



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS E INGENIERÍAS

VIBRACIONES MECANICAS EN
ESTRUCTURAS TIPO ZIG ZAG Y
DESCANZABRAZO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

INGENIERO MECÁNICO

P R E S E N T A:

Edgar Gerardo Sotelo Parra

Asesor externo

Dr. Angel Marbel Martínez Argüello

Asesor interno

Mtro. Andrés Aguilar Negrete



Cuernavaca, Morelos a 14 de junio 2021

*Dedicado a,
mi abuela, Catalina, que a pesar de
que no está aquí en cuerpo, sé que en alma
nunca ha dejado de ver por mí y estar a mi
lado, sé que estas muy orgullosa,
gracias por todo abuela.*

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer a mis padres, Anabel y Octavio, por su invaluable apoyo, por los recursos brindados, por siempre creer en mí y en que podía alcanzar este logro. Por siempre apoyarme a lo largo de este duro camino.

Infinitas gracias al Dr. Ángel Martínez por todo el apoyo en la elaboración de este trabajo, que, sin él, el camino habría sido, por mucho, más complicado. Por todas aquellas veces en las que sentí que no pude más, estuvo ahí para apoyarme, mil gracias por todo.

Al Dr. Rafael Méndez por permitirme ser parte de este proyecto de investigación y brindarme el recurso para la realización de este proyecto.

A Yazareth, que sin importar lo que nos depare el destino, estaré infinitamente agradecido por todo el apoyo brindado durante la elaboración de este proyecto. Gracias por siempre motivarme, por nunca dejar de creer en mí y por haber sido ese pilar tan fuerte.

Al grupo de investigación, GOMA, por sus comentarios y aportaciones para la preparación de mi defensa.

Gracias al proyecto PAPIIT-IN109318 de la DGAPA UNAM y también al proyecto 284096 de CONACYT ciencia básica por los recursos brindados, y al Centro Internacional de Ciencias A.C. por las facilidades en sus instalaciones.

Contenido

Resumen	- 9 -
1. Introducción	11
1.1 La importancia del carbono	11
1.1.1 Alótropos del carbono.....	11
1.2 El grafeno, su descubrimiento e importancia tecnológica	12
1.2.1 Cintas de grafeno	14
1.3 Descripción del grafeno y de las cintas de grafeno.....	15
1.4 Sistemas ondulatorios artificiales	16
1.5 Sistemas mecánicos: una herramienta auxiliar	18
1.6 Organización de la tesis	20
2. Revisión teórica	23
2.1 Estructura del grafeno y de las cintas de grafeno	23
2.2 La ecuación de Schrödinger.....	25
2.3 Modelo de amarre fuerte.....	26
2.4 Modelo de amarre fuerte para las cintas de grafeno	28
2.4.1 Propiedades electrónicas de cintas armchair.....	29
2.4.2 Propiedades electrónicas de cintas zigzag	31
2.5 Modelo de amarre fuerte para ondas mecánicas.....	32
3. Diseño de cintas artificiales mecánicas.....	35
3.1 Elementos básicos del modelo de amarre fuerte mecánico	35
3.1.1 Estructuras localmente periódicas.....	36

3.1.2	Resonador	40
3.2	Resonador conectado a tres estructuras localmente periódicas	42
3.3	Dos resonadores conectados mediante un sistema localmente periódico	46
3.4	Cintas artificiales de grafeno	50
3.4.1	Celda unitaria de una cinta armchair	51
3.4.2	Celda unitaria de una cinta zigzag	51
4.	Resultados y discusión.....	54
4.1	Propiedades electrónicas de cintas mecánicas armchair	54
4.2	Propiedades electrónicas de cintas mecánicas zigzag.....	57
5.	Conclusiones	61
	Referencias.....	63

Resumen

En esta tesis, a través del método de elementos finitos, diseñamos sistemas artificiales mecánicos análogos a cintas de grafeno con orillas tipo zigzag y descansabrazos, también conocidos como armchair en la literatura científica. Nuestras cintas de grafeno artificiales están compuestas por resonadores, o placas de aluminio con forma hexagonal, conectados entre sí mediante sistemas localmente periódicos, también de aluminio. La estructura formada por estos dos componentes está hecha en un arreglo hexagonal tipo panal de abejas.

Las estructuras localmente periódicas cuentan con la propiedad de tener estructuras de bandas con bandas de conducción, en las que es posible que se propague una vibración, y bandas prohibidas, en las que no es posible que se propague. La estructura de bandas permite que la amplitud de onda de las vibraciones quede atrapada en los resonadores y decaiga de manera exponencial fuera de este. Adicionalmente, la amplitud de onda de las vibraciones de resonadores cercanos se acoplan de manera evanescente. Esto establece el régimen de amarre fuerte para ondas mecánicas, característica sobresaliente de nuestros sistemas mecánicos. Consideramos la estructura electrónica de bandas y la densidad de estados de las cintas zigzag y armchair. Además, diseñamos las cintas mecánicas en un rango de frecuencias apropiado para que puedan ser medidos experimentalmente.

Nuestros resultados muestran el comportamiento conductor y semiconductor de las cintas armchair, propiedad que es función del ancho de la cinta en la dirección transversal. Para el caso de las cintas zigzag, logramos obtener su comportamiento conductor con la aparición de estados de orilla localizados, los cuales están ausentes en las cintas armchair. Nuestros resultados muestran la emulación exitosa del modelo de amarre fuerte entre primeros vecinos para ondas mecánicas. Este logro permite estudiar las propiedades electrónicas de otros sistemas, descritos por sus respectivos modelos de amarre fuerte, análogos de sistemas que se encuentran a nivel nanoscópico.

1. Introducción

1.1 La importancia del carbono

El carbono es el sexto elemento químico de la tabla periódica y pertenece al grupo 14 periodo 2 de la misma. Tiene un peso molecular en su estado más estable de 12 g/mol (Chang, 2010). Este importante elemento de la tabla periódica juega un rol fundamental en la naturaleza ya que es la base y materia prima de la química orgánica. Gracias a la flexibilidad y la facilidad que tiene para generar distintos tipos de enlaces, el carbono permite formar distintos tipos de compuestos con una variedad de estructuras de diferentes dimensiones y propiedades físicas (Castro Neto, Guinea, Peres, Novoselov, & Geim, 2009). Ejemplos de estos compuestos son el diamante, que es un material de transparente a opaco, aislante y el más duro de la naturaleza del que se tiene conocimiento, el grafito (ambos tridimensionales) que es un material lubricante, flexible y buen conductor del calor y la electricidad. La razón por la cual tanto el diamante como el grafito tienen diferentes propiedades físicas es debido al arreglo y enlaces químicos de los átomos del carbono dentro de la estructura atómica de ambos materiales. Otros ejemplos de estos materiales a base de carbono fueron descubiertos hace unas cuantas décadas como son los fullerenos (cero dimensionales) y nanotubos de carbono (unidimensionales). Y hasta hace apenas unos años, fue descubierto un alótropo bidimensional del carbono conocido como grafeno (Katsnelson, 2007).

1.1.1 Alótropos del carbono.

Como ya mencionamos, el carbono es capaz de formar diferentes estructuras, cada uno con diferentes propiedades físicas que los caracteriza y por ende es importante mencionarlos. A esta propiedad de algunos elementos químicos, como el carbono, de presentarse en diferentes formas, en el mismo estado físico, se le conoce como alotropía

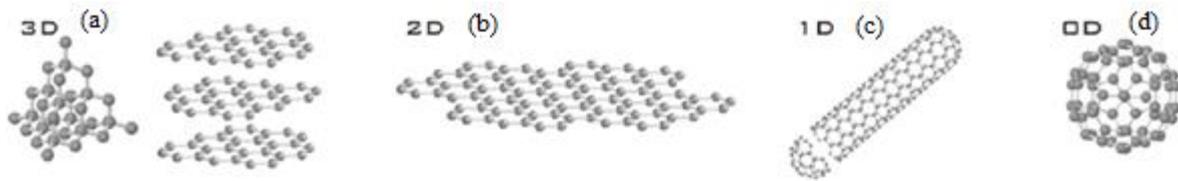


Figura 1.1 (a) Grafito de dimensión tres, (b) grafeno de dimensión dos, (c) nanotubo de dimensión uno y (d) fullereno de dimensión cero. Figura tomada y modificada de la referencia (Katsnelson, 2007)

(Chang, 2010). Los fullerenos, de dimensión cero, son alótropos de carbono en donde sus átomos se encuentran ordenados en un arreglo esférico. Los nanotubos de carbono, de dimensión uno, son otros alótropos de carbono en donde los átomos se encuentran ordenados en un arreglo con forma de cilindro hueco. En el grafeno, de dimensión dos, los átomos de carbono se encuentran ordenados en un arreglo hexagonal tipo “panal de abejas”. El grafito, de dimensión tres, está compuesto por numerosas capas de grafeno unidas entre sí mediante fuerzas de Van der Waals.

El grafeno es de gran importancia dadas sus propiedades físicas y es considerado como el bloque básico de construcción de los demás alótropos (Castro Neto, Guinea, Peres, Novoselov, & Geim, 2009). El apilamiento de capas de grafeno da lugar al grafito, cilindros enrollados de grafeno dan lugar a los nanotubos de carbono y la envoltura de una capa de grafeno a la cual se le adicionan anillos con cinco átomos de carbono, los cuales actúan como defectos pentagonales en la red, da lugar a los fullerenos. En la figura 1.1 se muestra cómo están formados estos alótropos.

1.2 El grafeno, su descubrimiento e importancia tecnológica

Desde hace más de 70 años el grafeno ya se había estudiado de manera teórica (Wallace, 1947), aunque se presumía que no se podía obtener de manera natural en estado libre. Científicos de la época argumentaban que los cristales 2D eran termodinámicamente inestables y no podían existir (Saito, Dresselhaus, & Dresselhaus, 1998), por lo que se

tomaba como un material “académico”. No fue sino hasta la primera década de los 2000’s que fue a través de experimentos que se pudo obtener por primera vez una muestra de grafeno. Estas láminas de grafeno fueron preparadas mediante exfoliación mecánica, pelado repetido, de pequeñas muestras de grafito pirolítico altamente orientado, es decir, que las capas de grafeno que componían al grafito tenían una orientación angular entre cada una menor a 1 grado (1°). Se comprobó que esta técnica es altamente confiable ya que permite obtener películas de grafeno de hasta 10 micrómetros (μm) de tamaño, mientras que las películas más grandes alcanzan tamaños de hasta 100 μm y pueden percibirse a simple vista (Novoselov, y otros, 2004). Cabe mencionar que este descubrimiento fue merecedor del Premio Nobel de Física en el año 2010. Desde entonces este material despertó un enorme interés en diferentes campos de la ciencia tales como la física, la química y la ciencia de materiales.

En los últimos años se han presentado numerosos avances en la investigación sobre el grafeno, así como un avance significativo en la producción en masa de este material. Este alótropo de carbono de un átomo de espesor combina de una forma única e impresionante una resistencia mecánica extrema, conductividades electrónicas y térmicas altas, impermeabilidad a los gases, así como muchas otras propiedades, todo lo cual lo hace muy atractivo para numerosas aplicaciones (Novoselov, y otros, 2012), algunas de ellas se mencionan a continuación:

- fabricación de pantallas táctiles flexibles, de sensores de alta sensibilidad, disipadores de calor y de nuevos materiales compuestos,
- aplicación en la desalinización y depuración de aguas, y en la elaboración de recubrimientos protectores contra la corrosión,
- almacenamiento de energía: supercondensadores y baterías,
- fabricación de celdas solares fotovoltaicas,

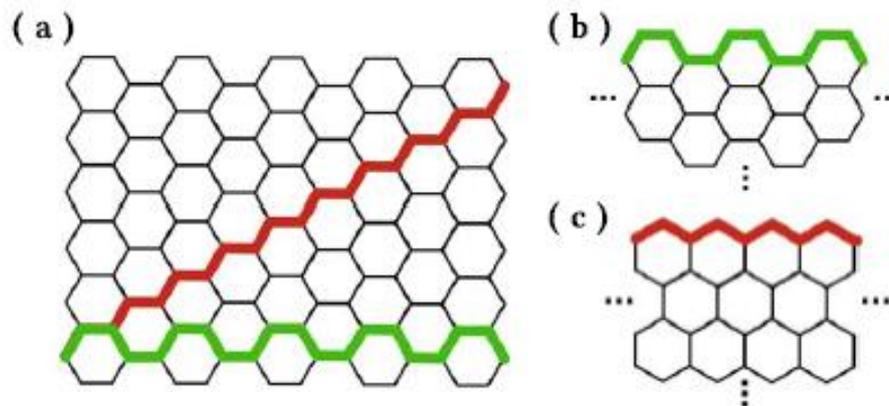


Figura 1.2 (a) Capa de grafeno marcando la orilla zigzag (rojo) y armchair (verde) con un ángulo de 30° entre ellos, (b) cinta de orilla armchair y (c) cinta de orilla zigzag. Figura tomada de la referencia (Dubois, Zanolli, Declerck, & Charlier, 2009)

- fabricación de dispositivos nanoelectrónicos con potencial para reemplazar al silicio.

De acuerdo con la lista que se presenta de las aplicaciones y la importancia tecnológica del grafeno, en particular, en la nanoelectrónica el grafeno es reconocido como uno de los materiales clave para la realización de dispositivos electrónicos de próxima generación.

1.2.1 Cintas de grafeno

La ausencia de una brecha de energía entre las bandas de conducción y la banda valencia en el grafeno lo limita para aplicaciones en dispositivos electrónicos, además de que se requieren tamaños reducidos del material. Una hoja de grafeno de cierto ancho y suficiente longitud da lugar a una cinta cuasi unidimensional. Existen dos tipos de cintas de grafeno la cual puede tener dos posibles tipos de bordes u orillas, zigzag y descansabrazos, este último mejor conocido como armchair en la literatura científica. Estos dos tipos de orillas tienen una diferencia de 30° en su orientación (Figura 1.2), esto con respecto a una capa de grafeno. Cada una de estas cintas posee propiedades electrónicas que las hacen únicas. Por ejemplo, las cintas con orilla zigzag tienen la propiedad de ser metálicas y un aspecto importante que

lo distingue es la presencia de estados localizados en las orillas de la cinta. Las cintas con orillas tipo armchair pueden ser conductoras o semiconductoras, es decir, metálicas o no metálicas, esto depende del ancho de las cintas. Esto lo hace un candidato ideal para la fabricación de transistores, que son bloques básicos de construcción de los microprocesadores, a base de grafeno. (Wakabayashi, Sasaki, Nakanishi, & Enoki, 2010).

