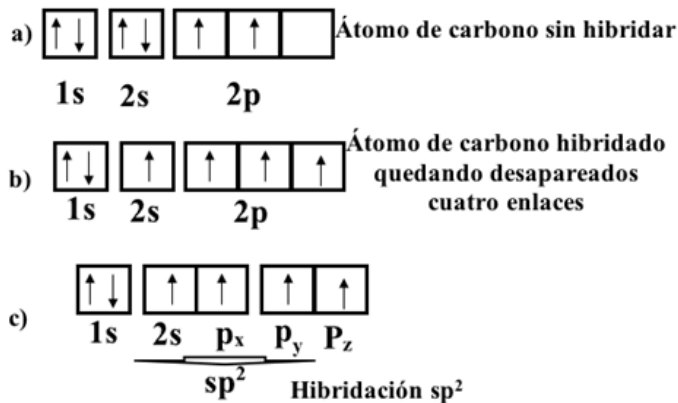
La hibridación es una ley que se aplica en la química la cual nos permite demostrar la geometría y propiedades de algunas moléculas, consiste en atribuir la composición de orbitales atómicos puros de un mismo átomo para obtener orbitales atómicos híbridos.

El modelo de enlace de valencia, desarrollado por Heitler y London 1927, es insuficiente para describir la geometría de algunas moléculas.. Linus Pauling en 1931 propuso una ampliación de la teoría del enlace de valencia llamada teoría de hibridación de orbitales atómicos, siendo este un desarrollo matemático con buenos resultados. La hibridación es el mecanismo que justifica la distribución espacial de los pares de electrones de valencia (lineales, triangulares planas y tetraédricas). Los tipos de hibridación son: sp , sp^2 y sp^3 .



“Orbitales atómicos y moleculares. El esquema de la izquierda es la regla de Madelung siguiendo el Principio de Aufbau para determinar la secuencia energética de orbitales” (wiki,2016).

La configuración electrónica del carbono es $1s^2 2s^2 2p^2$, y para la estructura de nanotubos de carbono la hibridación es sp^2 . El átomo de carbono tiene seis electrones y se distribuyen en cada orbital en parejas cada uno con el espín invertido ver figura 2.2 (a).



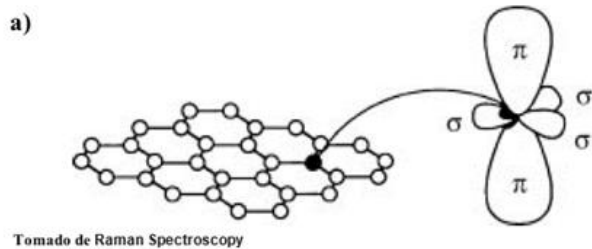
Hibridación del átomo de carbono se observa como salta los electrones entre niveles hasta quedar en sp^2

Figura 2.2

híbrido, ver figura 2.2(c). (Mc & Jhon, 2008)

El átomo de carbono tiene seis electrones y se distribuyen en cada orbital en parejas cada uno con el espín invertido ver figura 2.2 (a). Cuando la hibridación se produce, un electrón pasa al orbital 2s al 2p figura 2.2 (b), formando el orbital

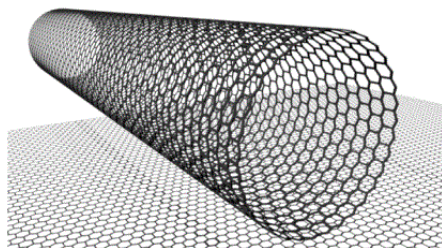
En el orbital 1s la energía es alrededor de -285eV, donde estos electrones están fuertemente unidos al núcleo y no participan de los enlaces atómicos, las diferencias de energía entre 2s y 2p es más débil, se pueden formar enlaces C-C, ver figura 2.2 (b).



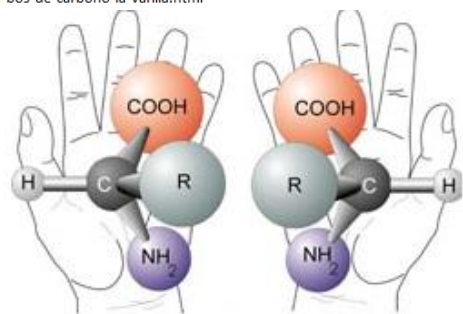
Enlaces π y σ en la red de grafeno.

Figura 2.3

Cada átomo de carbono, se une con tres átomos más cercanos, y así forma un plano hexagonal de grafeno, en donde se forman enlaces π que son más débiles que el enlace sigma (σ) ver figura 2.3. (Ado , Riichiro , Gene, & Mildred S. , 2011).



Tomado de <http://tecnovancesmundiales.blogspot.com.co/2015/02/nanotubos-de-carbono-la-varilla.html>



Tomado de [https://es.wikipedia.org/wiki/Quiralidad_\(qu%C3%ADmica\)](https://es.wikipedia.org/wiki/Quiralidad_(qu%C3%ADmica)).

Una lámina de grafeno enrollada formaría un nanotubo (arriba), representación de quiralidad (abajo)

En los nanotubos de carbono su geometría y la mayoría de las propiedades dependen de su diámetro y ángulo *Quiral*, también llamado helicidad.

La quiralidad es la propiedad de un objeto de no ser superponible con su imagen especular. Como ejemplo sencillo, la mano izquierda humana no es superponible con su imagen especular (la mano derecha).

Figura 2.4

2.1.3 CLASIFICACIÓN DE LOS NANOTUBOS DE CARBONO

De acuerdo al número de capas se clasifican en:

2.1.3.1 NANOTUBOS DE CAPA MÚLTIPLE (MWNT)

Son los formados por varias capas concéntricas de forma cilíndricas las cuales están separadas aproximadamente una distancia similar a una distancia interplanar del grafito.

2.1.3.2 NANOTUBOS DE CAPA ÚNICA (SWNT)

Son los que se pueden describir como una capa bidimensional de grafito “enrollada” formando un cilindro de décimas de micrones de longitud y diámetro de orden de los nanómetros, La mayoría de los nanotubos de una sola pared tienen un diámetro de cerca de 1 nanómetro.

2.1.4 TIPOS BÁSICOS DE ESTRUCTURA DE LOS NANOTUBOS DE CARBONO

El esquema en la hoja de grafeno (m, n) puede ser pensado como un vector (\vec{C}_h) en una hoja de grafeno donde a_1 y a_2 son los vectores de red de grafeno en el espacio real expresado, $\vec{C}_h = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ ver figura (a). Según el arreglo de los átomos de carbono, es posible clasificar a los nanotubos en tres tipos: zig-zag, *armchair* y quiral.

2.1.4.1 NANOTUBOS TIPO ZIG-ZAG

Cuando el índice $n = 0$, es decir, que todo nanotubo con índices del tipo $(m,0)$, donde m puede ser cualquier número entero, es un nanotubo tipo *zig-zag*, por ejemplo, el nanotubo $(20,0)$ formando un ángulo de 0° , ver figura 2.6 (b), en su mayoría son semiconductores, por lo que no conducen la electricidad fácilmente.

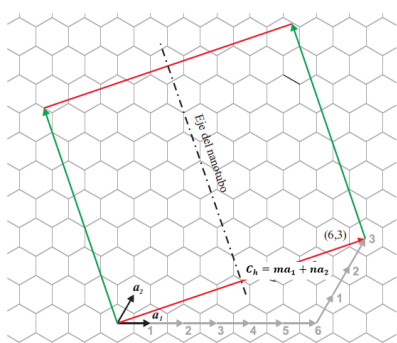
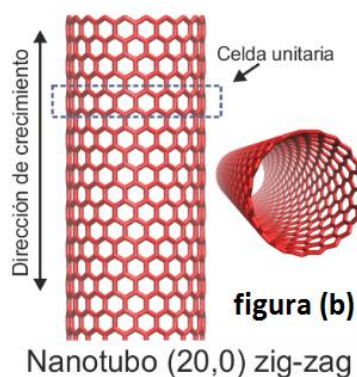


figura (a) Tomado de tesis doctoral modelización de NTC

Representación del vector quiral en una red de grafeno.

Figura 2.5



Tomado de <http://www.carbonalfa.com/nanotubos-de-carbono.html>

Nanotubo zig-zag $(20,0)$ observando la zona punteada se identifica la forma dentada.

Figura 2.6

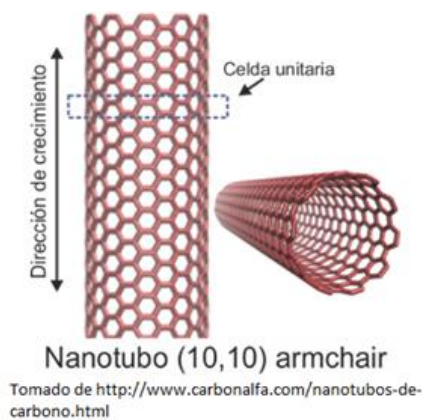
2.1.4.2 NANOTUBOS TIPO ARMCHAIR O SILLÓN

Si los índices $n = m$, los nanotubos se llaman nanotubos de sillón, por ejemplo, el nanotubo $(10,10)$, ver figura (2.7), formando un ángulo de 30° , se comportan como metales, es decir que conducen la electricidad fácilmente.

2.1.4.3 NANOTUBOS TIPO QUIRAL

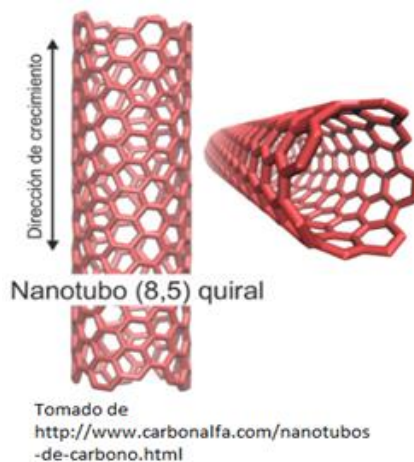
Los índices son diferentes ($n \neq m$) por ejemplo el nanotubo $(8,5)$ es un nanotubo

quiral que se comporta como metal (Figura 2.8).