1.3 Descripción del grafeno y de las cintas de grafeno

En la literatura científica existen diferentes modelos teóricos con los cuales se describe el grafeno y las cintas de grafeno, algunos de ellos son: la teoría del funcional de la densidad o DFT por sus siglas en inglés (Density Functional Theory), y el modelo de amarre fuerte, mejor conocido como *tight-binding*, entre otros (Cuevas & Scheer, 2010), (Saito, Dresselhaus, & Dresselhaus, 1998)

El DFT es un método numérico que resuelve la ecuación de Schrödinger para n cuerpos que interactúan entre ellos. Para sistemas moleculares muy grandes este método se vuelve computacionalmente muy demandante. Por otro lado, el modelo de amarre fuerte es otro modelo alternativo que captura la información más esencial de las propiedades físicas de materiales a base de carbono, en particular del grafeno y de las de cintas de grafeno (Cuevas & Scheer, 2010). Este modelo toma en cuenta efectos de interferencia además de efectos atómicos y de estructura electrónica. En el modelo de amarre fuerte los electrones son considerados como ondas electrónicas que están fuertemente amarrados en sus sitios y cuya amplitud decae exponencialmente fuera de ellos, además se acoplan débilmente con sus vecinos cercanos. En este modelo, la función de onda de un sistema de átomos interactuantes se escribe en términos de las funciones de onda de los átomos aislados, más el acoplamiento entre estos que normalmente se considera a primeros vecinos.

Recientemente, se ha mostrado que el modelo de amarre fuerte se puede aplicar en sistemas ondulatorios clásicos, mediante el uso de fibras ópticas (Kondakci, Abouraddy, & Saleh, 2015), en sistemas de microondas mediante el uso de resonadores dieléctricos (Bellec, Kuhl, Montambaux, & Mortessagne, 2013) y en sistemas acústicos (Torrent & Sánchez-Dehesa, 2012) y elásticos (Torrent, Mayou, & Sánchez-Dehesa, 2013) con los cuáles se han construido sistemas artificiales análogos del grafeno. Mas aún, este modelo también se ha implementado en sistemas mecánicos (Ramírez, Flores, Báez, Sadurní, & Méndez, 2020). Para establecer el régimen de amarre fuerte en sistemas mecánicos, se requiere de un resonador elástico, que su amplitud de onda este bien localizada en la región del resonador y que decaiga exponencialmente fuera de ésta. Esto representa un sitio atómico artificial mecánico. Además, para establecer el régimen de amarre fuerte a primeros vecinos, la amplitud de onda del sitio atómico debe ser capaz de acoplarse de forma evanescente con la amplitud de onda de los sitios atómicos más cercanos. Contario a la emulación de amarre fuerte en sistemas de microondas, en donde los resonadores dieléctricos radian energía electromagnética hacia otros resonadores, produciendo interacción a segundos o terceros vecinos, la emulación de amarre fuerte en sistemas mecánicos ofrece un alto control sobre la interacción entre primeros vecinos el cual en muchos casos es la interacción más dominante.

1.4 Sistemas ondulatorios artificiales

La implementación exitosa del modelo de amarre fuerte en sistemas ondulatorios clásicos ha permitido emular a un sistema artificial análogo a los que se encuentran en escala nanométrica.

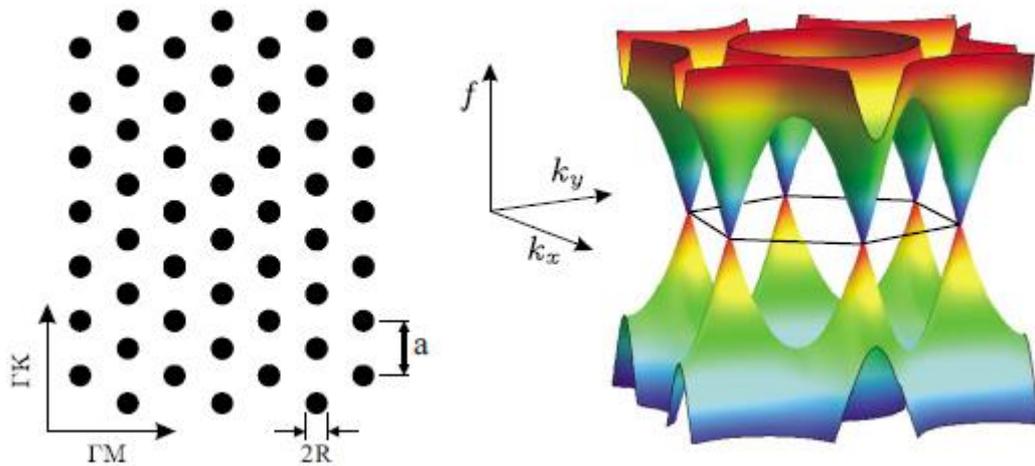


Figura 1.3 (Izquierda) Arreglo hexagonal, tipo panal de abejas, de resonadores dieléctricos, representados con círculos negros de radio R . La distancia entre resonadores cercanos es a . (Derecha) Estructura de bandas del grafeno artificial de la figura de la izquierda. Para más detalles ver la referencia (Bittner, y otros, 2010)

Estos sistemas en particular son de gran relevancia ya que ofrecen una herramienta útil para estudiar y comprobar experimentalmente fenómenos físicos emergentes que requieren de una precisión a escala atómica de las estructuras, que en la actualidad son muy difíciles de obtener a nivel microscópico y nanoscópico. En sistemas de microondas (Kuhl, Barkhofen, Tudorovskiy, Stöckmann, & Hossain, 2010) se han construido sistemas análogos del grafeno. Estos sistemas se construyen con pequeños discos dieléctricos (resonadores), que juegan el papel de sitios atómicos, en un arreglo hexagonal tipo panal de abejas y se encuentran cubiertas entre dos placas metálicas. En este sistema, las resonancias de los discos se acoplan débilmente entre sí estableciendo el régimen de amarre fuerte en sistemas de microondas, donde además se tiene interacción débil a segundos y terceros resonadores vecinos. Este sistema reproduce las características más fundamentales del grafeno, tales como su densidad de estados y los llamados conos de Dirac.

Las bandas de conducción y valencia del grafeno forman conos (conos de Dirac) que se tocan en un punto conocido como punto de Dirac (Figura 1.3). Este nombre se le atribuye dado que la relación de dispersión alrededor de estos puntos tiene un comportamiento lineal y

esta descrita por la ecuación de Dirac de una partícula sin masa (Kuhl, Barkhofen, Tudorovskiy, Stöckmann, & Hossain, 2010).

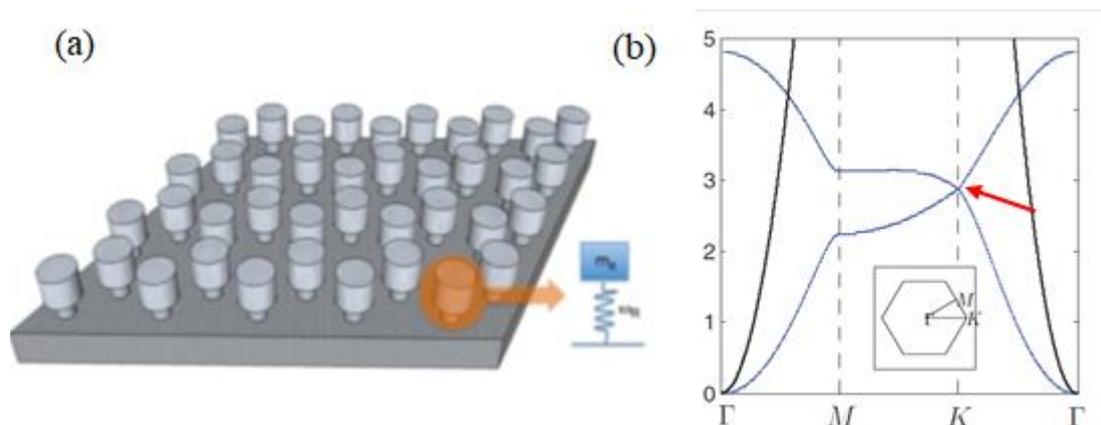


Figura 1.4 (a) Sistema masa-resorte análogo del grafeno. Los resonadores se encuentran en un arreglo hexagonal. (b) Estructura de bandas obtenida del correspondiente sistema masa-resorte. Se indica con flecha roja el punto de Dirac. Figuras tomadas y modificadas de la referencia (Torrent, Mayou, & Sánchez-Dehesa, *Elastic analog of graphene: Dirac cones and edge states for flexural waves in thin plates*, 2013).

El modelo de amarre fuerte también se ha emulado en un sistema masa-resorte, análogo del grafeno, en un arreglo hexagonal. (Torrent, Mayou, & Sánchez-Dehesa, *Elastic analog of graphene: Dirac cones and edge states for flexural waves in thin plates*, 2013). Este sistema se compone de resonadores masa-resorte acoplados a una placa elástica como se muestra en la Figura 1.4 (a), el cuál a través de estudios de propagación de ondas flexionales, reproduce las características típicas del grafeno, ver Figura 1.4 (b), y de las cintas de grafeno con orilla tipo zigzag.

1.5 Sistemas mecánicos: una herramienta auxiliar

Durante los últimos años se ha mostrado que los sistemas mecánicos son una herramienta útil para verificar predicciones teóricas de sistemas cuánticos, que son difíciles de obtener a nivel microscópico y además resultan ser mucho más accesibles. Por ejemplo, en una barra de aluminio con una muesca, como se muestra en la Figura 1.5 (a), se ha logrado

estudiar la distribución de las resonancias debidas a ondas torsionales en una cavidad unidimensional. Esta distribución es la misma que obedecen las resonancias de una cavidad unidimensional cuántica (Martínez-Argüello, Martínez-Mares, Cobián-Suarez, Báez, & Méndez-Sanchez, 2015). También se ha demostrado la universalidad de la transmisión de ondas flexionales a través en una placa de aluminio con la forma de medio billar de Sinai no simétrico, como la que muestra en la Figura 1.5 (b), (Flores-Olmedo, y otros, 2016). Mas aún, recientemente fue construido un sistema mecánico de aluminio formado por resonadores elásticos acoplados entre sí por medio de barras localmente periódicas, como el que se muestra en la Figura 1.6, que emula un cristal unidimensional cuántico finito y que obedece el modelo de amarre fuerte de sistemas cuánticos (Ramírez, Flores, Báez, Sadurní, & Méndez, 2020). Contrario al modelo de amarre fuerte construido en sistemas de microondas en donde no se tiene un control sobre los acoplamientos entre primeros, segundos y hasta terceros vecinos, el modelo de amarre fuerte en sistemas mecánicos brinda un alto control sobre el acoplamiento exclusivo entre primeros vecinos.

Debido al interés e importancia de los sistemas artificiales, dado el alto control sobre sus estructuras y geometrías, en esta tesis nuestro objetivo es estudiar, diseñar y construir sistemas mecánicos análogos de cintas de grafeno con orillas tipo zigzag y armchair que reproduzcan sus principales propiedades electrónicas; es decir, la propiedad de conductor con estados localizados en las orillas para las cintas zigzag, y la propiedad de conductor y/o de semiconductor para las cintas armchair de diferentes anchos.

Es importante enfatizar que el diseño y la construcción de estos sistemas artificiales mecánicos representan una nueva aplicación de las vibraciones mecánicas. Esta aplicación consiste en la manipulación de las vibraciones para reproducir, o emular, las principales propiedades de sistemas de interés, en este caso, el de las principales propiedades electrónicas de las cintas de grafeno.

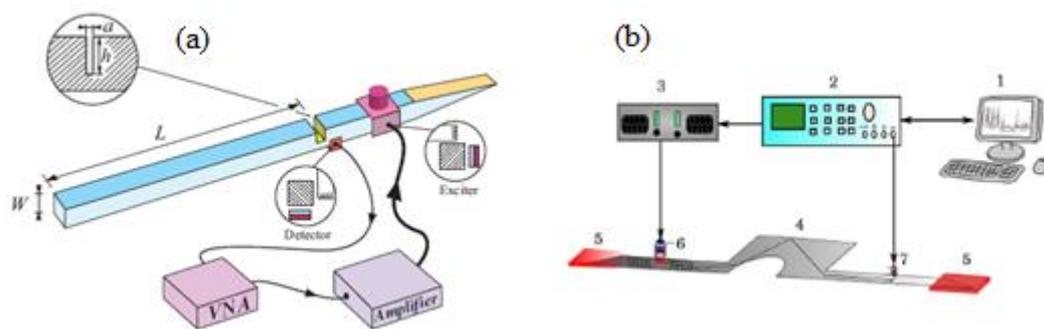


Figura 1.5 Sistemas mecánicos auxiliares. (a) Barra de aluminio con una muesca que emula la dispersión de ondas de una cavidad cuántica unidimensional. Figura tomada de la referencia (Martínez-Argüello, Martínez-Mares, Cobián-Suarez, Báez, & Méndez-Sanchez, 2015). (b) Placa de aluminio con forma de medio billar de Sinai no simétrico para el estudio del transporte coherente de una cavidad caótica (Flores-Olmedo, y otros, 2016). Mas detalles se encuentran en las referencias citadas.

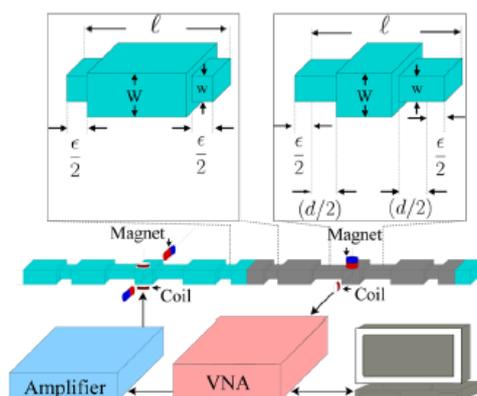


Figura 1.6 Sistema mecánico auxiliar construido por resonadores elásticos acoplados por medio de barras localmente periódicas. Esto emula un cristal unidimensional cuántico finito el cuál obedece el modelo de amarre fuerte para sistemas cuánticos. Figura tomada y modificada de la referencia (Ramírez, Flores, Báez, Sadurní, & Méndez, 2020).

1.6 Organización de la tesis

A continuación, presentamos la organización de esta tesis. En el siguiente capítulo presentamos una descripción de la estructura hexagonal del grafeno y de las cintas de grafeno. También presentamos la ecuación de Schrödinger que describe la dinámica de los electrones en sistemas microscópicos y el modelo de amarre fuerte. Esto con el propósito de describir las propiedades electrónicas de las cintas de grafeno. Adicionalmente, discutimos el

modelo de amarre fuerte para ondas mecánicas que usaremos para construir nuestras cintas artificiales.