Nanotubo sillón, observando la zona punteada tiene forma de sillón.

Figura 2.7



Nanotubo quirál, en la parte superior o inferior se observa la forma dislocada que es su característica.

Figura 2.8

2.1.5 ACTIVIDAD HIBRIDACIÓN DE ÁTOMO DE CARBONO

1) Para la formación de grafito la unión de los átomos es debido a la hibridación.

- a) sp^2 b) ap^3 c) sp

Responda falso o verdadero

2) El modelo de enlace de valencia fue desarrollado por:

Heitler y London

Linus

El enlace sigma es más fuerte que el enlace pi

El enlace pi es más fuerte que el enlace sigma

Completa la oración

En cada nivel del _____ spin de los _____ no puede estar

| F | V |
|--------------------------|--------------------------|
| <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |

orientado en el mismo sentido.

Responde la correcta

La cantidad de electrones de carbono es:

- a) 4 b) 3 c) 5 d) 6

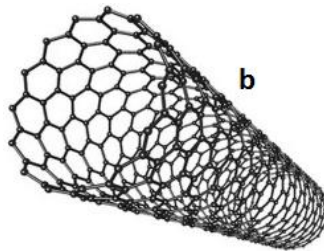
Relaciona con el correspondiente

MWNT _____ SWNT _____



Tomado de
<http://nuevatecnologiasmateriales.com/la-nanotecnologia-y-los-materiales-de-construccion/>

Nanotubo de pared múltiple

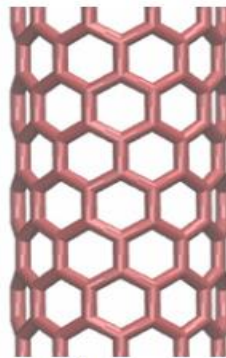


Tomado de <http://nanoc.us/es/>

Nanotubo de pared simple

Las coordenadas de nanotubo de la figura 2.1.7 son:

- a) (10,10)
b) (20,0)
c) (10,0)
d) (15,0)



Tomado de
<http://www.carbonalfa.com/cnt-imagenes-y->

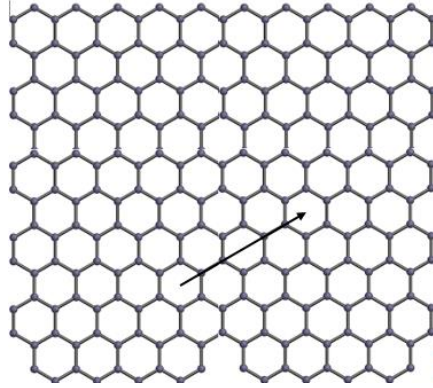
El vector quiral \vec{C}_h correspondiente con a figura 2.1.8 es:

a) $\vec{C}_h = 2\vec{a}_1 + 3\vec{a}_2$

b) $\vec{C}_h = 2\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2$

c) $\vec{C}_h = 3\vec{a}_1 + 3\vec{a}_2$

a) $\vec{C}_h = 4\vec{a}_1 + 3\vec{a}_2$



la

Completa la oración:

Un nanotubo tipo *zig-zag*, forma un ángulo de _____, en donde el índice n es _____ .

En el caso donde m=n el nombre del nanotubo es _____ y formando un ángulo de _____ finalmente el nanotubo donde n es diferente a m recibe el nombre de _____.

CAPÍTULO 3

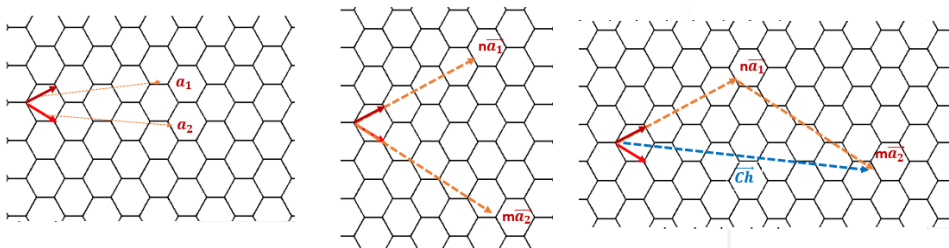
3.1 MAGNITUD DE VECTOR QUIRAL

Logro: Identifica teoremas del coseno y los aplica a la solución de pentágonos en una red de grafeno.

El vector Chiral define la posición relativa de dos sitios en la red de grafito está definido mediante dos números enteros (n, m), y por los vectores unitarios (\vec{a}_1, \vec{a}_2) de la red hexagonal, entonces el vector se puede escribir de la forma: (Alcca, 2005)

$$\vec{Ch} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (3.1)$$

Donde a_1 y a_2 son las magnitudes de los respectivos vectores de la red directa del grafeno. Ambos vectores tienen la misma magnitud, la cual es igual a 2.46 angstroms como se observa en la figura (3.1).



Los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2 son los vectores base de la celda del grafeno y se definen en la celdilla hexagonal como se muestra con las flechas rojas izquierda. El vector \vec{Ch} se define como $\vec{Ch} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$, donde n y m son números enteros.

Figura 3.1

Donde la magnitud $|\vec{c}_h|$ del vector está definido por:

$$|\vec{c}_h| = a\sqrt{n^2 + m^2 + mn} \quad (3.2)$$

Partiendo del teorema del coseno

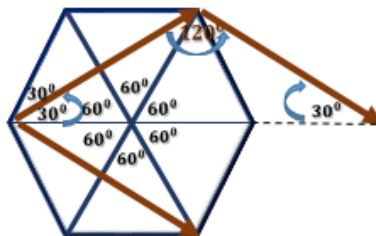
$$c = \sqrt{a^2 + b^2 - 2ab\cos(\varphi)} \quad (3.3)$$

Se puede hallar la magnitud del vector ver figura (3.1), donde $\vec{a}_1 n = b$, $\vec{a}_2 m = a$,
 $\vec{c}_h = c$

Donde

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a \therefore \varphi = 120^\circ \quad (3.4)$$

Como se observa en la figura (3.2)



Ángulos alternos e internos de los cuales se puede deducir el ángulo de 120° , teniendo en cuenta los vectores base \vec{a}_1 y \vec{a}_2

Figura 3.2

Reemplazando en la ecuación 3.3 queda:

$$|\vec{c}_h| = \sqrt{(an)^2 + (am)^2 - 2(an)(am)\cos(120^\circ)}$$

Simplificando paréntesis, potencias y reemplazando $\cos(120^\circ)$ por $\left(-\frac{1}{2}\right)$

$$|\vec{c}_h| = \sqrt{a^2n^2 + a^2m^2 - 2a^2nm\left(-\frac{1}{2}\right)}$$

Simplificando

$$|\vec{c}_h| = \sqrt{a^2n^2 + a^2m^2 + a^2nm}$$

Factorizando

$$|\vec{c}_h| = \sqrt{a^2(n^2 + m^2 + nm)}$$

$$|\vec{c}_h| = \sqrt{a^2}\sqrt{(n^2 + m^2 + nm)}$$

O sea

$$|\vec{c}_h| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (3.5)$$

Una vez conocida la separación interatómica entre los átomos de carbono, el diámetro de nanotubos (en Å) se puede calcular por la ecuación (3.5).

Ejemplo (3.1)

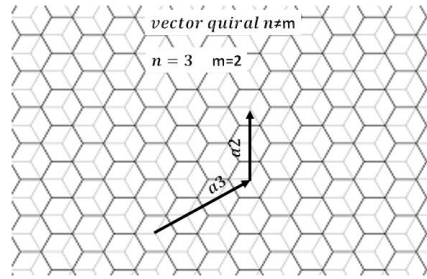


Figura 3.3

En la figura (3.3) se representa el vector quiral $\vec{c}_h = 3\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2$, hallar el diámetro del nanotubo donde $a = 2,46\text{\AA}$.

Solución

Utilizando la ecuación 3.5, tenemos.

$$|\vec{c}_h| = 2,46 \sqrt{(3^2 + 2^2 + 3 \cdot 2)}$$

$$|\vec{c}_h| = 2,46 \sqrt{(9 + 4 + 6)}$$

$$|\vec{c}_h| = 2,46\sqrt{19}$$

$$|\vec{c}_h| = 10,72\text{\AA}$$

Ejemplo (3.2)

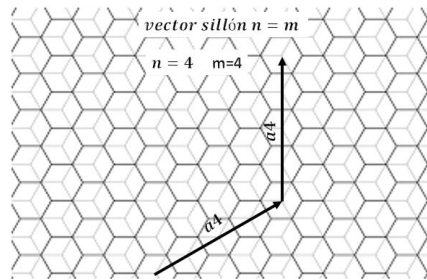


Figura 3.4

En la figura (3.4) se representa el vector quiral $\vec{c}_h = 4\vec{a}_1 + 4\vec{a}_2$ hallar el diámetro del nanotubo

Solución

Utilizando la ecuación 3.7, tenemos.

$$|\vec{c}_h| = 2,46\sqrt{(4^2 + 4^2 + 4 \cdot 4)}$$

$$|\vec{c}_h| = 2,46\sqrt{(16 + 16 + 16)}$$

$$|\vec{c}_h| = 2,46\sqrt{48}$$

$$|\vec{c}_h| = 17\text{Å}$$

Ejemplo (3.3)

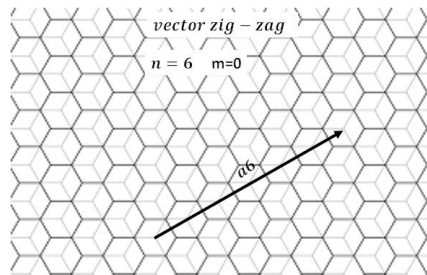


Figura 3.5

En la figura (3.5) se representa el vector quiral $\vec{c}_h = 6\vec{a}_1 + 0\vec{a}_2$ hallar diámetro del nanotubo.

Solución

Utilizando la ecuación 3.7, tenemos.

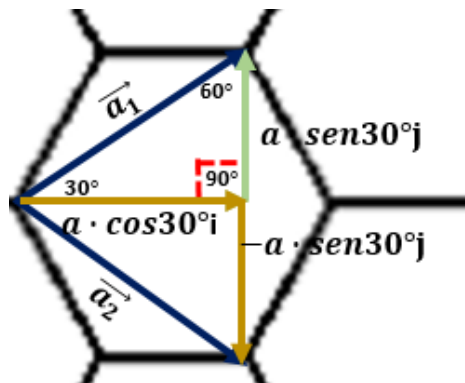
$$Ch = 2.46 \sqrt{(6^2 + 0^2 + 0 \cdot 6)}$$

$$Ch = 2.46 \sqrt{36}$$

$$Ch = 0,783 \cdot 6$$

$$Ch = 4,7 \text{ \AA}$$

3.1.1 DEMOSTRACIÓN DE $|\vec{c}_h| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}$



Descomposición de los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2 en sus componentes verticales y horizontales.

Figura 3.6

Partiendo de la figura 3.6, observamos los el vector \vec{a}_1 tiene componentes en el eje x y y , o sea:

$$\vec{a}_1 = a_1 \cos 30^\circ \hat{i} + a_1 \text{seno} 30^\circ \hat{j} \quad (3.8)$$

Expresándola con sus valores correspondientes queda:

$$\vec{a}_1 = a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a_1 \frac{1}{2} \hat{j} \quad (3.9)$$

Lo mismo ocurre con el vector \vec{a}_2 que corresponde a:

$$\vec{a}_2 = a_1 \cos 30^\circ \hat{i} - a_2 \text{seno} 30^\circ \hat{j} \quad (3.10)$$

Expresando con sus valores y teniendo en cuenta el sentido da:

$$\vec{a}_2 = a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a_2 \frac{1}{2} \hat{j} \quad (3.11)$$

El vector quiral expresado en la ecuación 3.1 es:

$$\vec{ch} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$$

Partiendo de la ecuación 3.9 y 3.11

$$\vec{a}_1 = a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a_1 \frac{1}{2} \hat{j}$$

$$\vec{a}_2 = a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a_2 \frac{1}{2} \hat{j}$$

Como en la ecuación 3.4

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a$$

Remplazando 3.9, 3.11 y 3.4 en 3.1

$$\vec{ch} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$$

Se obtiene

$$\vec{ch} = n\left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a \frac{1}{2} \hat{j}\right) + m\left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a \frac{1}{2} \hat{j}\right)$$

Ahora hallando la magnitud de \vec{ch}

$$|\vec{ch}| = \left| n\left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a \frac{1}{2} \hat{j}\right) + m\left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a \frac{1}{2} \hat{j}\right) \right|$$

Multiplicando y organizando n y m por cada término

$$|\vec{ch}| = \left| na \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + na \frac{1}{2} \hat{j} + ma \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - ma \frac{1}{2} \hat{j} \right|$$

$$|\vec{ch}| = \left| na \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + ma \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + na \frac{1}{2} \hat{j} - ma \frac{1}{2} \hat{j} \right|$$

Factorizando $m + n$ y $m - n$

$$|\vec{Ch}| = \left| (n+m)a\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} + (n-m)a\frac{1}{2}\hat{j} \right|$$

(3.13)

Hallando la magnitud

$$|\vec{Ch}| = \left[\left((n+m)a\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^2 + \left((n-m)a\frac{1}{2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

Resolviendo los cuadrados

$$|\vec{Ch}| = \left[(n^2 + 2nm + m^2)a^2\frac{3}{4} + (n^2 - 2nm + m^2)a^2\frac{1}{4} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\vec{Ch}| = [a^2]^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{3}{4}n^2 + \frac{3}{4}2nm + \frac{3}{4}m^2 \right) + \left(\frac{1}{4}n^2 - \frac{1}{4}2nm + \frac{1}{4}m^2 \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\vec{Ch}| = [a^2]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{3}{4}n^2 + \frac{6}{4}nm + \frac{3}{4}m^2 + \frac{1}{4}n^2 - \frac{2}{4}nm + \frac{1}{4}m^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

Sumando los términos semejantes llegamos a

$$|\vec{Ch}| = [a^2]^{\frac{1}{2}} [n^2 + nm + m^2]^{\frac{1}{2}}$$

Simplificando, llegamos a la magnitud del vector quiral que es:

$$|\vec{Ch}| = a[n^2 + m^2 + nm]^{\frac{1}{2}}$$

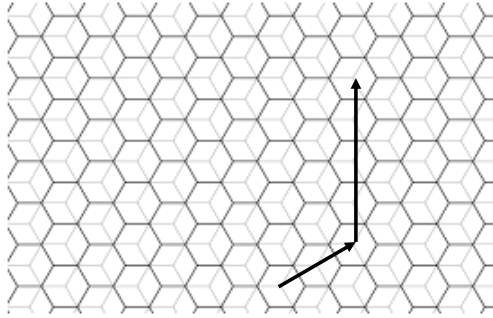
La cual se puede expresar como la ecuación 3.6:

$$|\vec{ch}| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}$$

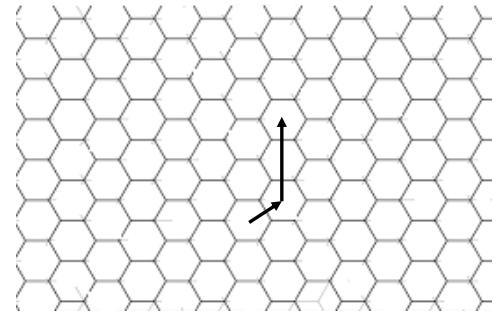
3.1.2 ACTIVIDAD MAGNITUD DE VECTOR QUIRAL

Resolver

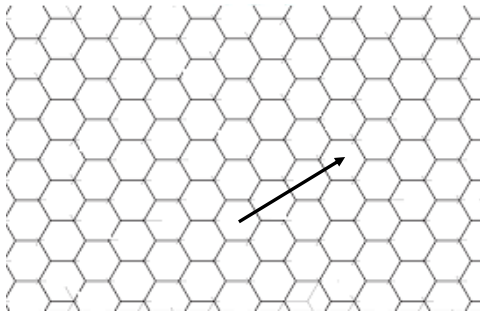
1. Del vector $\vec{c}_h = 8\vec{a}_1 + 3\vec{a}_2$, , hallar:
 - a. La clase
 - b. La gráfica
 - c. La magnitud
2. Del vector $\vec{c}_h = 6\vec{a}_1 + 6\vec{a}_2$ hallar:
 - a. La clase
 - b. La gráfica
 - c. La magnitud
3. Del vector $\vec{c}_h = 5\vec{a}_1 + 6\vec{a}_2$, hallar:
 - a. La clase
 - b. La gráfica
 - c. La magnitud
4. De las figuras siguientes hallar:
 - a. La clase
 - b. La magnitud



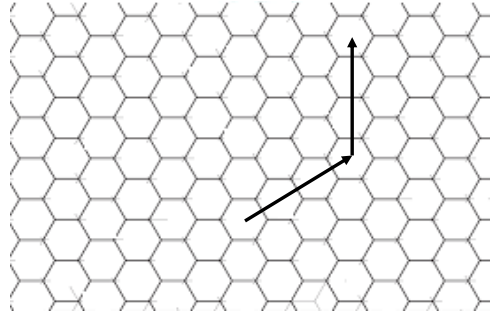
A



B



C



D

Figura 3.9

CAPÍTULO 4

4.1 ÁNGULO QUIRAL

Logro: Identificar las relaciones vectoriales con la función trigonométrica aplicada a las celdas de grafeno.

Las propiedades de los nanotubos de carbono dependen principalmente de dos parámetros que son el diámetro, y el ángulo quiral, llamado también ángulo de helicidad, de estos dos parámetros nacen los llamados índices de Hamada, que no son más que un par de números enteros (n, m) que describen el número de vectores unitarios a lo largo de las direcciones \vec{a}_1 y \vec{a}_2 (Alcca, 2005)

Para comprender mejor recordemos que es un producto punto entre dos vectores.

Definición geométrica del producto escalar.

El producto escalar de dos vectores en un espacio euclídeo se define como el producto de sus módulos por el coseno del ángulo φ que forma

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = |\vec{A}| |\vec{B}| \cos(\varphi) \quad (4.1)$$

Despejando sería

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{\vec{A} \cdot \vec{B}}{|\vec{A}| |\vec{B}|} \quad (4.2)$$

Por ejemplo, utilizando y aplicando la relación anterior donde

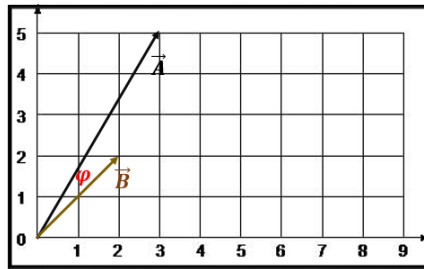
$$\vec{A} = 3\hat{i} + 5\hat{j}$$

(4.3)

$$\vec{B} = 2\hat{i} + 2\hat{j}$$

(4.4)

Gráficamente los vectores se representan en la figura 4.1



Representación gráfica de los vectores $\vec{A} = 3\hat{i} + 5\hat{j}$ y $\vec{B} = 2\hat{i} + 2\hat{j}$ con el ángulo que ellos forman.