En el capítulo tres analizamos los elementos básicos que constituyen el modelo de amarre fuerte para sistemas mecánicos. Esto, para obtener los parámetros óptimos de diseño que nos ayuden a emular el modelo de amarre fuerte. Los diseños se realizan con el uso del software de elementos finitos, *COMSOL Multiphysics*.

En el capítulo cuatro presentamos los resultados obtenidos de las cintas armchair y zigzag de diferentes anchos. Mostramos sus propiedades electrónicas las cuales son las análogas de las propiedades de las cintas de grafeno. Además, mostramos algunos ejemplos de los modos de vibración de ambas cintas armchair y zigzag de tamaño finito. Finalmente, en el capítulo cinco discutimos las conclusiones de esta tesis.

2. Revisión teórica

En este capítulo presentamos una descripción del origen de la estructura hexagonal del grafeno y de las cintas de grafeno. Esta estructura se origina de la hibridación sp^2 de los átomos de carbono con los átomos de hidrógeno. En esta hibridación los orbitales relevante para la descripción de las propiedades electrónicas son los orbitales π . Posteriormente, presentamos la ecuación de Schrödinger que describe la dinámica de los electrones en sistemas microscópicos, y que se reduce a una ecuación de eigenvalores. Después presentamos el modelo de amarre fuerte para sistemas compuestos de un conjunto de átomos y para sistemas periódicos, con el propósito de describir las propiedades electrónicas de las cintas de grafeno. Finalmente discutimos el modelo de amarre fuerte para ondas mecánicas que usaremos para construir nuestras cintas artificiales.

2.1 Estructura del grafeno y de las cintas de grafeno

El grafeno y las cintas de grafeno son materiales semimetálicos bidimensionales y unidimensionales respectivamente, compuestos de átomos de carbono dispuestos de dos redes triangulares inter penetradas (Castro Neto, Guinea, Peres, Novoselov, & Geim, 2009). Esta estructura es debida a la hibridación sp^2 . Esto es, el átomo de carbono que tiene un número atómico seis, es decir, tiene seis electrones, posee una configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$. Los electrones que se encuentran en la capa $1s$ están fuertemente enlazados al núcleo atómico. Los cuatro electrones restantes, conocidos como electrones de valencia, encargados de formar enlaces químicos, ocupan las capas $2s$ y $2p$. Debido a que la diferencia energética entre las capas $2s$ y $2p$ es lo suficientemente pequeña, sus orbitales se pueden combinar de diferentes maneras. A la combinación de los orbitales $2s$ y $2p$ es a lo que se le conoce como hibridación sp^n . Desde el punto de vista matemático, la hibridación sp^n se entiende como la

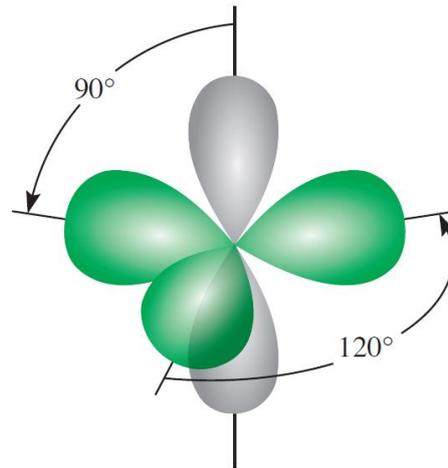


Figura 2.1 Hibridación sp^2 de los átomos de carbono. En una red hexagonal tipo panal de abeja, como el grafeno o las cintas de grafeno, cada átomo de carbono tiene tres orbitales sp^2 (verde), con un ángulo de 120° entre ellos, los cuales forman los enlaces σ con otros átomos de carbono, y una orbital π (gris) perpendicular al plano formado por los orbitales sp^2 . (Chang, 2010)

combinación lineal de un electrón en el orbital $2s$ con n electrones del orbital $2p$, donde n es igual a 1, 2 o 3, y que da como resultado $n + 1$ enlaces σ y $3 - n$ orbitales π . Los enlaces σ son los responsables de producir la estructura de la red y los orbitales π determinan las propiedades electrónicas o de conducción.

En particular, en la hibridación sp^2 un electrón en el orbital $2s$ se combina con dos electrones del orbital $2p$ dando como resultado tres enlaces σ , los cuales se encuentran en el plano de los átomos de carbono y a un ángulo de 120° entre ellos, y un electrón en el orbital π ($2p_z$) el cual queda libre y esta perpendicular al plano, como se muestra en la Figura 2.1. Así, en el grafeno y en las cintas de grafeno cada átomo de carbono se enlaza a tres átomos de carbono cercanos mediante tres enlaces σ , formando una estructura hexagonal con una red tipo panal de abejas. El cuarto electrón en el orbital π de cada átomo de carbono se enlaza con el de los otros átomos de carbono formando enlaces π . Esto da como resultado electrones deslocalizados los cuales no pertenecen a un átomo en particular, si no a un grupo de átomos, y son los responsables de las propiedades electrónicas o de conducción en el grafeno y las cintas de grafeno.

2.2 La ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger fue desarrollada por el físico Erwin Schrödinger en 1925 y describe la dinámica de la función de onda electrónica de un sistema cuántico. La forma general de la ecuación de Schrödinger es la siguiente

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H \psi(\mathbf{r}, t), \dots \dots \dots (1)$$

donde i es la unidad imaginaria, \hbar es la constante de Planck en unidades de 2π , $\frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t)$ es la derivada parcial de la función de onda del sistema, $\psi(\mathbf{r}, t)$, con respecto al tiempo. Esta contiene toda la información que es posible obtener sobre el sistema cuántico. H es el operador hamiltoniano, el cuál caracteriza la energía total del sistema de interés y está dada por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t). \dots \dots \dots (2)$$

donde m es la masa del electrón, ∇^2 es el operador Laplaciano, y $V(\mathbf{r}, t)$ es el operador que da la energía potencial del sistema. Podemos decir entonces que la energía total del sistema es igual a la suma de la energía cinética, $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$, más la energía potencial, $V(\mathbf{r}, t)$. Para el caso en el que el hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo, la dependencia espacial y temporal de la ecuación (1) se puede separar mediante el uso del ansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}, \dots \dots \dots (3)$$

donde la función de onda $\psi(\mathbf{r})$ satisface la llamada ecuación de Schrödinger estacionaria,

$$H \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}). \dots \dots \dots (4)$$

Esta última ecuación es una ecuación de eigenvalores cuya solución da los eigenvalores de la energía E y los eigenestados asociados a esos eigenvalores. Por lo tanto, para estudiar un sistema de interés solo necesitamos construir su hamiltoniano H , y resolver la ecuación (4).

Así en esta tesis, se requiere construir el hamiltoniano que describa las cintas de grafeno, para esto se utiliza el modelo de amarre fuerte.

2.3 Modelo de amarre fuerte

Desde el punto de vista teórico, un aspecto notable de sistemas a base de carbono, como los fulerenos, el grafeno y las cintas de grafeno, es que sus principales propiedades electrónicas se pueden estudiar por medio del llamado modelo de amarre fuerte. En este modelo la función de onda de un sistema de átomos interactuantes se escribe en términos de las funciones de onda de átomos aislados, donde para cada átomo se considera solo un orbital. Esto es

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_m c_m \phi_m(\mathbf{r}) \dots \dots \dots (5)$$

donde c_m son los coeficientes de la expansión y la base de funciones $\phi_m(\mathbf{r})$ representa la base de orbitales atómicos localizados. Esto es en esencia el método conocido como Combinación Lineal de Orbitales Atómicos o LCAO por sus siglas en inglés.

Sustituyendo la ecuación (5) en la ecuación de Schrödinger, ecuación (4), obtenemos el siguiente conjunto de ecuaciones para c_m . Esto conduce al siguiente conjunto de ecuaciones para determinar los coeficientes

$$\sum_m [H_{nm} - ES_{nm}] c_m = 0 \dots \dots \dots (7)$$

donde E es la energía,

$$H_{nm} = \int \phi_n^*(\mathbf{r}) H \phi_m(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \dots \dots \dots (8)$$

y

$$S_{nm} = \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \dots \dots \dots (9)$$

es el traslape entre los orbitales de los sitios n y m . Notemos que los orbitales localizados de los diferentes sitios pueden ser ortonormales, ver ecuación (9), en cuyo caso $S_{nm} = \delta_{nm}$,

donde δ_{nm} es la delta de Kronecker ($\delta_{nm} = 1$ si $n = m$ y $\delta_{nm} = 0$ si $n \neq m$). La ecuación (7) tiene soluciones no triviales si

$$\det(H - ES) = 0 \dots \dots \dots (10)$$

Las soluciones de esta última ecuación, conocida como ecuación secular, dan como resultado los eigenvalores o niveles de energía y las eigenfunciones asociados a esos eigenvalores.

Para el caso de sistemas periódicos, como es el caso de las cintas de grafeno, cualquier celda unitaria, unidad básica de repetición que forma una estructura periódica completa, se conecta a sus vecinos cercanos a través del hamiltoniano H , ver la ecuación (7), y c_m representa la función de onda en esa celda unitaria. En este caso el conjunto de ecuaciones (7) se puede resolver mediante el uso del teorema de Bloch¹

$$c_m = \psi_0 \exp(ik \cdot r_m), \dots \dots \dots (11)$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda de Bloch. Si se sustituye la ecuación (11) en la ecuación (7) obtenemos

$$H(\mathbf{k}) \psi_0 = E \psi_0, \dots \dots \dots (12)$$

donde

$$H(\mathbf{k}) = \sum_m H_{nm} \exp(ik \cdot (r_m - r_n)), \dots \dots \dots (13)$$

que es independiente de cualquier celda unitaria que se utilice para evaluar la suma. En la ecuación (13) la suma sobre m corre sobre todas las celdas unitarias vecinas con las cuales las celdas unitarias n tiene traslape, es decir, para las celdas en las cuales H_{nm} es distinto de cero. Finalmente, la estructura de bandas del sistema periódico de interés se obtiene diagonalizando el hamiltoniano dado por la ecuación (13) para cada valor de \mathbf{k} . En la

¹ La ecuación (11) corresponde con la versión discreta del teorema de Bloch. Este teorema establece que la función de onda electrónica en un medio periódico viene dada por $\psi_k(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r})$ donde u_k es una función que contiene la información de la periodicidad del sistema.

siguiente sección discutimos el hamiltoniano H_{nm} que describen las celdas unitarias de las cintas de grafeno.

2.4 Modelo de amarre fuerte para las cintas de grafeno

Existen dos tipos de orillas en las cintas de grafeno, zigzag y armchair. Estas dos orillas tienen una diferencia de 30° en su orientación con respecto a una capa de grafeno. Las propiedades de las cintas de grafeno son altamente sensibles al ancho y la geometría de sus orillas. Esto es debido al número de átomos confinados en la dirección transversal de la cinta.

Como mencionamos en la sección 1.3, las propiedades electrónicas de estas cintas se pueden estudiar mediante el modelo de amarre fuerte. Para sistemas moleculares formados de átomos de una sola especie, una primera aproximación es considerar que la energía de los sitios atómicos, ε , son iguales, es decir $H_{nn} = \varepsilon$. Una segunda aproximación es considerar que los electrones solo pueden saltar a sus sitios vecinos cercanos, $\langle n, m \rangle$, lo cual implica que $H_{\langle n, m \rangle} = -\gamma$, donde $\gamma > 0$ es la energía de salto del electrón del sitio n al sitio m . En el modelo de amarre fuerte también se pueden considerar interacciones de largo alcance. Sin embargo, estas interacciones tienen energías muy pequeñas, típicamente decaen exponencialmente como función de la distancia.

En las cintas de grafeno, el vector de onda \mathbf{k} , ver ecuación (12), es continuo en la dirección longitudinal (longitud infinita), mientras que en la dirección transversal está cuantizada (ancho finito). Así, la estructura de bandas de ambas cintas consiste en un conjunto de relaciones de dispersión unidimensionales, las cuales se pueden obtener mediante la diagonalización del hamiltoniano (13) con H_{nm} dado por el modelo de amarre fuerte descrito en esta sección.

2.4.1 Propiedades electrónicas de cintas armchair

Para estudiar las propiedades electrónicas de cintas de grafeno es necesario definir para ambos casos, zigzag y armchair, una celda unitaria. Para las cintas armchair se define la celda unitaria que se muestra en la Figura 2.2. Una vez definida la celda unitaria, esta se repite infinitamente a lo largo de la dirección longitudinal de la cinta formando así un sistema periódico unidimensional. El ancho de las cintas armchair se define con N , donde N es el número de líneas de dímeros (par de sitios de carbono) y aumenta en la dirección transversal de la cinta, tal como se muestra en la misma figura.

Un aspecto muy importante e interesante a destacar para estas cintas es que cuentan con la propiedad de ser conductoras y/o semiconductoras. Esto depende directamente del ancho de la cinta. El sistema es considerado conductor cuando $N = 3m - 1$, y semiconductor cuando $N = 3m$ y $N = 3m + 1$, donde m es un número entero positivo (Wakabayashi, Sasaki, Nakanishi, & Enoki, 2010). Estas propiedades se ven reflejadas en sus correspondientes estructuras de bandas y densidad de estados las cuales se muestran en la Figura 2.3. En esta figura se presentan los casos en los que $N = 4, 5$, y 30 , en los paneles (a), (b) y (c) respectivamente. Para $N = 4$ y 30 , paneles (a) y (c), se observa una brecha de energía en sus respectivas estructuras de bandas, en $k = 0$, alrededor del nivel de Fermi², indicando que son semiconductores. En la estructura de bandas del panel (b), donde $N = 5$, no se observa dicha brecha de energía, indicando en este caso que la cinta es un material conductor.

² El nivel de Fermi es una energía de referencia que separa las bandas de valencia y las bandas de conducción. Las bandas por debajo del nivel de Fermi corresponden con las bandas de valencia y las bandas por arriba del nivel de Fermi corresponden con las bandas de conducción. El término “nivel de Fermi” proviene de las estadísticas de Fermi-Dirac que obedecen los electrones y que además obedecen el principio de exclusión de Pauli.

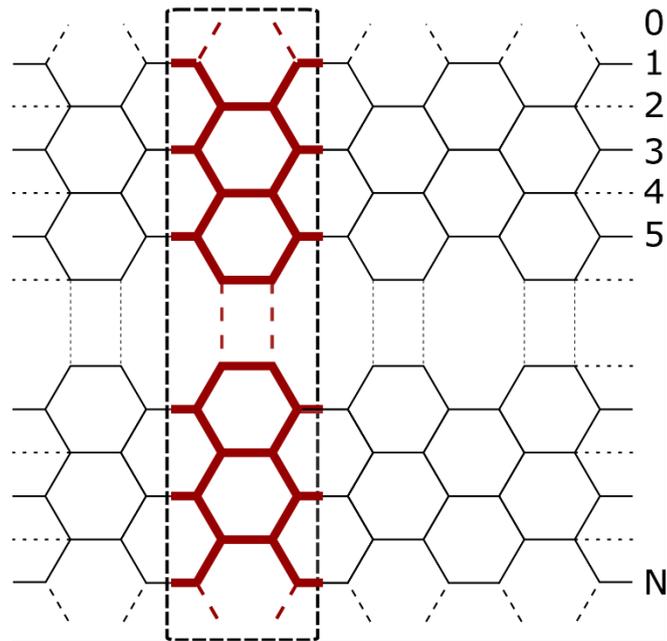


Figura 2.2 Celda unitaria de una cinta armchair. El ancho de la celda depende de la cantidad de líneas de dímeros de carbono, N . La celda unitaria está encerrada en líneas punteada y corresponde a la estructura remarcada en color rojo. La cinta armchair se reproduce con la repetición de esta celda unitaria a lo largo del eje longitudinal.

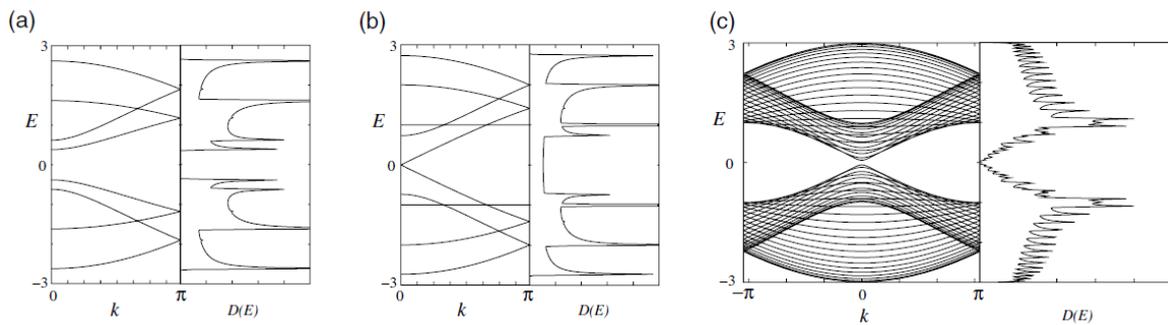


Figura 2.3 Estructura de bandas y densidad de estados para cintas armchair con anchos (a) $N = 4$, (b) $N = 5$ y (c) $N = 30$ (Wakabayashi, Sasaki, Nakanishi, & Enoki, 2010).

Estas estructuras de bandas se obtienen mediante la diagonalización del hamiltoniano (13) con el hamiltoniano de amarre fuerte para la celda unitaria de la Figura 2.2. Para cada valor de vector de onda \mathbf{k} , se obtienen $2N$ eigenvalores que forman la estructura de bandas.

Las densidades de estados cuentan el número de estados en un intervalo de energía, en estos también se observan brechas de energía alrededor del nivel de Fermi. Para los casos semiconductores esta brecha de energía disminuye cuando el ancho de la cinta aumenta.

2.4.2 Propiedades electrónicas de cintas zigzag

Una de las características más importantes de las cintas zigzag es que cuentan con la presencia de estados de orilla localizados, los cuales están ausentes en las cintas armchair.

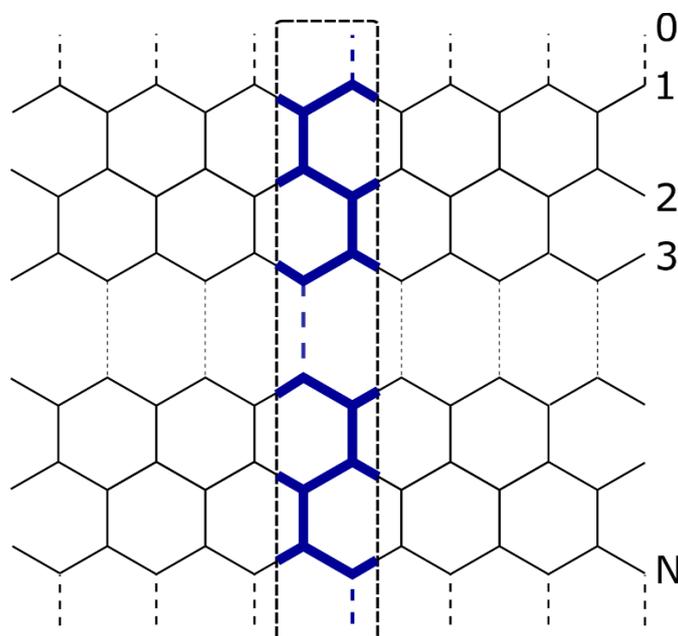


Figura 2.4 Celda unitaria de una cinta zigzag. El ancho de la celda depende de la cantidad de líneas zigzag, N , en la dirección transversal de la cinta. La celda unitaria está encerrada en líneas punteada y corresponde a la estructura remarcada en color azul. La cinta zigzag se reproduce con la repetición de esta celda unitaria a lo largo del eje longitudinal.

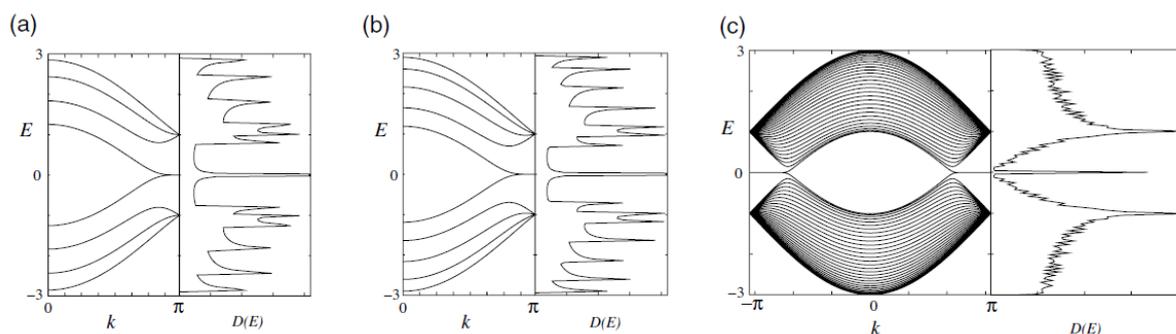


Figura 2.5 Estructura de bandas y densidad de estados para cintas zigzag con anchos (a) $N=4$, (b) $N=5$ y (c) $N=30$, respectivamente. Figura tomada de la referencia (Wakabayashi, Sasaki, Nakanishi, & Enoki, 2010).

Para el caso de las cintas zigzag surge una característica sobresaliente en la estructura de bandas, como se muestra en la Figura 2.5. Esto es, la banda superior del conjunto de bandas de valencia y la banda inferior del conjunto de bandas de conducción, siempre se encuentran degenerados en una región alrededor $k = \pm\pi$. Estas dos bandas centrales se

aplanan al aumentar el ancho de la cinta. Este par de bandas planas parciales aparecen en la región de $2\pi/3 \leq |k| \leq \pi$, donde las bandas están localizadas cerca del nivel de Fermi. Los estados electrónicos en la región de las bandas planas, es donde se pueden observar los estados localizados sobre la orilla zigzag. Se observa más claramente en la densidad de estados donde aparece un pico alrededor del nivel de Fermi. En todos los casos que se muestran, se observa la ausencia de una brecha de energía indicando que para todos los anchos N las cintas son conductoras.

2.5 Modelo de amarre fuerte para ondas mecánicas.

El modelo de amarre fuerte descrito en la sección anterior se puede emular en sistemas mecánicos por medio de la manipulación de vibraciones mecánicas en placas estructuradas. Estas vibraciones están descritas por la teoría de la elasticidad. La ecuación clásica de movimiento que describe el desplazamiento transversal, w , de una placa está dada por (Leissa, 1969)

$$D\nabla^4 w + \rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0, \dots \dots \dots (14)$$

donde D es la rigidez flexional y está definida por

$$D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)}, \dots \dots \dots (15)$$

donde E es el módulo de Young, h es el espesor de la placa, ν es la relación de Poisson, ρ es la densidad del material de la placa, t es el tiempo, y $\nabla^4 = \nabla^2 \nabla^2$, donde ∇^2 es el operador Laplaciano.

En general, la solución analítica de la ecuación (14) resulta ser muy compleja para sistemas estructurados, en algunos casos imposibles de resolver. Tan es así que en la actualidad se recurre a métodos numéricos tales como el método de los elementos finitos,

para facilitar el estudio de las vibraciones mecánicas en placas estructuradas. Dada la complejidad de las estructuras que aquí estudiamos, en esta tesis utilizamos el método de los elementos finitos mediante el software *COMSOL Multiphysics*.

Para reproducir el modelo de amarre fuerte con ondas mecánicas se necesita:

1. atrapar las vibraciones en una cierta región del espacio,
2. que la amplitud de vibración de la onda decaiga de forma exponencial fuera de esa región y
3. finalmente, que la vibración se acople de forma evanescente con la amplitud de onda de otra vibración.

Esta fenomenología del modelo de amarre fuerte para ondas mecánicas se obtiene mediante la manipulación de vibraciones mecánicas en placas estructuradas mediante el uso del software de elementos finitos, *COMSOL Multiphysics*, que describiremos en el siguiente capítulo.

3. Diseño de cintas artificiales mecánicas

En este capítulo analizamos los elementos básicos que constituyen el modelo de amarre fuerte en sistemas mecánicos, que son resonadores y estructuras localmente periódicas. Analizamos estos dos elementos para obtener los parámetros óptimos de diseño que nos ayuden a emular este modelo. Esto es, la localización de una vibración en una cierta región del espacio, el decaimiento exponencial fuera de esta región y el acoplamiento evanescente con otro resonador. Esto nos ayudará a construir las cintas artificiales mecánicas que reproduzcan las propiedades electrónicas de las cintas de grafeno con bordes armchair y zigzag. Los diseños se realizan con el uso del software de elementos finitos *COMSOL Multiphysics*.

3.1 Elementos básicos del modelo de amarre fuerte mecánico

Los elementos que constituyen nuestro modelo de amarre fuerte para ondas mecánicas son: resonadores y estructuras localmente periódicas. Las estructuras localmente periódicas tienen la propiedad de contar con estructuras de bandas permitidas, en donde las vibraciones se pueden propagar, y bandas prohibidas o brechas, en donde las vibraciones no se propagan (Morales, Flores, Gutierrez, & Méndez-Sánchez, 2002). Aquí, la idea es atrapar una vibración del resonador dentro de una banda prohibida del sistema localmente periódico, que su amplitud decaiga exponencialmente fuera del resonador y que adicionalmente sea capaz de acoplarse de forma evanescente con la vibración de un resonador vecino cercano. De esta manera al acoplar la vibración de un resonador a otro mediante un sistema localmente periódico, estos sean capaces de comunicarse entre sí mediante vibraciones mecánicas. Esto establece el régimen de amarre fuerte para ondas mecánicas.

Para analizar los resonadores y las estructuras localmente periódicas, mediante el uso del software de elementos finitos *COMSOL*, es necesario definir el material, un mallado adecuado y condiciones de frontera.

El material que elegimos es Aluminio AISI 1145, con módulo de Young $E = 70 \text{ GPa}$, densidad $\rho = 270 \text{ kg/m}^3$ y relación de Poisson $\nu = 0.33$. Al tratarse de placas, el mallado se compone de elementos hexaédricos para los sistemas periódicos con tamaño de elemento mínimo y máximo de 0.1 y 10 mm, respectivamente, y una tasa de crecimiento máxima de elementos de 1. Mientras que, para el caso de los resonadores, se aplica un mallado de elementos tetraédricos con tamaño de elemento mínimo y máximo de 0.1 y 2 mm, respectivamente, y una tasa de crecimiento máxima del elemento de 1. Las condiciones de frontera que elegimos son condiciones libres para todas las simulaciones.

3.1.1 Estructuras localmente periódicas

Un sistema periódico está compuesto por una celda unitaria que se repite un infinito de veces, ya sea a lo largo de uno, dos o tres ejes espaciales. Nosotros trabajamos con sistemas localmente periódicos los cuales también están compuestos de una celda unitaria, pero en este caso, se repite una cantidad finita de veces a lo largo de un solo eje.

En nuestro caso consideramos una celda unitaria cuadrada de lado Lp con dos pequeños rectángulos de lado $Lc/2$, altura hc , y espesor e , como se muestra en la Figura 3.1 (a). Al repetir nueve veces la celda unitaria de la Figura 3.1 (a) se forma la estructura localmente periódica que se muestra en la Figura 3.1 (b).

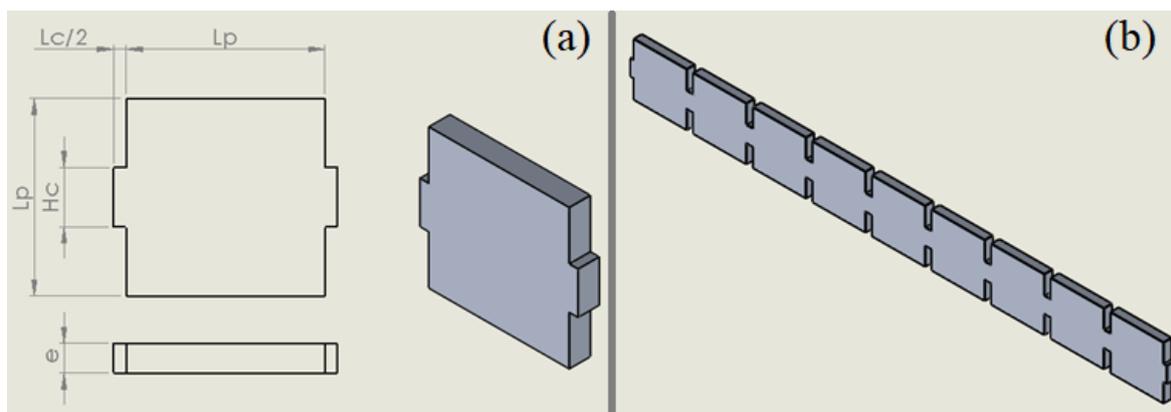


Figura 3.1 (a) Celda unitaria (lado izquierdo) y vista isométrica de la celda unitaria (lado derecho). (b) Vista isométrica del sistema localmente periódico formado con la repetición de nueve celdas unitarias de (a).