Figura 4.1

La magnitud de cada vector es:

$$|\vec{A}| = (3^2 + 5^2)^{\frac{1}{2}} = (9 + 25)^{\frac{1}{2}} = (34)^{\frac{1}{2}}$$

(4.5)

$$|\vec{B}| = (2^2 + 2^2)^{\frac{1}{2}} = (4 + 4)^{\frac{1}{2}} = (8)^{\frac{1}{2}}$$

(4.6)

Producto escalar

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = (3i + 5j) \cdot (2i + 2j)$$

(4.7)

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = 6 + 10 = 16$$

(4.8)

Remplazando 4.5, 4.6 y 4.8 en 4.2 nos queda

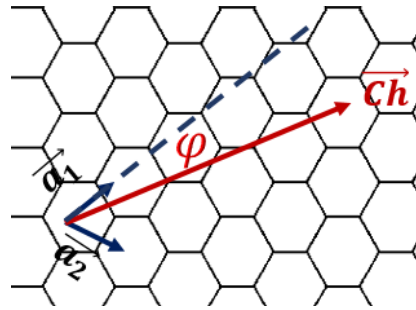
$$\varphi = \cos^{-1} \frac{\vec{A} \cdot \vec{B}}{|\vec{A}| |\vec{B}|} = \cos^{-1} \frac{16}{16,5} = \cos^{-1}(0,96) = 0,3^\circ$$

(4.9)

Donde $0,3^\circ$ es el ángulo entre \vec{A} y \vec{B}

Ahora aplicando a \vec{c}_h y \vec{a}_1

Se llama ángulo quiral al comprendido entre \vec{c}_h y \vec{a}_1



Representación gráfica entre el ángulo quiral entre los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2

Figura 4.2

Siendo φ el ángulo quiral

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{[2n+m]}{2[n^2+nm+m^2]^{\frac{1}{2}}}$$

(4.10)

Ejemplo:

1. En un nanotubo sillón (3,3), ¿cuál es el ángulo quiral?

Solución:

Como n es 3, m es 3 entonces remplazamos en.

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{[2 \cdot 3 + 3]}{2[3^2 + 3 \cdot 3 + 3^2]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{[6 + 3]}{2[9 + 9 + 9]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{9}{2[27]^{\frac{1}{2}}} = \cos^{-1} \frac{9}{2 \cdot 3 \cdot \sqrt{3}} = \cos^{-1} \frac{3\sqrt{3}}{2 \cdot \sqrt{3} \cdot \sqrt{3}} = \cos^{-1} \frac{3\sqrt{3}}{2 \cdot 3}$$

$$\cos^{-1} \frac{\sqrt{3}}{2} \varphi = 30^\circ$$

2. En un nanotubo zigzag (8,0), cuál es el ángulo quiral.

Solución:

Como n es 8, m es 0 entonces remplazamos en.

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{[2 \cdot 8 + 0]}{2[8^2 + 8 \cdot 0 + 0]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{16}{2[64]^{\frac{1}{2}}} = \cos^{-1} \frac{16}{2 \cdot 8} = \cos^{-1} \frac{16}{16} = \cos^{-1}(1) = \cos^{-1}(0)$$

$$\varphi = 0^\circ$$

4.1.1 DEMOSTRACIÓN DE $\varphi = \cos^{-1} \frac{[2n+m]}{2[n^2+nm+m^2]^{\frac{1}{2}}}$

Referenciando la ecuación 3.13

$$\vec{ch} = (n + m)a\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} + (n - m)a\frac{1}{2}\hat{j}$$

Teniendo en cuenta la ecuación 3.9

$$\vec{a}_1 = a \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} + a \cdot \frac{1}{2}\hat{j}$$

Multiplicando

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{ch} = a^2 \frac{3}{4}n + a^2 \frac{3}{4}m + a^2 \frac{1}{4}n - a^2 \frac{1}{4}m$$

Simplificando

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{ch} = a^2 \frac{4}{4}n + a^2 \frac{2}{4}m$$

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{ch} = a^2 n + a^2 \frac{1}{2}m$$

Factorizando a^2

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{ch} = a^2 \left[n + \frac{1}{2}m \right]$$

Ahora hallándole la magnitud a \vec{a}_1

$$|\vec{a}_1| = \left| a \frac{\sqrt{3}}{2}i + a \frac{1}{2}j \right| = \left[\left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \right)^2 + \left(a \frac{1}{2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\vec{a}_1| = \left[a^2 \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{4} \right) \right]^{\frac{1}{2}} = [a^2]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{4}{4} \right]^{\frac{1}{2}} = a$$

Hallando la magnitud a \vec{ch}

$$|\vec{ch}| = \left| (n+m)a \frac{\sqrt{3}}{2}i + (n-m)a \frac{1}{2}j \right| = \left[\left((n+m)a \frac{\sqrt{3}}{2} \right)^2 + \left((n-m)a \frac{1}{2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\vec{ch}| = \left[(n^2 + 2nm + m^2)a^2 \frac{3}{4} + (n^2 - 2nm + m^2)a^2 \frac{1}{4} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\vec{ch}| = [a^2]^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{3}{4}n^2 + \frac{3}{4}2nm + \frac{3}{4}m^2 \right) + \left(\frac{1}{4}n^2 - \frac{1}{4}2nm + \frac{1}{4}m^2 \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\vec{Ch}| = [a^2]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{3}{4}n^2 + \frac{6}{4}nm + \frac{3}{4}m^2 + \frac{1}{4}n^2 - \frac{2}{4}nm + \frac{1}{4}m^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\vec{Ch}| = [a^2]^{\frac{1}{2}} [n^2 + nm + m^2]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\vec{Ch}| = a[n^2 + m^2 + nm]^{\frac{1}{2}}$$

El producto de $|\vec{a}_1| |\vec{Ch}|$ es

$$|\vec{a}_1| |\vec{Ch}| = aa[n^2 + m^2 + nm]^{\frac{1}{2}}$$

$$|\vec{a}_1| |\vec{Ch}| = a^2[n^2 + m^2 + nm]^{\frac{1}{2}}$$

Remplazando en:

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{Ch}}{|\vec{a}_1| |\vec{Ch}|}$$

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{Ch}}{|\vec{a}_1| |\vec{Ch}|} = \cos^{-1} \frac{a^2 \left[n + \frac{1}{2}m \right]}{a^2 [n^2 + nm + m^2]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{2 \left[n + \frac{1}{2}m \right]}{2 [n^2 + nm + m^2]^{\frac{1}{2}}}$$

Quedando como la ecuación 4.10

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{[2n + m]}{2[n^2 + nm + m^2]^{\frac{1}{2}}}$$

4.1.2 ACTIVIDAD ÁNGULO QUIRAL

- 1) En un nanotubo sillón (4,4), cual es el ángulo quiral.
- 2) En un nanotubo quiral (6,7), cual es el ángulo quiral.
- 3) En un nanotubo zig-zag (7,0), cual es el ángulo quiral.
- 4) Demostrar $\vec{Ch} = (n + m)a\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{i} + (n - m)a\frac{1}{2}\mathbf{j}$
- 5) Demostrar $\vec{a}_1 \cdot \vec{Ch} = a^2 \left[n + \frac{1}{2}m \right]$
- 6) Demostrar $|\vec{a}_1| = a$
- 7) Demostrar $|\vec{Ch}| = a[n^2 + m^2 + nm]^{\frac{1}{2}}$
- 8) Demostrar $|\vec{a}_1||\vec{Ch}| = a^2[n^2 + m^2 + nm]^{\frac{1}{2}}$
- 9) Demostrar $\varphi = \cos^{-1} \frac{[2n+m]}{2[n^2+nm+m]^{\frac{1}{2}}}$

CAPÍTULO 5

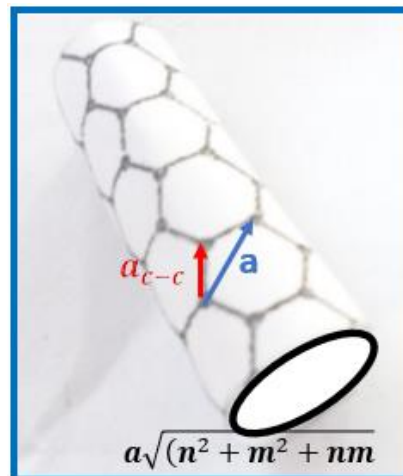
5.1 DIAMETRO Y RADIO DEL NANOTUBO

Para hallar el diámetro y radio de un nanotubo se debe relacionar la magnitud del vector quiral $|\vec{Ch}| = a\sqrt{n^2+m^2+mn}$ que corresponde al perímetro entonces el diámetro es: (Alcca, 2005)

$$D = \frac{a\sqrt{n^2+m^2+mn}}{\pi} \quad (5.1)$$

Expresándolo en función del radio queda:

$$r = \frac{a\sqrt{n^2+m^2+mn}}{2\pi} \quad (5.2)$$



La figura nos muestra el perímetro de nanotubo de carbono.

Figura 5.1

Se puede expresar el diámetro y el radio en función de la distancia entre los átomos de carbono $a_{c-c} = 0,142nm$,

quedando:

$$D = \frac{\sqrt{3}a_{c-c}\sqrt{n^2+m^2+mn}}{\pi}$$

(5.3)

$$r = \frac{\sqrt{3}a_{c-c}\sqrt{n^2+m^2+mn}}{2\pi}$$

(5.4)

Ejemplo:

En un nanotubo (40,20) cual es el diámetro y radio.

Solución:

Remplazando queda

$$D = \frac{\sqrt{3} \cdot 0,142nm\sqrt{40^2+20^2 + 20 \cdot 40}}{3,14}$$

$$D = 4,14nm$$

Dividiendo por 2 hallamos el radio.

$$r = 2,07nm$$

5.1.1 DEMOSTRACIÓN DE $r = \frac{\sqrt{3}a_{c-c}\sqrt{n^2+m^2+mn}}{2\pi}$

$$d_t = \frac{\text{perimetro}}{\pi} = \frac{|\vec{Ch}|}{\pi}$$

$$d_t = \frac{a[n^2 + m^2 + nm]^{\frac{1}{2}}}{\pi} = \frac{a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{\pi}$$

Como $a = \sqrt{3}a_{c-c}$ donde a_{c-c} es la distancia entre carbonos.

Queda

$$D = \frac{\sqrt{3}a_{c-c}\sqrt{n^2+m^2+mn}}{\pi}$$

O sea, en función del radio

$$r = \frac{\sqrt{3}a_{c-c}\sqrt{n^2+m^2+mn}}{2 \cdot \pi}$$

5.1.2 ACTIVIDAD RADIO Y DIAMETRO DE UN NANOTUBO

1. En un nanotubo (34,0) cual es el diámetro y radio.
2. En un nanotubo (9,5) cual es el diámetro y radio.
3. En un nanotubo (10,10) cual es el diámetro y radio.
4. Teniendo en cuenta el triángulo, y con ayuda del teorema del seno, encuentra la relación entre a_{c-c} y a .

$$\frac{a_{cc}}{\text{seno } 30^\circ} = \frac{a}{\text{seno } 120^\circ}$$

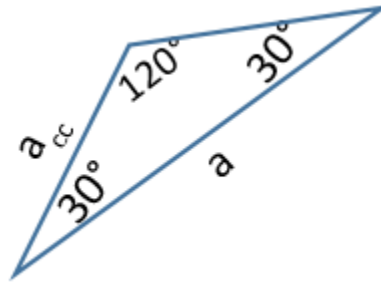


Figura 5.2

5. De acuerdo a la gráfica encuentra el radio y diámetro del nanotubo formado.

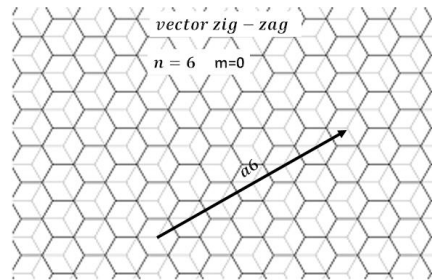


Figura 5.3

1. Del vector $\vec{c}_h = 8\vec{a}_1 + 3\vec{a}_2$, encontrar el diámetro y radio.
2. De acuerdo a la gráfica encuentra el radio y diámetro del nanotubo formado.

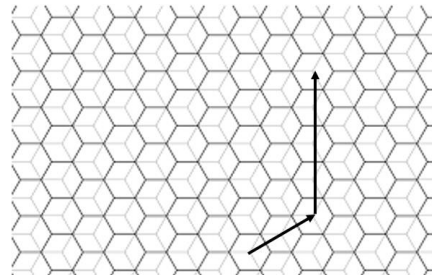


Figura 5.4

3. De acuerdo a la gráfica encuentra el radio y diámetro del nanotubo formado.

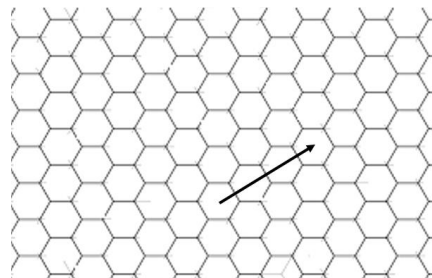
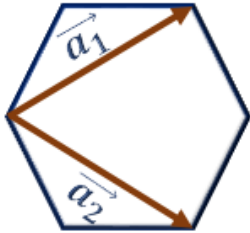


Figura 5.5

CAPÍTULO 6

6.1 ÀREA DEL HEXÁGONO (red panal)



Hexágono formada por los carbonos con los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2 .

Figura 6.1

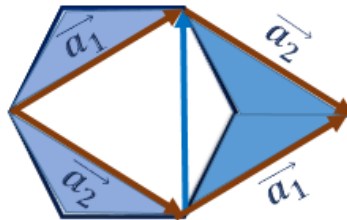
Para calcular el área de un hexágono utilizando la magnitud del producto vectorial entre dos vectores, como muestra la figura 6.1, se tiene los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2 , formando el paralelogramo figura 2 se observa que las áreas azules son iguales, entonces el área del paralelogramo es igual al área del hexágono ver figura 6.1

El área de un hexágono como en la figura 6.1 está dada por:

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = a^2 \frac{\sqrt{3}}{2}$$

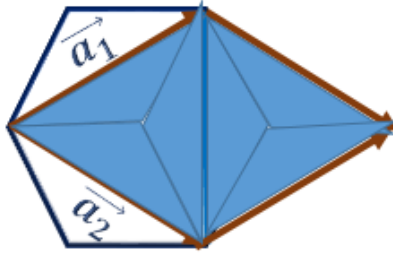
(6.1)

Como se observa en la figura 6.2 y 6.3 se observa que área azul son equivalentes



El área sombreada de azul es igual al área del hexágono.

Figura 6.2



Se observa como se forma el área a partir de las fracciones azules

Figura 6.3

6.1.1 DEMOSTRACIÓN $|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = a^2 \frac{\sqrt{3}}{2}$

La magnitud del producto de los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2 es $|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$ que está dado por:

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = |(a_1 \text{seno}30^\circ \hat{i} + a_1 \text{cos}30^\circ \hat{j}) \times (-a_2 \text{seno}30^\circ \hat{i} + a_1 \text{cos}30^\circ \hat{j})|$$

Dando los valores correspondientes de seno y coseno queda

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \left| \left(a_1 \frac{1}{2} \hat{i} + a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} \right) \times \left(-a_2 \frac{1}{2} \hat{i} + a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} \right) \right|$$

O expresándolo así

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \left| \left(a_1 \frac{1}{2} \hat{i} + a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} + 0 \hat{k} \right) \times \left(-a_2 \frac{1}{2} \hat{i} + a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} + 0 \hat{k} \right) \right|$$

Expresándolo en su matriz del producto vectorial y teniendo en cuenta que $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a$

Queda:

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ a\frac{1}{2} & a\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -a\frac{1}{2} & a\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{vmatrix}$$

Resolviendo queda

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \left| \left[\left(a\frac{\sqrt{3}}{2} \cdot 0 \right) - \left(0 \cdot a\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right] \hat{i} - \left[\left(a\frac{1}{2} \cdot 0 \right) - \left(0 \cdot -a\frac{1}{2} \right) \right] \hat{j} + \left[\left(a\frac{1}{2} \cdot a\frac{\sqrt{3}}{2} \right) - \left(a\frac{\sqrt{3}}{2} \cdot -a\frac{1}{2} \right) \right] \hat{k} \right|$$

Simplificando

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \left| \left[\left(a\frac{1}{2} \cdot a\frac{\sqrt{3}}{2} \right) - \left(a\frac{\sqrt{3}}{2} \cdot -a\frac{1}{2} \right) \right] \hat{k} \right|$$

Haciendo los productos de cada término

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \left| \left[a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} + a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} \right] \hat{k} \right|$$

Sumando

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \left| \left[a^2 \frac{\sqrt{3}}{2} \right] \hat{k} \right|$$

Hallando la magnitud, donde; $\hat{k} \cdot \hat{k} = 1$; $((a^2)^2)^{\frac{1}{2}} = a^2$; $\left[\left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2}$ quedando como en la ecuación 6.8

$$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = a^2 \frac{\sqrt{3}}{2}$$

Ejemplo:

Cuál es el área de una celda de grafeno si $a = 0.246 \text{ nm}$

Solución

Tomando la ecuación 1 tenemos

$$A = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = (0.246)^2 \frac{\sqrt{3}}{2} = 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ nm}^2$$

6.1.2 ACTIVIDAD ÁREA DEL HEXÁGONO (RED PANAL)

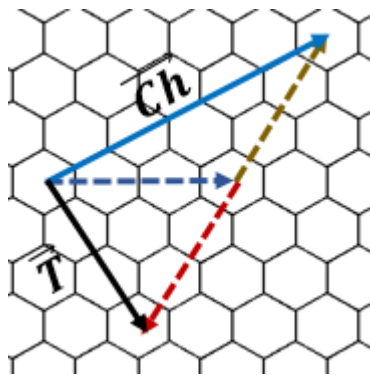
1. Compara la relación geométrica del hexágono con nuestro resultado hallado vectorialmente. Que puede concluir.
2. Realiza en cartulina dos hexágonos y demuestra que sus áreas son equivalentes a partir de los triángulos internos que los conforman.

CAPÍTULO 7

7.1 VECTOR TRANSLACIÓN

El vector translación corresponde al \vec{T} en la red de grafito como muestra la figura 7.1 que es normal al vector chiral. (Alcca, 2005)

Ilustremos con un ejemplo



Representación gráfica de los vectores \vec{ch} y \vec{T} los cuales son ortogonales

Figura 7.1

Como se observa en la figura (7.1), los vectores \vec{ch} y \vec{T} son ortogonales o sea forman un ángulo de 90° , el vector \vec{T} está definido por:

$$\vec{T} = \frac{2m+n}{d_R} \vec{a}_1 - \frac{2n+m}{d_R} \vec{a}_2 \quad (7.1)$$

Siendo d_R en el máximo común divisor de los términos $(2m + n)$ y $(2n + m)$, por ejemplo, si $n=4$ y $m=2$, entonces $2m + n = 2 \cdot 2 + 2 = 6$, y $2n + m = 2 \cdot 4 + 2 = 10$, siendo 2 el máximo común divisor de 6 y 10, reemplazando estos valores en la ecuación 1 quedaría.

$$\vec{T} = \frac{2 \cdot 2 + 4}{2} \vec{a}_1 - \frac{2 \cdot 4 + 2}{2} \vec{a}_2$$

Realizando las operaciones queda:

$$\vec{T} = \frac{8}{2}\vec{a}_1 - \frac{10}{2}\vec{a}_2$$

Simplificando

$$\vec{T} = 4\vec{a}_1 - 5\vec{a}_2 \text{ o tambien } \vec{T} = (4, -5)$$

Ejemplo

Hallar el vector transaccional si $n=5$ y $m=5$

Solución Entonces $2m + n = 2 \cdot 5 + 5 = 15$, y $2n + m = 2 \cdot 5 + 5 = 15$, siendo 15 el máximo común divisor de 15, reemplazando estos valores en la ecuación 1 quedaría.

$$\vec{T} = \frac{2 \cdot 5 + 5}{15}\vec{a}_1 - \frac{2 \cdot 5 + 5}{15}\vec{a}_2$$