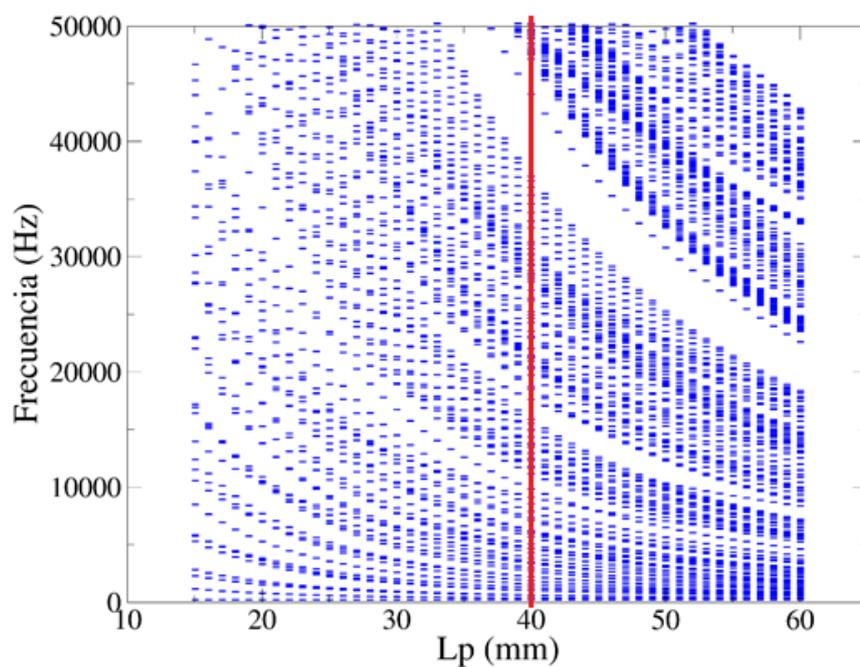


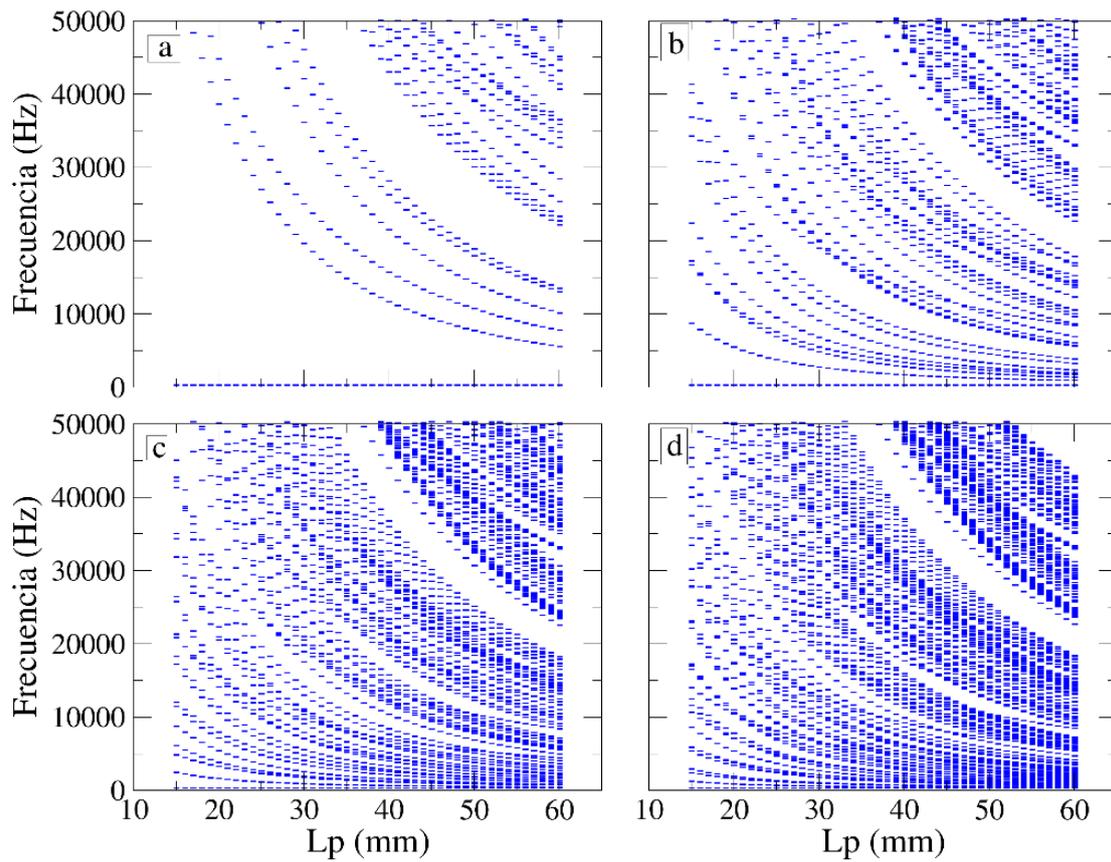
Figura 3.2 Estructura de bandas del sistema localmente periódico compuesto de nueve celdas unitarias.

En nuestro caso, las estructuras localmente periódicas sirven como medio de comunicación entre resonadores, también tienen la propiedad de contar con estructuras de bandas y brechas las cuales podemos obtener a través de un barrido paramétrico, en este caso barriendo el parámetro L_p , mientras que el resto de las dimensiones son $L_c = 5 \text{ mm}$, $H_c =$

12 mm y $e = 6.05$ mm, longitud del conector, altura del conector y espesor de la placa respectivamente.

La estructura de bandas correspondiente al sistema de la Figura 3.1 (b) que se obtiene se muestra en la Figura 3.2. Elegimos la brecha ubicada en $Lp = 40$ mm de 36722 a 43856 Hz, tratándose de una brecha lo suficientemente grande, que como veremos más adelante esta brecha nos ayudará a atrapar una gran cantidad de niveles de frecuencias de los resonadores de las cintas, es decir, entre más resonadores contenga nuestro sistema de estudio, más niveles de frecuencia correspondientes a los resonadores se encontrarán dentro de la brecha.

Estudiamos las frecuencias y modos de vibrar de una, de tres, seis y nueve celdas conectadas entre sí. De esta manera podemos observar la aparición de bandas y brechas en el espectro de frecuencias conforme se aumenta el número de celdas unitarias, esta característica es, como ya se ha mencionado en el capítulo anterior, una propiedad importante de los sistemas periódicos y sistemas localmente periódicos. En la Figura 3.3, mostramos el espectro de frecuencias de los cuatro casos mencionados anteriormente donde se realiza un barrido paramétrico a Lp desde 15 hasta 60 mm con saltos de 1 mm.



*Figura 3.3 Barrido paramétrico de sistemas formados por **a** una celda unitaria, **b** tres celdas unitarias conectadas, **c** seis celdas unitarias conectadas y **d** nueve celdas unitarias conectadas. Se observa que desde el caso **b** ya está presente una brecha de frecuencias para $L_p = 30$ hasta 60 mm en un rango de frecuencias aproximado desde 20000 hasta 50000 Hz.*

Además, estudiamos los niveles de frecuencia para las dimensiones $L_c = 5$ mm, $H_c = 12$ mm, $e = 6.05$ mm y $L_p = 40$ mm, para comprobar que la brecha de frecuencias de 36000 a 44000 Hz se mantiene para una, dos, tres, cuatro, cinco, ..., y diez celdas conectadas, esto se muestra en la Figura 3.4.

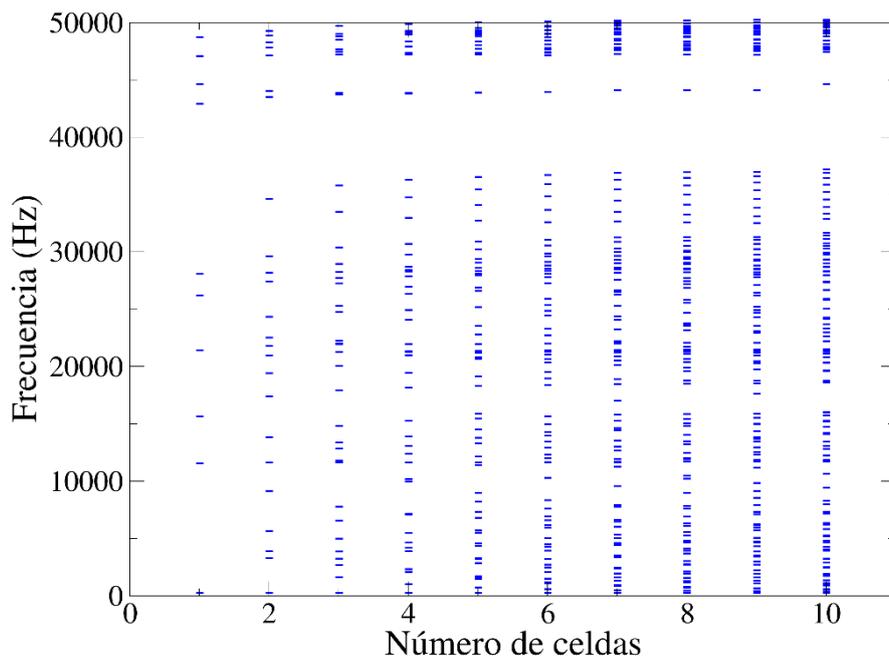


Figura 3.4 Niveles de frecuencia como función del número de celdas conectadas entre sí.

De esta manera podemos concluir que, a partir de una estructura localmente periódica compuesta de dos celdas, ya está presente una brecha de frecuencias que podemos usar para construir nuestras cintas.

3.1.2 Resonador

Elegimos una forma hexagonal para el resonador que nos permita crear una configuración hexagonal global de las cintas igual a la que se encuentra en el grafeno. Además, esta forma del resonador presenta modos de vibración en el rango de frecuencias de la brecha de las estructuras localmente periódicas que identificamos en la sección anterior. En la Figura 3.5 se muestra el modelo CAD del resonador, donde Lh es la longitud por lado del resonador y e corresponde al espesor del resonador.

Es necesario aplicar un barrido paramétrico al resonador, barriendo Lh desde 10 hasta 60 mm con saltos de 0.5 mm, para identificar modos de vibración que se encuentren en el rango de frecuencias de la brecha que elegimos para el sistema localmente periódico.

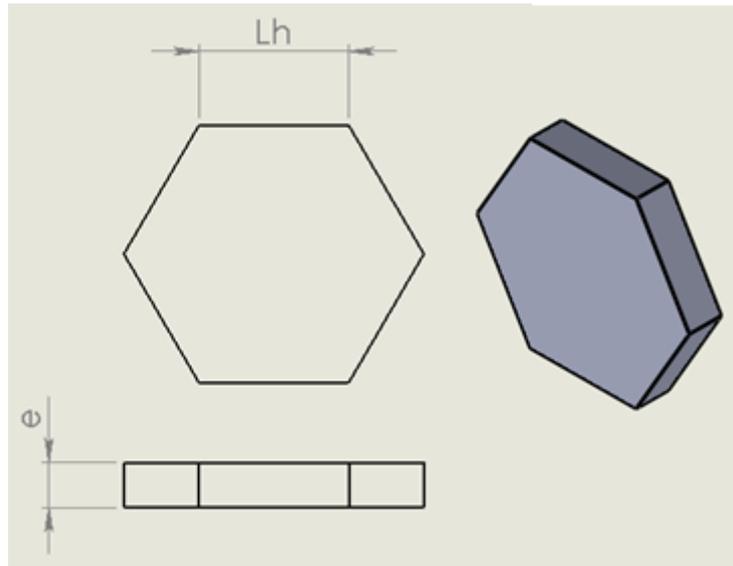


Figura 3.5 Resonador (lado izquierdo) y vista isométrica del resonador (lado derecho).

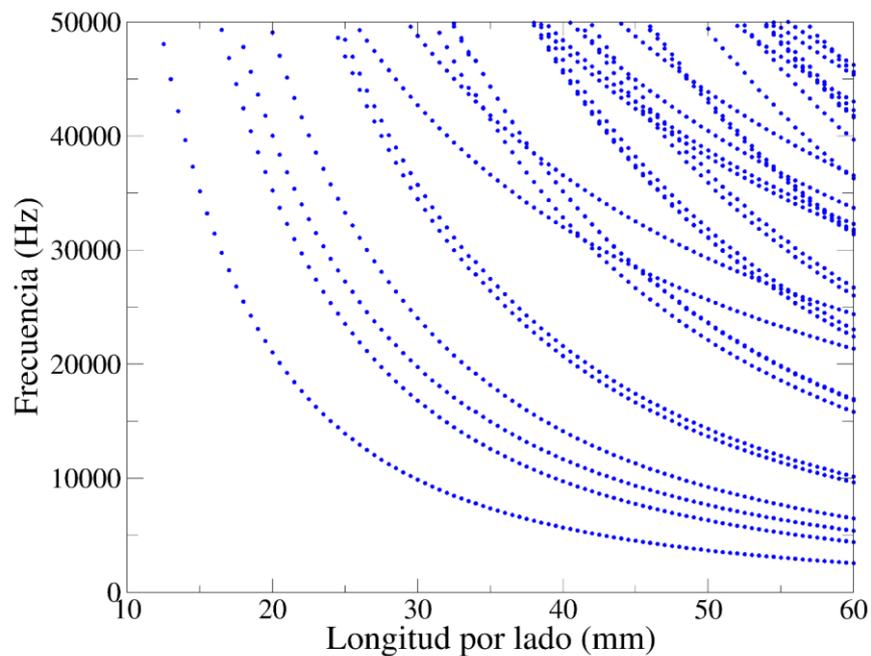


Figura 3.6 Espectro de frecuencias correspondiente al barrido paramétrico del resonador. Se barre la longitud por lado del hexágono desde 10 hasta 60 mm con saltos de 0.5 mm.

El espectro de frecuencias que se obtiene se muestra en la Figura 3.6. Ahí observamos que para resonadores con $Lh = 20 \text{ mm}$ se obtienen niveles dentro de la brecha de interés de las estructuras periódicas.