Realizando las operaciones queda:

$$\vec{T} = 1\vec{a}_1 - 1\vec{a}_2$$

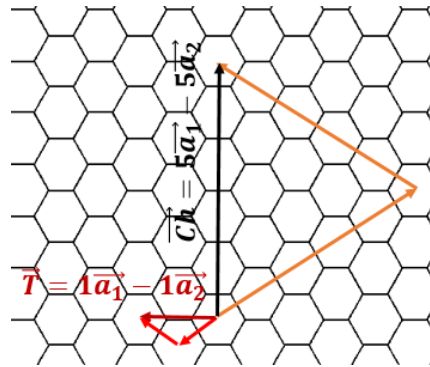


Figura 7.2

7.1.1 DEMOSTRACIÓN DE $\vec{T} = \frac{2m+n}{d_R} \vec{a}_1 - \frac{2n+m}{d_R} \vec{a}_2$

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2$$

$$\vec{Ch} = n \vec{a}_1 + m \vec{a}_2$$

$$\vec{Ch} \cdot \vec{T} = (t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2) \cdot (n \vec{a}_1 + m \vec{a}_2) = t_1 n a_1^2 + t_2 m a_2^2 = 0$$

$$t_1 n a_1^2 = -(t_2 m a_2^2)$$

$$\frac{t_1}{t_2} = -\frac{m a_1^2}{n a_2^2}$$

$$t_1 = \frac{2m+n}{d_R}$$

$$t_2 = -\frac{2n+m}{d_R}$$

En donde t_1 y t_2 son los coeficientes de \vec{a}_1 y \vec{a}_2 , partiendo de

$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2$ nos queda expresada el vector traslación como:

$$\vec{T} = \frac{2m + n}{d_R} \vec{a}_1 - \frac{2n + m}{d_R} \vec{a}_2$$

Donde d_R es el máximo común divisor, utilizando $2m + n$ y $2n + m$.

7.1.2 ACTIVIDAD VECTOR TRANSLACIÓN

- 1) Hallar el vector translación si $n=5$ y $m=5$
- 2) A partir de la figura 7.3 hallar el vector translación.

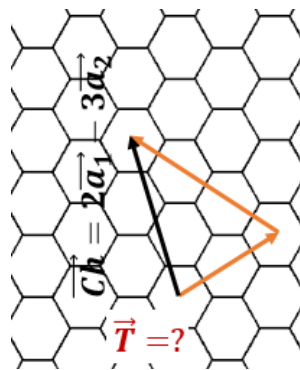


Figura 7.3

Hallar el vector translación si $n=4$ y $m=0$

- 3) Hallar el vector translación si $n=6$ y $m=3$
- 4) A partir de la gráfica hallar el vector translación.
- 5) Hallar el vector translación si $n=5$ y $m=5$
- 6) A partir de la gráfica hallar el vector translación.
- 7) Hallar el vector translación si $n=4$ y $m=0$
- 8) Hallar el vector translación si $n=6$ y $m=3$
- 9) A partir de la gráfica hallar el vector translación.

CAPÍTULO 8

8.1 CELDA UNITARIA

El área de la celda unitaria es la magnitud del producto vectorial entre el vector quiral \vec{Ch} , el vector translación \vec{T} ver figura 8.1. (Alcca, 2005)

El área está definida por:

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \frac{\sqrt{3}}{d_R} a^2 (n^2 + nm + m^2) \quad (8.1)$$

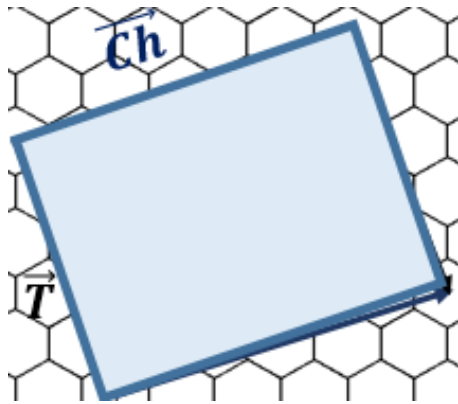


Figura 8.1

Partiendo del vector quiral y translación ver ecuaciones

$$\vec{Ch} = (n + m)a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + (n - m)a \frac{1}{2} \hat{j}$$

$$\vec{T} = \left(\frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \hat{i} + \left(\frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} \right) \hat{j}$$

Hallando la magnitud del producto cruz entre estos dos vectores y expresándola de forma vectorial es:

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ (n+m)a\frac{\sqrt{3}}{2} & (n-m)a\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{m}{d_R}a\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R}a\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{3m}{d_R}a\frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R}a\frac{1}{2} & 0 \end{vmatrix}$$

Solucionando el producto

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \left[(n-m)a\frac{1}{2} \right] [0] \right\} - \left\{ \left[\frac{3m}{d_R}a\frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R}a\frac{1}{2} \right] [0] \right\} \hat{i} - \left\{ \left[(n+m)a\frac{\sqrt{3}}{2} \right] [0] \right\} - \left\{ \left[\frac{m}{d_R}a\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R}a\frac{\sqrt{3}}{2} \right] [0] \right\} \hat{j} + \left\{ \left[(n+m)a\frac{\sqrt{3}}{2} \right] \left[\frac{3m}{d_R}a\frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R}a\frac{1}{2} \right] \right\} - \left\{ \left[\frac{m}{d_R}a\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R}a\frac{\sqrt{3}}{2} \right] \left[(n-m)a\frac{1}{2} \right] \right\} \hat{k} \right|$$

Simplificando

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \left[(n+m)a\frac{\sqrt{3}}{2} \right] \left[\frac{3m}{d_R}a\frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R}a\frac{1}{2} \right] \right\} - \left\{ \left[\frac{m}{d_R}a\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R}a\frac{\sqrt{3}}{2} \right] \left[(n-m)a\frac{1}{2} \right] \right\} \hat{k} \right|$$

Resolviendo da

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \frac{\sqrt{3}}{d_R} a^2 (n^2 + nm + m^2)$$

EJEMPLO

Hallar el área de la celda unitaria con $n = 4$ y $m = 2$

Solución

Primero hallamos el máximo común divisor en este caso es 2, aplicando la ecuación nos queda

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \frac{\sqrt{3}}{d_R} a^2 (n^2 + nm + m^2)$$

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \frac{\sqrt{3}}{2} (0.246\text{nm})^2 (4^2 + 4 \cdot 2 + 2^2)$$

O sea

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \frac{\sqrt{3}}{2} (0.246\text{nm})^2 (28) = 1,7 \cdot 10^{-9} \text{nm}^2$$

Encontrar el número de hexágonos en la celda unitaria

Solución

El número de hexágonos se obtiene dividiendo el área de la celda unitaria entre el área de un hexágono.

O sea

$$N = \frac{2}{d_R} (n^2 + nm + m^2)$$

Remplazando queda

$$N = \frac{2}{2} (4^2 + 4 \cdot 2 + 2^2) = 28$$

$$8.1.1 \text{ DEMOSTRACIÓN } |\vec{C} \times \vec{T}| = \frac{\sqrt{3}}{d_R} a^2 (n^2 + nm + m^2)$$

$$\vec{T} = \frac{2m+n}{d_R} \vec{a}_1 - \frac{2n+m}{d_R} \vec{a}_2$$

Realizando el producto cruz

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| (n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2) x \left(\frac{2m+n}{d_R} \vec{a}_1 - \frac{2n+m}{d_R} \vec{a}_2 \right) \right|$$

Expresándolo en función del valor de sus ángulos

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left[n \left(a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a_1 \frac{1}{2} \hat{j} \right) + m \left(a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a_2 \frac{1}{2} \hat{j} \right) \right] x \left[\frac{2m+n}{d_R} \left(a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a_1 \frac{1}{2} \hat{j} \right) - \frac{2n+m}{d_R} \left(a_1 \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a_2 \frac{1}{2} \hat{j} \right) \right] \right|$$

Como $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a$ queda expresado como

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left[n \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a \frac{1}{2} \hat{j} \right) + m \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a \frac{1}{2} \hat{j} \right) \right] x \left[\frac{2m+n}{d_R} \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a \frac{1}{2} \hat{j} \right) - \frac{2n+m}{d_R} \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a \frac{1}{2} \hat{j} \right) \right] \right|$$

Realizando los productos de cada término

$$\begin{aligned} |\vec{Ch} \times \vec{T}| = & \left| \left[\left(na \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + na \frac{1}{2} \hat{j} \right) + \left(ma \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - ma \frac{1}{2} \hat{j} \right) \right] x \left[\left(\frac{2m+n}{d_R} \right) \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a \frac{1}{2} \hat{j} \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. \left(-\frac{2n+m}{d_R} \right) \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a \frac{1}{2} \hat{j} \right) \right] \right| \end{aligned} \quad (8.2)$$

Ahora, simplificando por aparte el vector \vec{T}

$$\vec{T} = \left[\left(\frac{2m+n}{d_R} \right) \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a \frac{1}{2} \hat{j} \right) + \left(-\frac{2n+m}{d_R} \right) \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a \frac{1}{2} \hat{j} \right) \right]$$

Separando las fracciones

$$\vec{T} = \left[\left(\frac{2m}{d_R} + \frac{n}{d_R} \right) \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + a \frac{1}{2} \hat{j} \right) + \left(-\frac{2n}{d_R} - \frac{m}{d_R} \right) \left(a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - a \frac{1}{2} \hat{j} \right) \right]$$

Realizando los productos de cada término

$$\vec{T} = \left[\frac{2m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{2m}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} + \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{n}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} - \frac{2n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{2n}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} - \frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{m}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} \right]$$

Organizando las \hat{i} y \hat{j}

$$\vec{T} = \left[\frac{2m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - \frac{2n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - \frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{2m}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} + \frac{n}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} + \frac{2n}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} + \frac{m}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} \right]$$

Simplificando

$$\vec{T} = \left[\frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} + \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} \hat{j} \right]$$

Factorizando

$$\vec{T} = \left[\left(\frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \hat{i} + \left(\frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} \right) \hat{j} \right] \quad (8.3)$$

Ahora, haciendo producto cruz de las ecuaciones 8.2 y 8.3

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left[(n+m)a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + (n-m)a \frac{1}{2} \hat{j} \right] \times \left[\left(\frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \hat{i} + \left(\frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} \right) \hat{j} \right] \right|$$

Organizando la matriz

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ (n+m)a \frac{\sqrt{3}}{2} & (n-m)a \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} & 0 \end{vmatrix}$$

Resolviendo

$$\begin{aligned} |\vec{Ch} \times \vec{T}| = & \left| \left\{ \left[(n-m)a \frac{1}{2} \right] [0] \right\} - \left\{ \left[\frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} \right] [0] \right\} \hat{i} - \left\{ \left[(n+m)a \frac{\sqrt{3}}{2} \right] [0] \right\} - \right. \\ & \left. \left\{ \left[\frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \right] [0] \right\} \hat{j} + \left\{ \left[(n+m)a \frac{\sqrt{3}}{2} \right] \left[\frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} \right] \right\} - \left\{ \left[\frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} - \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \right] \left[(n-m)a \frac{1}{2} \right] \right\} \hat{k} \left| \right. \end{aligned}$$

Simplificando

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \left[(n+m)a \frac{\sqrt{3}}{2} \right] \left[\frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} \right] \right\} - \left\{ \left[\frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \right] \left[(n-m)a \frac{1}{2} \right] \right\} \right| \hat{k}$$

Realizando las multiplicaciones internas

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \left[\left(na \frac{\sqrt{3}}{2} + ma \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \left[\frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} \right] \right\} - \left\{ \left[\frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} \right] \left[\left(na \frac{1}{2} - ma \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \right| \hat{k}$$

Ahora, los productos de cada término

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \left[na \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + na \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} + ma \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{3m}{d_R} a \frac{1}{2} + ma \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{3n}{d_R} a \frac{1}{2} \right] \right\} - \left\{ \left[\left(\frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} na \frac{1}{2} - \frac{m}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} ma \frac{1}{2} - \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} na \frac{1}{2} + \frac{n}{d_R} a \frac{\sqrt{3}}{2} ma \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \right| \hat{k}$$

Resolviendo las fracciones

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \left[\frac{3\sqrt{3}nm}{4} a^2 + \frac{\sqrt{3}3n^2}{4} a^2 + \frac{\sqrt{3}3m^2}{4} a^2 + \frac{\sqrt{3}3nm}{4} a^2 \right] \right\} - \left\{ \left[\left(\frac{nm}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{m^2}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{n^2}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} + \frac{nm}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} \right) \right] \right\} \right| \hat{k}$$

Solucionando paréntesis internos

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \frac{3\sqrt{3}nm}{4d_R} a^2 + \frac{\sqrt{3}3n^2}{4d_R} a^2 + \frac{\sqrt{3}3m^2}{4d_R} a^2 + \frac{\sqrt{3}3nm}{4d_R} a^2 - \frac{nm}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} + \frac{m^2}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} + \frac{n^2}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{nm}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} \right\} \hat{k} \right|$$

Organizando

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \frac{3\sqrt{3}nm}{4d_R} a^2 + \frac{\sqrt{3}3nm}{4d_R} a^2 - \frac{nm}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{nm}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} + \frac{\sqrt{3}3n^2}{4d_R} a^2 + \frac{n^2}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} + \frac{\sqrt{3}3m^2}{4d_R} a^2 + \frac{m^2}{d_R} a^2 \frac{\sqrt{3}}{4} \right\} \hat{k} \right|$$

Simplificando

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \frac{4\sqrt{3}nm}{4d_R} a^2 + \frac{4\sqrt{3}n^2}{4d_R} a^2 + \frac{4\sqrt{3}m^2}{4d_R} a^2 \right\} \hat{k} \right|$$

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \left| \left\{ \frac{\sqrt{3}nm}{d_R} a^2 + \frac{\sqrt{3}n^2}{d_R} a^2 + \frac{\sqrt{3}m^2}{d_R} a^2 \right\} \hat{k} \right|$$

Factorizando

$$|\vec{Ch} \times \vec{T}| = \frac{\sqrt{3}}{d_R} a^2 (n^2 + nm + m^2)$$

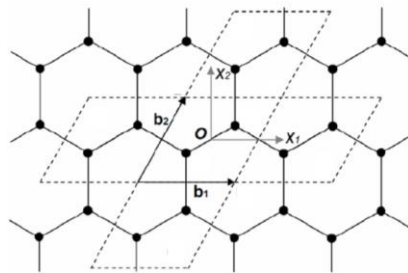
8.1.2 ACTIVIDAD CELDA UNITARIA

1. Hallar el área de la celda unitaria con $n = 6$ y $m = 3$
2. Que cantidad de hexágonos hay en la celda unitaria con $n = 6$ y $m = 3$
3. Demuestre que $N = \frac{2}{d_R} (n^2 + nm + m^2)$
4. Hallar el área de la celda unitaria con $n = 5$ y $m = 5$
5. Que cantidad de hexágonos hay en la celda unitaria con $n = 5$ y $m = 5$
6. Hallar el área de la celda unitaria con $n = 9$ y $m = 0$
7. Que cantidad de hexágonos hay en la celda unitaria con $n = 9$ y $m = 0$

CAPITULO 9

9.1 ESTRUCTURA CRISTALINA DEL GRAFENO

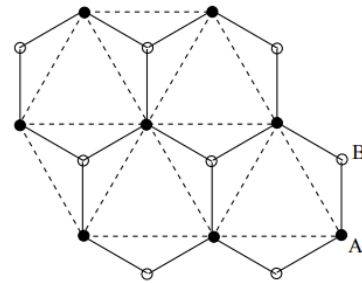
9.1.1 CELDA UNITARIA



La celda unitaria es el rombo que se encuentra en el centro.

Tomado de: Revista de Mecánica y Física de Sólidos

Figura 9.1



Tomado de :
http://young.physics.ucsc.edu/231/sols/graphene_question.pdf

Figura 9.2

La celda unitaria para el grafeno es un rombo como se observa en la figura 10. 1 El resultado es que dos átomos están contenidos por celda unidad (Zhou & Huang, 2008), en la figura 9.2.a es la separación entre los puntos negros o entre los puntos blancos en la Fig. 9.2 y estos no son vecinos más próximos. $a = \sqrt{3}a_c$ $a = 3 c c-$, donde a_{cc} sí es la distancia entre vecinos más próximos la cual es de 0.142nm

El producto punto o escalar entre dos vectores es uno si son ortogonales y cero si son paralelos, a sea:

$$\delta_{ij} = 0 \quad \text{si } i \neq j$$

(9.1)

$$\delta_{ij} = 1 \quad \text{si } i = j$$

(9.2)

Utilizando

$$a_i \cdot b_j = 2\pi\delta_{ij}$$

(9.3)

Aplicando a la red de grafeno ver figura 9.2, para un vector (4,2) se deduce:

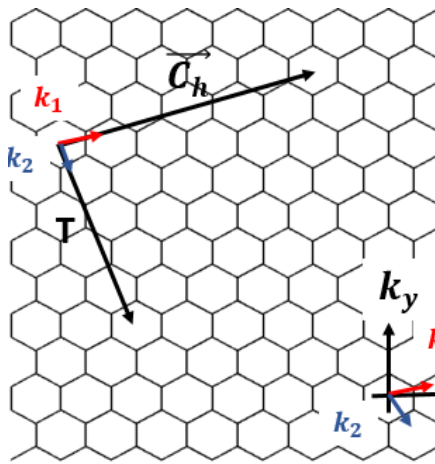


FIGURA 9.3

$$\vec{C}_h \cdot \vec{k}_1 = \vec{T} \cdot \vec{k}_2 = 2\pi$$

(9.4)

Y

$$\vec{C}_h \cdot \vec{k}_2 = \vec{T} \cdot \vec{k}_1 = 0$$

(9.5)

El vector \vec{k}_1 y \vec{k}_2 se puede escribir

$$\vec{k}_1 = \frac{-(t_2\vec{b}_1 - t_1\vec{b}_2)}{N}$$

(9.6)

$$\vec{k}_2 = \frac{m\vec{b}_1 - n\vec{b}_2}{N}$$

(9.7)

9.1.1 ACTIVIDAD ESTRUCTURA CRISTALINA GRAFENO

1. Los coeficientes del vector \vec{k}_1 son
2. Los coeficientes del vector \vec{k}_2 son
3. Cuando dos vectores son ortogonales su producto punto es
4. Cuando dos vectores son paralelos su producto punto es
5. La cantidad de átomos contenidos en una celda unitaria es
6. Completar las siguientes afirmaciones
7. Los vectores k_1 y \vec{T} son _____
8. Los vectores k_2 y \vec{C}_h son _____
9. Los vectores k_1 y \vec{C}_h son _____
10. Los vectores k_2 y \vec{T} son _____

CAPÍTULO 10

10.1 RED RECÍPROCA

10.1.1. ZONA DE BRILLOUIN

En matemáticas y en física del estado sólido, la primera zona de Brillouin es unívocamente definida por una celda primitiva de la red recíproca en el dominio de frecuencias. Se puede encontrar a través del mismo método como la celda de Wigner-Seitz en la red de Bravais. La importancia de la zona de Brillouin radica en la descripción de las ondas que se propagan en un medio periódico y que pueden ser descritas a partir de ondas de Bloch que son vectores de onda que se encuentran en esta zona, dentro de la zona de Brillouin. La primera zona de Brillouin es una construcción dentro de un espacio abstracto denominado espacio recíproco. Este espacio no alberga ondas como si fuera un espacio físico real.