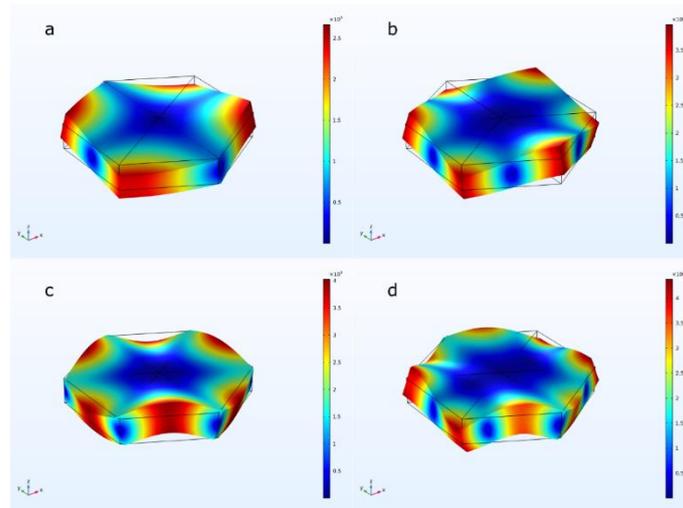


Figura 3.7 Modos flexionales fuera del plano a frecuencias de **a** 21051 Hz, **b** 40043 Hz, **c** 49062 Hz y **d** 69695 Hz. La escala de deformación se muestra a la derecha de cada modo siendo representado por el color azul la deformación mínima y color rojo la deformación máxima en valor absoluto.

Algunos de los modos que se encontraron para $Lh = 20 \text{ mm}$ se muestran en la Figura 3.7. Mostramos algunos modos que corresponden a modos flexionales fuera del plano, en particular elegimos el modo de la Figura 3.7 **b** debido a que los mínimos de la vibración se encuentran entre los vértices del resonador que es donde acoplaremos los sistemas localmente periódicos. En los otros casos esta característica no se observa. Además, la frecuencia natural de este modo es el único que se encuentra dentro de la brecha de frecuencias que identificamos previamente. La deformación máxima en valor absoluto de estos modos se representa con el color rojo, mientras que la deformación más cercana a cero se representa en color azul.

3.2 Resonador conectado a tres estructuras localmente periódicas

Para observar que el modo del resonador elegido en la sección anterior se encuentra dentro de la brecha de frecuencias del sistema localmente periódico compuesto de nueve celdas unitarias, analizamos una geometría compuesta por un resonador y tres sistemas localmente periódicos, tal como se muestra en la Figura 3.8.

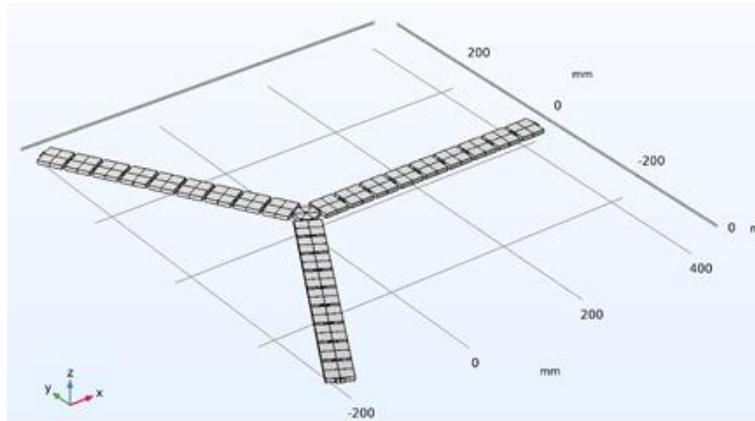


Figura 3.8 Resonador acoplado a tres sistemas localmente periódico de nueve celdas unitarias con un ángulo de 120° entre ellos.

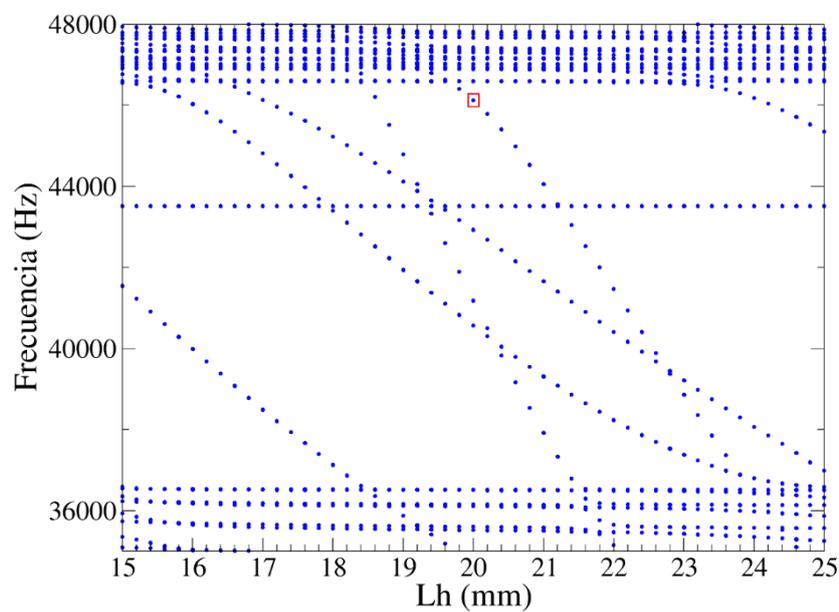


Figura 3.9 Espectro de frecuencias correspondiente a la geometría de la Figura 3.8 aplicando un barrido paramétrico al valor Lh desde 15 a 25 mm con saltos de 0.2 mm. Se encierra en recuadro rojo correspondiente al modo de vibrar de la Figura 3.10.

A esta geometría se le aplicó un barrido paramétrico a Lh , longitud por lado del resonador, desde 15 hasta 25 mm con saltos de 0.2 mm, dentro un rango de frecuencias de 35000 a 48000 Hz. El espectro de frecuencias obtenido se muestra en la Figura 3.9. En esta figura se encierra en rojo el modo de interés correspondiente al resonador atrapado en la brecha de frecuencias del sistema localmente periódico.

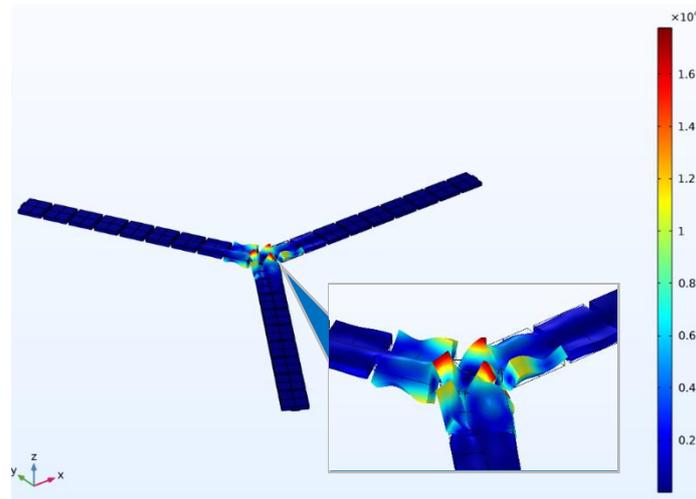


Figura 3.10 Vibración atrapada en el resonador a 46128 Hz. La deformación máxima en valor absoluto se muestra en color rojo, mientras que la mínima está representada en color azul. Deformación en mm.

Particularmente, se muestra en la Figura 3.10 el modo de vibrar de la Figura 3.7 **b** a una frecuencia de 46128 Hz. El valor de la frecuencia del modo resulto ser mayor y quedo atrapado en la brecha de frecuencias del sistema localmente periódico de 43519 a 46593 Hz. Podemos observar que el modo de vibrar del resonador quedo atrapada en una brecha diferente a la que elegimos. Esto se debe a un incremento en la rigidez y masa del sistema global.

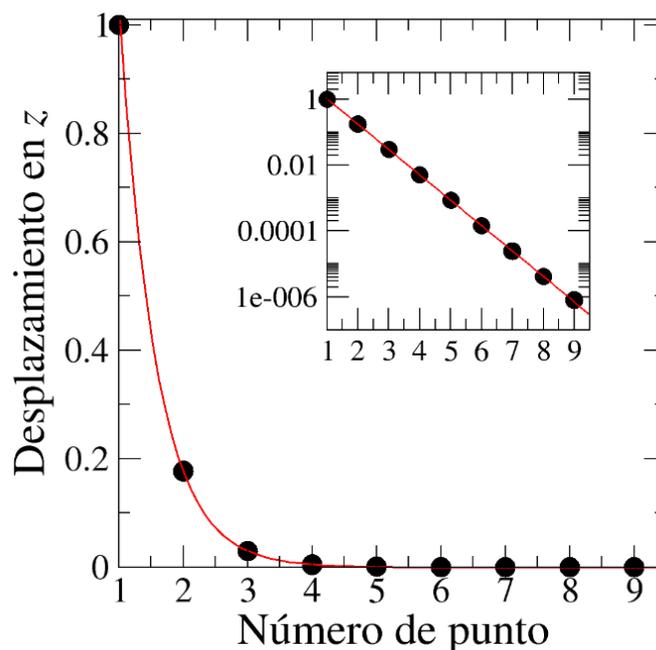


Figura 3.11 Decaimiento exponencial de la onda a lo largo del sistema localmente periódico en escala lineal y escala logarítmica (figura interna). Los puntos en color negro representan el desplazamiento en el eje z del sistema, mientras que la línea color rojo representa el ajuste exponencial de la curva formada por los puntos. En la figura interna se observa una línea recta, lo cual indica que se trata de un decaimiento exponencial a lo largo del sistema localmente periódico.

Este sistema es un análogo al caso cuántico de un sitio atómico donde la función de onda está localizada en el sitio y decae de manera exponencial fuera de él y que es el elemento básico para construir el modelo de amarre fuerte.

En la Figura 3.10 se muestra un acercamiento al modo de vibrar del sistema donde la onda está fuertemente atrapada en el resonador y decae, a simple vista, de manera exponencial a lo largo del sistema localmente periódico. Para comprobar esta fenomenología en nuestro sistema mecánico, se analiza la deformación en la dirección z a lo largo de uno de los sistemas localmente periódicos.

En la Figura 3.11 se muestran las gráficas correspondientes a esta deformación. Se muestra en escala lineal (en color rojo) la curva de ajuste exponencial de la deformación, mientras que los puntos negros representan el desplazamiento real del sistema. De igual forma, en la figura interna se presentan los mismos resultados, pero en escala logarítmica. La curva de ajuste tiene una forma exponencial, indicando así, que se cumple la fenomenología

que buscamos obtener. Este es un resultado importante ya que representa la emulación de un sitio atómico mediante sistemas mecánicos.

3.3 Dos resonadores conectados mediante un sistema localmente periódico

Para estudiar y emular el acoplamiento evanescente de las vibraciones entre dos sitios, diseñamos un sistema compuesto de dos resonadores conectados entre sí por medio de un sistema localmente periódico compuesto de dos celdas unitarias.

Cada resonador tiene además dos sistemas localmente periódicos conectados (de nueve celdas) con un ángulo de 120° entre sí como se muestra en la Figura 3.12.

De la misma manera que el sistema de la sección anterior, se realiza un barrido paramétrico de Lh desde 15 hasta 25 mm con saltos de 0.2 mm, dentro un rango de frecuencias de 35000 a 48000 Hz. El espectro de frecuencias obtenido se muestra en la Figura 3.13. En esta figura se encierra en rojo los niveles correspondientes a los resonadores atrapados en la brecha frecuencias del sistema localmente periódico.

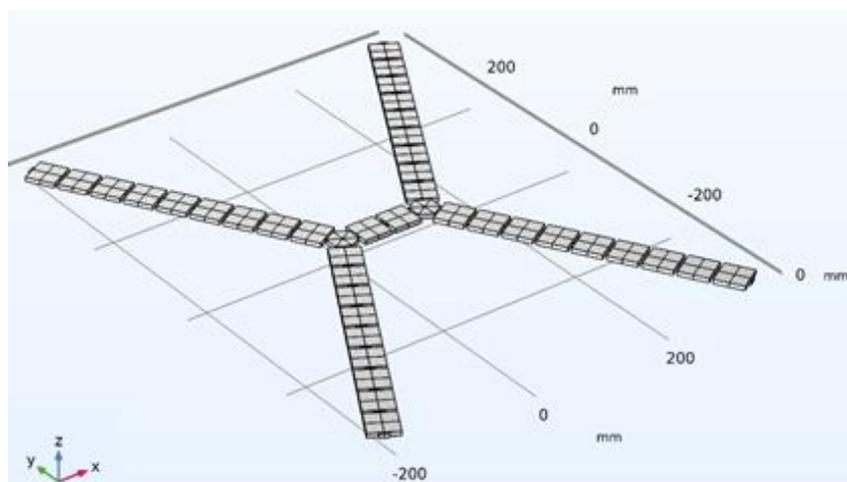


Figura 3.12 Dos resonadores conectados mediante un enlace formado por dos celdas unitarias.