Espacio real de los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2 en coordenadas cartesianas como lo vimos en capítulos anteriores son:

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

(10.1)

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

(10.2)

La red recíproca es un concepto usado en física y matemáticas para denotar a la transformada de Fourier de una red en el espacio real. Los nodos o puntos que conforman la red recíproca están constituidos por todas las combinaciones

lineales de una base vectorial en el espacio recíproco, también conocido en diversas aplicaciones como espacio de Fourier, espacio de momentos o espacio de fases. El espacio recíproco relaciona variables conjugadas y es un concepto fundamental para el análisis de procesos físicos en los que se produce una transferencia de momento. En cristalografía, los puntos de la red recíproca de la red de Bravais corresponden a las direcciones en las que se puede observar difracción por un cristal.

Sean \vec{a}_1 , \vec{a}_2 y \vec{a}_3 los vectores base de una red cristalina, tal que cualquier punto de la red se puede expresar como una combinación lineal de estos vectores. Los vectores base de la correspondiente red recíproca, se definen como:

$$\vec{b}_1 = 2 \cdot \pi \cdot \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (10.1)$$

$$\vec{b}_2 = 2 \cdot \pi \cdot \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (10.2)$$

$$\vec{b}_3 = 2 \cdot \pi \cdot \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (10.3)$$

Para construir el vector $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ de la red recíproca

De, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ donde $\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{a} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} + 0 \hat{k}$; $\vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{a} \hat{i} - \frac{1}{2} \hat{a} \hat{j}$ $\vec{a}_3 = 1 \hat{k}$

Hallando el vector recíproco $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ se realiza los productos cruz, punto y reemplazamos en las ecuaciones 10.1, 10.2 y 10.3

$$\vec{a}_1 \times \vec{a}_3 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} + 0 \hat{k} \right) \times (1 \hat{k})$$

$$\vec{a}_1 \times \vec{a}_3 = \begin{bmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} a & \frac{a}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \left(\frac{a}{2} \cdot 1 - 0 \cdot 0 \right) \hat{i} - \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \cdot 1 - 0 \cdot 0 \right) \hat{j} + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \cdot 0 - 0 \cdot \frac{a}{2} \right) \hat{k}$$

$$\vec{a}_1 \times \vec{a}_3 = \frac{a}{2} \hat{i} - \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j}$$

$$\begin{aligned} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 &= \begin{bmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} a & -\frac{a}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \left(-\frac{a}{2} \cdot 1 - 0 \cdot 0 \right) \hat{i} - \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \cdot 1 - 0 \cdot 0 \right) \hat{j} + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \cdot 0 - 0 \cdot -\frac{a}{2} \right) \hat{k} \end{aligned}$$

$$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = -\frac{a}{2} \hat{i} - \frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{j}$$

$$\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} \right) \cdot \left(-\frac{a}{2} \hat{i} - \frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{j} \right)$$

$$\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 + \frac{\sqrt{3} a^2}{4} = \frac{\sqrt{3} a^2}{2}$$

$$\text{Reemplazando en } \vec{b}_1 = 2 \cdot \pi \cdot \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_1 = 2 \cdot \pi \cdot \frac{\frac{a}{2} \hat{i} - \frac{a\sqrt{3}}{2} \hat{j}}{\frac{\sqrt{3} a^2}{2}}$$

O sea

$$\vec{b}_1 = \frac{4 \cdot \pi}{a\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2} \hat{i} - \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} \right)$$

(9.4)

Para b_2 hallando

$$\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = (1k) \times \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} + 0 \hat{k} \right)$$

$$\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} a & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} = (0 \cdot 0 - \frac{a}{2} \cdot 1) \hat{i} - (0 \cdot 0 - \frac{\sqrt{3}}{2} a \cdot 1) \hat{j} + (0 \cdot \frac{a}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot 0) \hat{k}$$

$$\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = -\frac{a}{2} a \hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{j}$$

Remplazando

$$\vec{b}_2 = 2 \cdot \pi \cdot \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{a_1(a_2 \times a_3)}$$

$$\vec{b}_2 = 2 \cdot \pi \cdot \frac{\left(-\frac{a}{2} a \hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{j} \right)}{\frac{\sqrt{3} a^2}{2}}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{4 \cdot \pi}{a\sqrt{3}} \cdot \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} \right)$$

Entonces los vectores recíprocos son

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2 \cdot \pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2 \cdot \pi}{a} \right) \quad (10.4)$$

$$\vec{b}_2 = \left(\frac{2 \cdot \pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2 \cdot \pi}{a} \right) \quad (10.5)$$

10.1.2 Actividad red reciproca

1).

$$\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2} \right)$$

Según la anterior coordenada dada a cuál vector corresponde:

a) \vec{a}_1

c) \vec{b}_2

b) \vec{a}_2

d) \vec{b}_1

2). $\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{a}{2} \right)$

Según la anterior coordenada dada a cuál vector corresponde

a) \vec{a}_1

b) \vec{a}_2

c) \vec{b}_2

d) \vec{b}_1

3) hallar \vec{b}_3

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

La importancia y el uso adecuado de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC) en el s. XXI ha tenido una gran relevancia en el aprendizaje autónomo y significativo, gracias a esto se puede llegar de forma más eficiente, sistemática y reestructurando el mejoramiento de la enseñanza desde niveles básicos permitiendo abordar temáticas como la nanotecnología. Con este recurso tecnológico se proyecta una implementación más acertada y asertiva de enseñanza de aplicaciones como el análisis vectorial, álgebra, cálculo, trigonometría, geometría que se pueden aplicar de forma pedagógica y didáctica a aplicaciones de actualidad como los nanotubos de carbono, permitiendo con esto mostrar a los estudiantes la gran utilidad, importancia y beneficio que dan estas herramientas matemáticas al desarrollo y avance, encaminados a proyectar nuestro país en la senda del desarrollo. Esto es una muestra y el comienzo de un gran esfuerzo que se pueden tener a niveles de la básica y la media, expectativas que sobrepasen y desarrollen competencias más completas que están siendo exigidas en este mundo cambiante, entrando de esta manera hacia un desarrollo más profundo en la física del micromundo.

La continuación de este proyecto es seguir creando en el tiempo aplicaciones de la física avanzada a diferentes competencias básicas y los estándares básicos de aprendizaje permitiendo mostrar que, si es posible abordar de forma práctica, didáctica y a la vez sencilla fundamentos y conceptos avanzados de física moderna, abriendo de esta forma mayores oportunidades de aprendizaje a los futuros profesionales que se interesan en la ciencia y en la ingeniería.

REFERENCIAS

- A. J., R. S., G. D., & M. D. (2011). *Raman Spectroscopy in Graphene Related Systems*. Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Recuperado el 2 de 6 de 2017
- Alcca, Q. F. (2005). *Magnitud del vector quiral*. Lima: Tesis digitales UNMSM. Obtenido de http://sisbib.unmsm.edu.pe/BibVirtual/monografias/Basic/alcca_qf/contenido.htm
- D. S., & J. S. (2009). *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*. New Jersey: Wiley. Recuperado el 23 de Mayo de 2017
- Dyson, & F. J. (Junio de 1956). Teoría General de las Interacciones Spin-Wave. *Servicio de resumen de Fisica SAO/ NASA ADS*, 5. Obtenido de https://translate.googleusercontent.com/translate_c?depth=1&hl=es&prev=search&rurl=translate.google.com.co&sl=en&sp=nmt4&u=http://adsabs.harvard.edu/abs/1956PhRv..102.1217D&usg=ALkJrhh0YiU4O4bU6v1Ql1VZTbo mRB2Gyg
- Kittel, C. (2013). *Introduction to Solid State Physics*. Jhon Wiley & Sons, Inc. Recuperado el 6 de 2017, de www.wiley.com/college/kittel
- M. M., & Jhon. (2008). *Estructuras y enlaces (Química orgánica)*. México: Cengage learnig.
- M. N. (2011). FULLERENOS. En M. Nazario, *SOBRE FULLERENOS, NANOTUBOS DE CARBONO Y GRAFENO* (pág. 118). Madrid. Recuperado el 2 de 6 de 2017, de <https://www.google.com.co/#q=sobre+fullerenos,+nanotubos+de+carbono+y+grafenos>

- Martín, N. (2011). GRAFENO. En N. Martín, *SOBRE FULLERENOS, NANOTUBOS DE CARBONO Y GRAFENO* (pág. 119). Madrid. Recuperado el 23 de 04 de 2016
- P. S., J. G., N. T., & J. T. (2014). *GUÍA DIDÁCTICA PARA LA ENSEÑANZA DE LA NANOTECNOLOGI EN EDUCACIÓN SECUNDARIA*. Madrid: CYTED. Recuperado el 1 de 6 de 2107, de http://www.icmm.csic.es/es/divulgacion/documentos/LIBRO_GUIA_DIDACTICA.pdf
- T. W., S. V., & T. A. (s.f.). *Universidad de estado San Jose*. Recuperado el 14 de 5 de 2017, de [applet-magic.com: http://www.sjsu.edu/faculty/watkins/brillouin.htm](http://www.sjsu.edu/faculty/watkins/brillouin.htm)
- Uchida, K., H. A., D. K., S. I., Z. Q., S. M., & E. S. (8 de Junio de 2015). Generation of spin currents by surface plasmon. *Nature Communications* , 1. Obtenido de <https://www.nature.com/articles/ncomms6910>
- Wikipedia. (1 de Enero de 2017). *Wikipedia, la enciclopedia libre*. Recuperado el 23 de Mayo de 2017, de <https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Polariton&oldid=757771980>
- Zhou, J., & Huang, R. (2008). *Journal of the Mechanics and Physics of Solids. Mechanics and Physics of Solids*, 56.

Red recíproca. (2016, 14 de marzo). *Wikipedia, La enciclopedia libre*. Fecha de consulta: 02:06, enero 22, 2018 desde https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Red_rec%C3%ADproca&oldid=89817112

Zona de Brillouin. (2017, 27 de agosto). *Wikipedia, La enciclopedia libre*. Fecha de consulta: 11:40, enero 22, 2018 desde https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Zona_de_Brillouin&oldid=101432232.