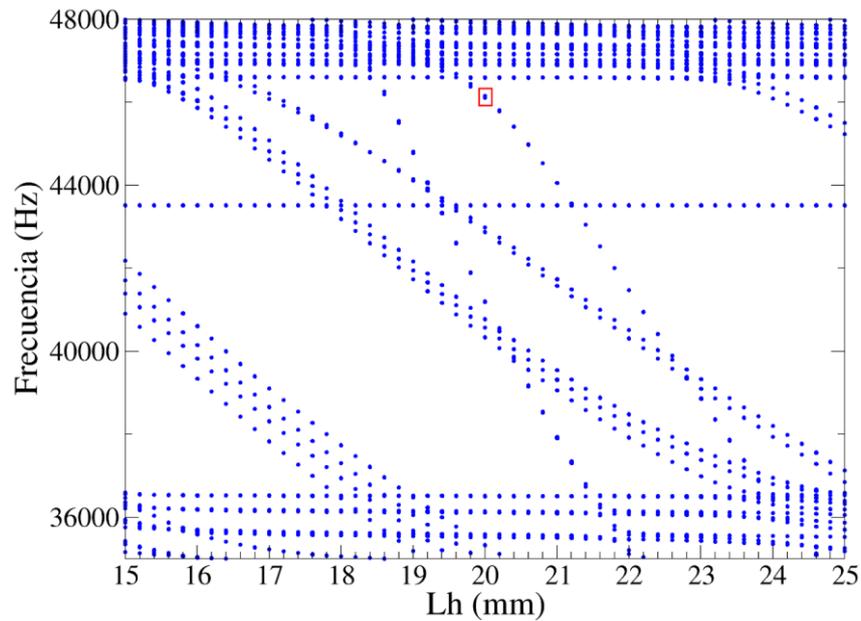


Figura 3.13 Espectro de frecuencias aplicando barrido paramétrico a L_h desde 15 a 25 mm con saltos de 0.2 mm correspondiente a la geometría de la Figura 3.12

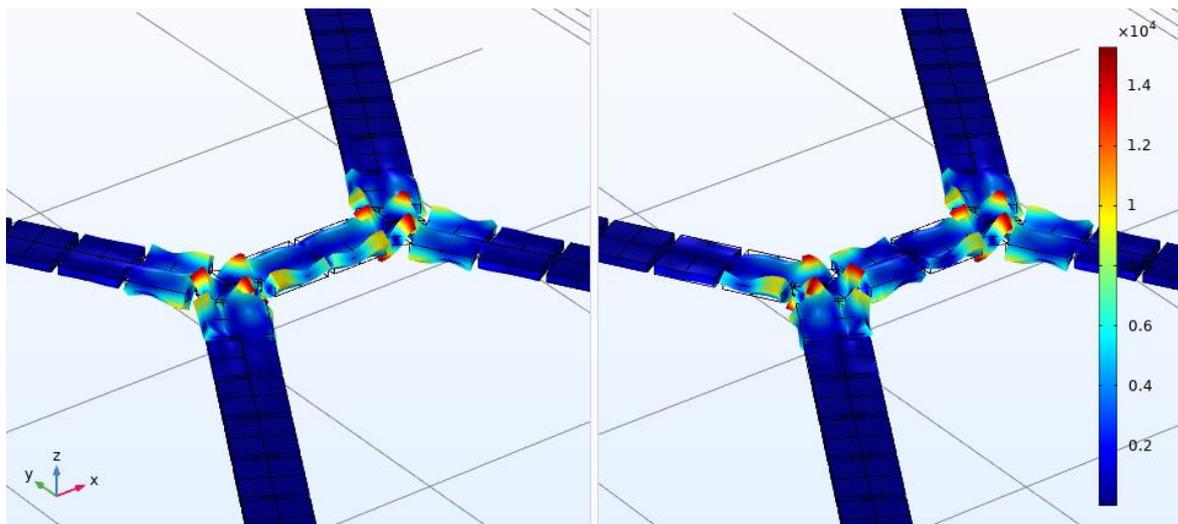


Figura 3.14 Modos de vibrar del sistema compuesto por dos resonadores conectados por enlaces compuestos de dos celdas unitarias. Del lado izquierdo se muestra el modo simétrico a 46106 Hz, y del lado derecho se muestra el modo antisimétrico a 46152 Hz. La deformación máxima en valor absoluto se muestra en color rojo, mientras que la mínima está representada en color azul. La deformación se da en mm.

Particularmente, se muestra en la Figura 3.14 los modos de vibrar de la Figura 3.7 **b** a frecuencias de 46106 y 46152 Hz. Estos corresponden con los modos simétrico y antisimétrico, respectivamente. En estos modos, se puede observar a simple vista el acoplamiento evanescente entre los resonadores. Para analizar el decaimiento exponencial de la amplitud de onda fuera de los resonadores, a lo largo del enlace que los conecta, y poder

describir el acoplamiento evanescente, es útil hacer un análisis donde en lugar de tener solo dos celdas unitarias, se tengan seis. Esto se plantea con el objetivo de tener un mayor número de puntos de evaluación en la geometría, los necesarios para graficar el decaimiento de la amplitud de onda del sistema.

En la Figura 3.15 **a**, se observa un decaimiento exponencial de la amplitud de onda fuera de los resonadores para un enlace de seis celdas que los conecta. La curva en color rojo corresponde con la curva de ajuste de los puntos en color negro, medidos en los puntos azules de la Figura 3.15 **b**, la cual para $0 \leq x \leq 12$, $f(x) = \exp((2 - x) \cdot 0.579454)$, y para $7 \leq x \leq 18$, $f(x) = \exp((x - 17) \cdot 0.579454)$.

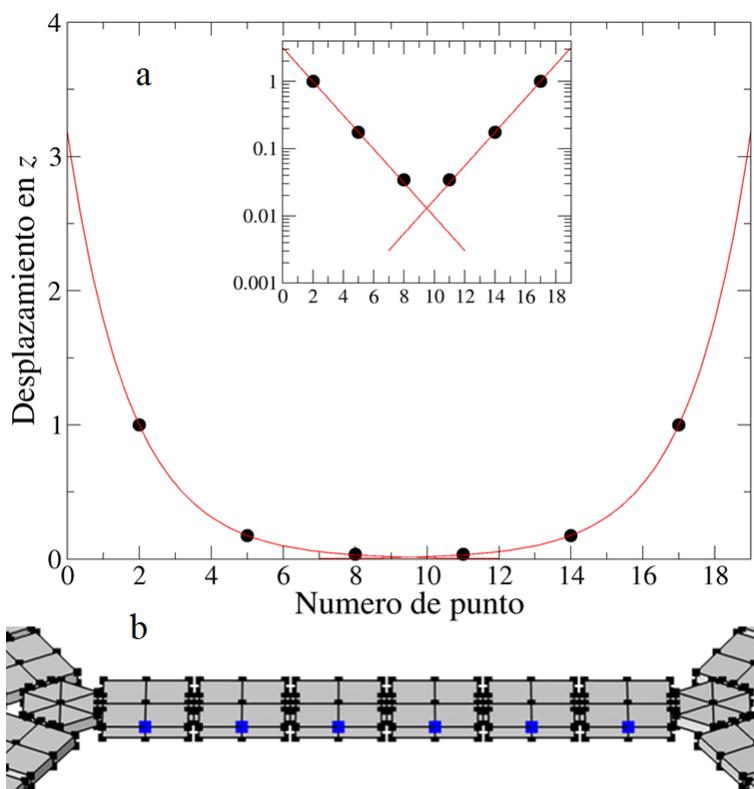


Figura 3.15 **a** Desplazamiento en z de la amplitud de onda, medido en los puntos azules de la figura **b**, a lo largo del enlace que conecta los resonadores. Las líneas roja continua en la figura **a**, corresponde con un ajuste exponencial. En la figura interna de esa misma figura se muestra ese mismo ajuste en escala logarítmica.

En la figura interna de la Figura 3.15 **a** se muestra esta gráfica en escala logarítmica. Esto está de acuerdo con la hipótesis del modelo de amarre fuerte, en donde la función de onda de cada átomo está fuertemente amarrada a su sitio y su amplitud decae de forma

exponencial fuera de este. Esto es, la envolvente de la amplitud de onda fuera de cada sitio tiene la forma $\phi_j(x) = c e^{-\frac{|x-x_0|}{\xi}}$, donde ξ es la longitud de evanescencia (Ramírez, Flores, Báez, Sadurní, & Méndez, 2020). Para nuestros sistemas mecánicos la longitud de evanescencia es, $0.579454 = \frac{1}{\xi}$, es decir $\xi \approx 1.72576$.

Los modos encontrados para el caso de seis celdas unitarias en el enlace se muestran en la Figura 3.16, ambos a una frecuencia de 46145 Hz, estos corresponden a los modos simétrico y antisimétrico.

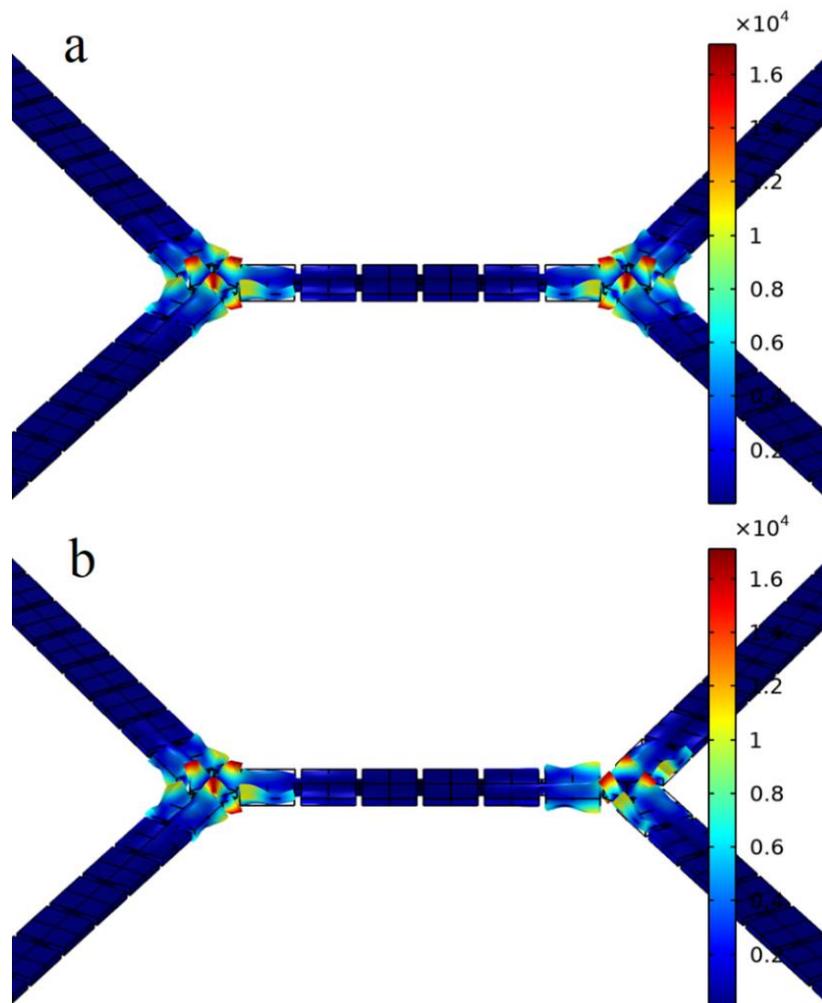


Figura 3.16 **a** Modo simétrico a 46145 Hz y **b** modo antisimétrico a 46145 Hz. Se observa que la vibración está atrapada en el resonador y su amplitud decae a lo largo de los enlaces. El máximo, en valor absoluto, de la amplitud de onda se representa en color rojo, mientras que el mínimo, aproximadamente cero, se representa en color azul. La deformación está dada en milímetros.

Esto es, demostramos un atrapamiento de las vibraciones en los resonadores, un decaimiento exponencial fuera de estos y un acoplamiento evanescente entre ellos. Es así como establecemos el modelo de amarre fuerte para ondas mecánicas y representa el resultado más importante de la presente tesis. En la siguiente sección utilizamos estos resultados para emular las propiedades electrónicas de las cintas de grafeno.

3.4 Cintas artificiales de grafeno

Para construir las cintas artificiales mecánicas es importante contar con una brecha de frecuencias, de lo enlaces, lo suficientemente grande debido a que las cintas son sistemas compuestos de más de dos resonadores. Por cada resonador tenemos un nivel de frecuencias que se ubicará dentro de la brecha de frecuencias. Por ejemplo, para una cinta armchair de ancho $N = 30$, el sistema está formado por 60 resonadores. Por lo tanto, el tamaño de la brecha de frecuencias del sistema localmente periódico es importante, ya que este será un factor que determina la cantidad de niveles de frecuencias que pueden existir dentro de dicha brecha sin que interfieran con los niveles correspondientes al del sistema periódico.

Para reproducir las propiedades electrónicas de estas cintas análogas, primero es necesario establecer la celda unitaria que define a cada una de las cintas. Posteriormente hay que aplicar condiciones de frontera periódicas y hacer un barrido paramétrico del vector de onda \mathbf{k} a lo largo de la dirección longitudinal de la celda unitaria en cada caso. Esto con la finalidad de emular un sistema periódico infinito.

3.4.1 Celda unitaria de una cinta armchair

Como en el caso de la sección 2.4.1 definimos de la misma manera la celda unitaria para cintas armchair. Ahora estas celdas unitarias están construidas en una placa elástica formada de resonadores y sistemas localmente periódicos estudiados en secciones anteriores. Para reproducir las propiedades electrónicas de las cintas de grafeno, estudiamos cintas con diferentes anchos $N = 5, 6, \text{ y } 7$, correspondientes a sistemas conductores y semiconductores. Las dimensiones de los componentes de estos sistemas son $Lh = 20, Lp = 40, Lc = 5, Hc = 12 \text{ mm}$ y $e = 6.05 \text{ mm}$. Estas celdas unitarias se muestran en la Figura 3.17. Los enlaces formados de cuatro celdas los elegimos para evitar efectos de tamaño finito.

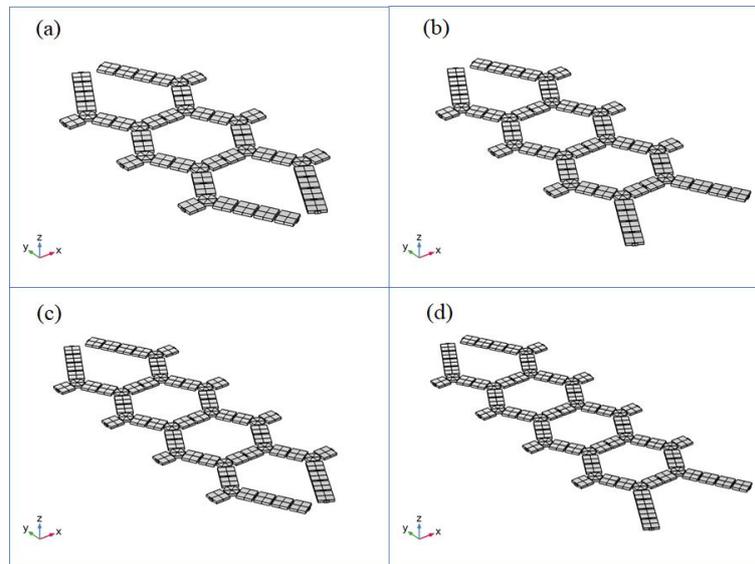


Figura 3.17 Celdas unitarias de cintas armchair con (a) $N = 5$, (b) $N = 6$, (c) $N = 7$ y (d) $N = 8$

3.4.2 Celda unitaria de una cinta zigzag

Como en el caso de la sección 2.4.2 definimos de la misma manera la celda unitaria para cintas zigzag. Ahora estas celdas unitarias están construidas en una placa elástica formada de resonadores y sistemas localmente periódicos estudiados en secciones anteriores.

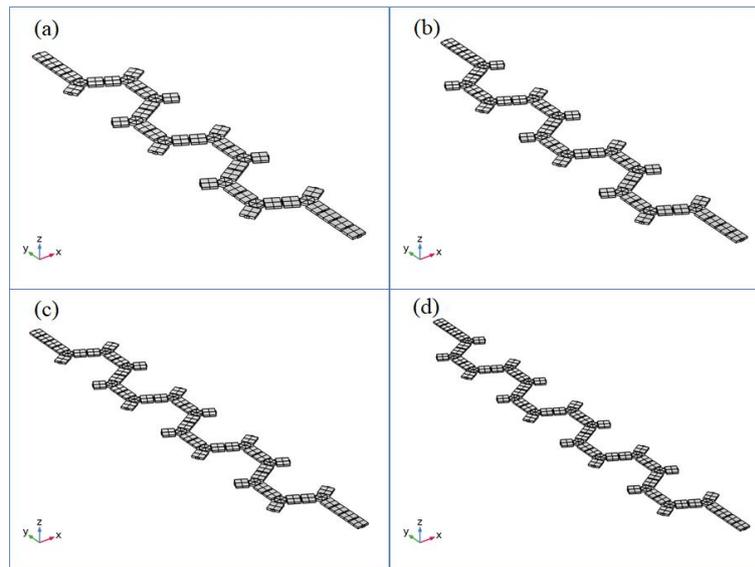


Figura 3.18 Celdas unitarias de cintas zigzag con (a) $N = 5$, (b) $N = 6$, (c) $N = 7$ y (d) $N = 8$.

Para reproducir las propiedades electrónicas de estas cintas, analizamos los mismos anchos que en la cinta armchair, estos son $N = 5, 6$, y 7 , con la finalidad de demostrar que, para todos los casos, las cintas zigzag son conductoras, además de contar con la presencia de bandas planas, las cuales denotan estados de orilla localizados. Las dimensiones de los componentes de estos sistemas son los mismos que para el caso armchair. Las celdas unitarias que estudiamos se muestran en los paneles (a), (b) y (c) de la Figura 3.18.

En el siguiente capítulo analizaremos los resultados obtenidos de ambas cintas con anchos antes mencionados.

4. Resultados y discusión

En este capítulo presentamos los resultados obtenidos de las cintas armchair y zigzag de diferentes anchos. Mostramos las propiedades electrónicas de las cintas artificiales mecánicas las cuales son las análogas de las propiedades de las cintas de grafeno. Demostramos las propiedades de conductor y semiconductor para el caso de cintas armchair, y las propiedades de conductor con la aparición de estados localizados de orillas para cintas zigzag.

4.1 Propiedades electrónicas de cintas mecánicas armchair

Aquí estudiamos las estructuras de bandas de diferentes anchos N para emular las propiedades de semiconductor y conductor de cintas armchair. Para reproducir estas propiedades electrónicas, primero es necesario establecer la celda unitaria que define a cada una de las cintas. Posteriormente aplicamos condiciones de frontera periódicas y un barrido paramétrico del vector de onda \mathbf{k} a lo largo de la dirección longitudinal de la celda unitaria en cada caso. Esto con la finalidad de emular un sistema periódico infinito.

Una vez definida la celda unitaria con ancho fijo, en el software *COMSOL* es necesario definir el material, en nuestro caso Aluminio AISI 1145, la geometría de nuestro sistema y un mallado. El mallado debe ser simétrico respetando una relación de aspecto de 1:10, para que los elementos no resulten ser muy alargados. Para los resonadores empleamos elementos tetraédricos mientras que para las estructuras localmente periódicas empleamos elementos hexaédricos, ver la Figura 4.1.

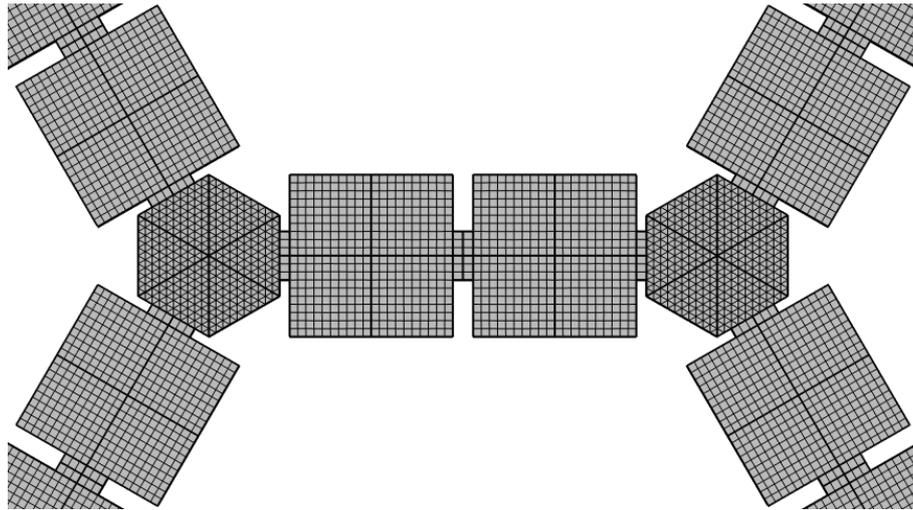


Figura 4.1 Mallado de los resonadores y sistemas localmente periódicos aplicados a todos los sistemas que se estudian.

Las condiciones de frontera periódicas las aplicamos en los bordes de la dirección transversal de la cinta, y el vector de onda \mathbf{k} se barre a lo largo de la dirección longitudinal de la celda desde 0 a 1. La longitud de la celda unitaria de esta cinta es de 0.37392 m.

Estudiamos diferentes casos de cintas armchair con la finalidad de comprobar que para diferentes anchos el sistema puede ser conductor o semiconductor. En las Figura 4.2 y Figura 4.3 presentamos los resultados obtenidos para casos de cintas con ancho $N = 5$ y 8. Ahí observamos la ausencia de una brecha de frecuencias en $k = 0$ en sus correspondientes estructuras de bandas (lado izquierdo de cada figura). Esto indica que estas cintas corresponden a sistemas conductores. Esto es, para $k = 0$, alrededor de 46150 Hz la banda superior de la banda de valencia y la banda inferior de la banda de conducción se tocan en un punto.

En las Figura 4.4 y Figura 4.5, por otro lado, presentamos los resultados obtenidos para los casos de cintas con anchos $N = 6$ y 7. En estos casos, observamos que si existe una brecha de frecuencias alrededor de $k = 0$, en sus correspondientes estructuras de bandas, ver lado izquierdo de cada figura. Esto indica que estas cintas corresponden a sistemas semiconductores.

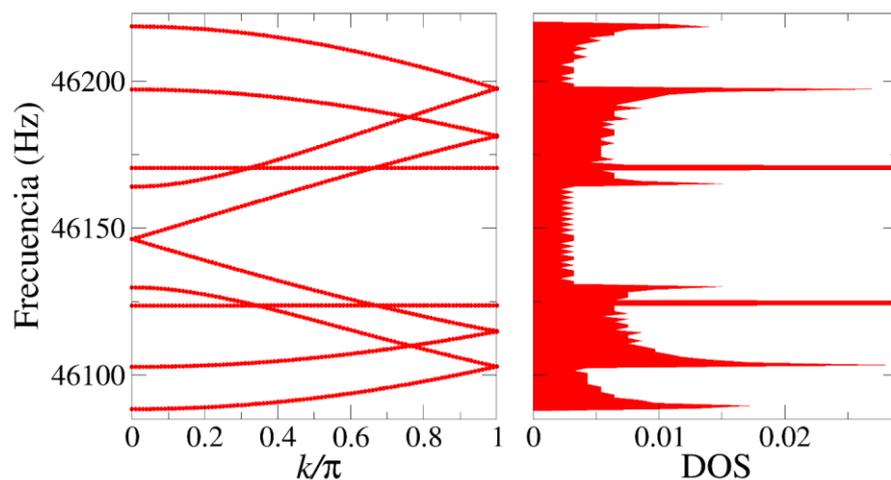


Figura 4.2 Estructura de bandas (lado izquierdo) y densidad de estados (lado derecho) correspondiente a una cinta armchair con ancho $N = 5$.

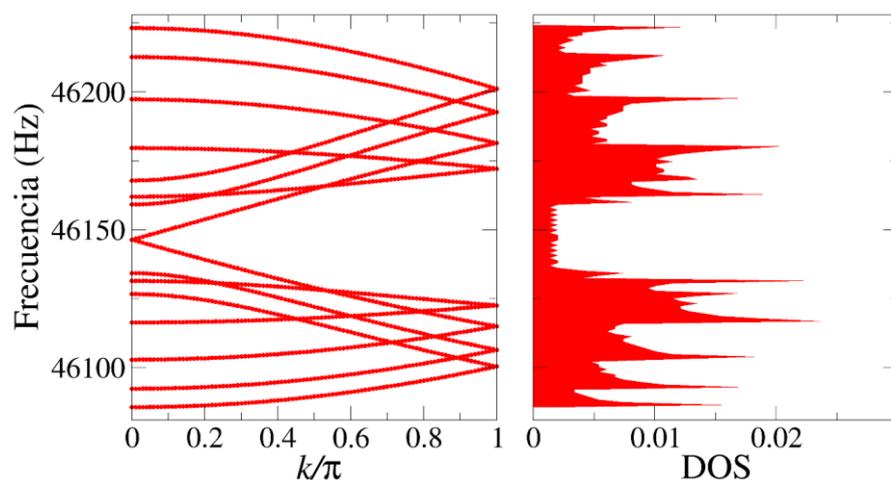


Figura 4.3 Estructura de bandas (lado izquierdo) y densidad de estados (lado derecho) correspondiente a una cinta armchair con ancho $N = 8$.

Para el caso de cintas semiconductoras, el tamaño de la brecha disminuye a medida que aumenta el ancho de la cinta, por ejemplo, para cintas con $N = 6$ y 7 las brechas son de 11.55 y 10.97 Hz respectivamente. Estos efectos también se ven reflejados en la densidad de estados, gráfico mostrado al lado derecho de cada figura, donde para los casos de sistemas semiconductores también se cuenta con la presencia de una brecha en la misma región de la brecha de la estructura de bandas. Caso contrario para los sistemas conductores, donde en sus densidades de estados no contamos con la presencia de dichas brechas.

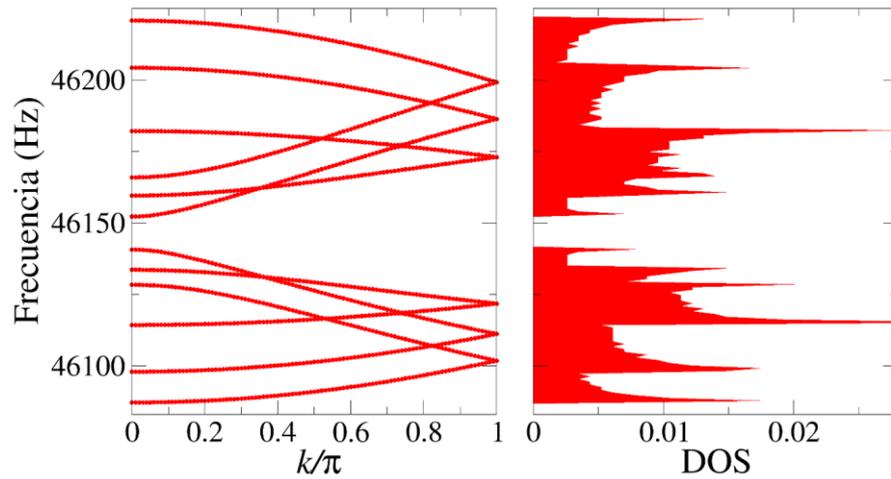


Figura 4.4 Estructura de bandas (lado izquierdo) y densidad de estados (lado derecho) correspondiente a una cinta armchair con ancho $N = 6$.

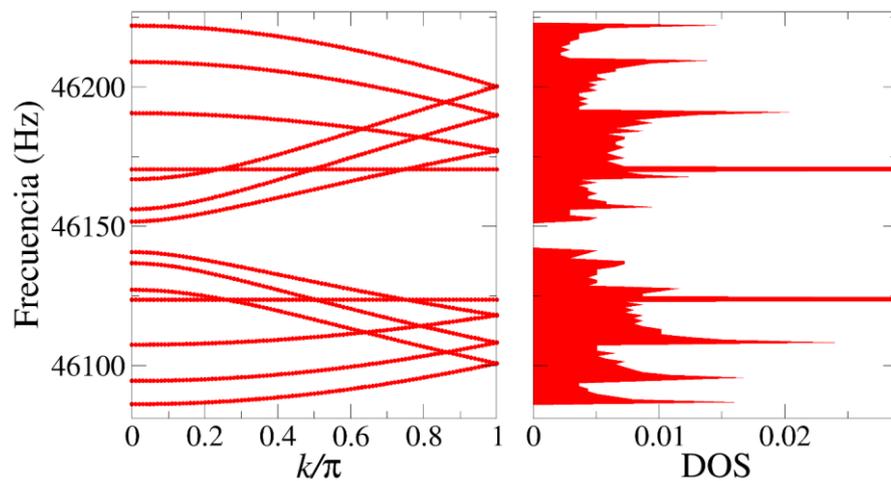


Figura 4.5 Estructura de bandas (lado izquierdo) y densidad de estados (lado derecho) correspondiente a una cinta armchair con ancho $N = 7$.

4.2 Propiedades electrónicas de cintas mecánicas zigzag

Para el caso de estas celdas, utilizamos el material, mallado y condiciones de frontera que en el caso de las cintas armchair, con la diferencia que la longitud de la celda es de 0.21588 m.

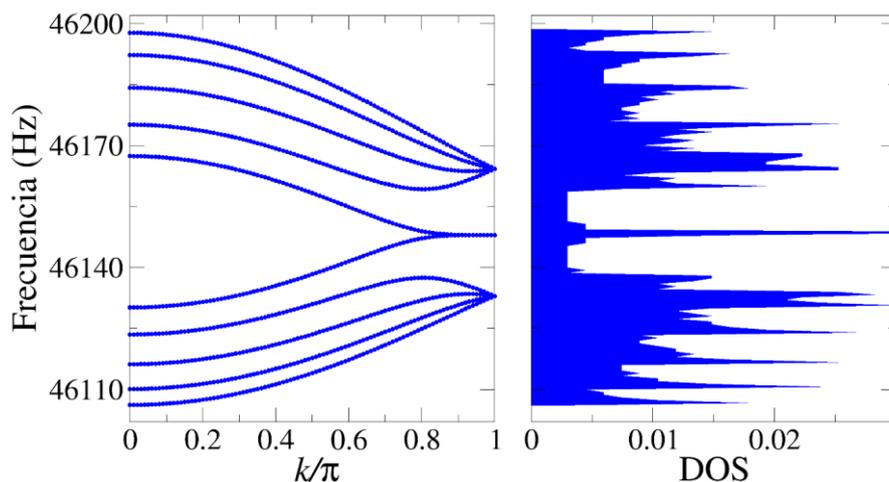


Figura 4.6 Estructura de bandas (lado izquierdo) y densidad de estados (lado derecho) correspondiente a una cinta zigzag con ancho $N = 5$.

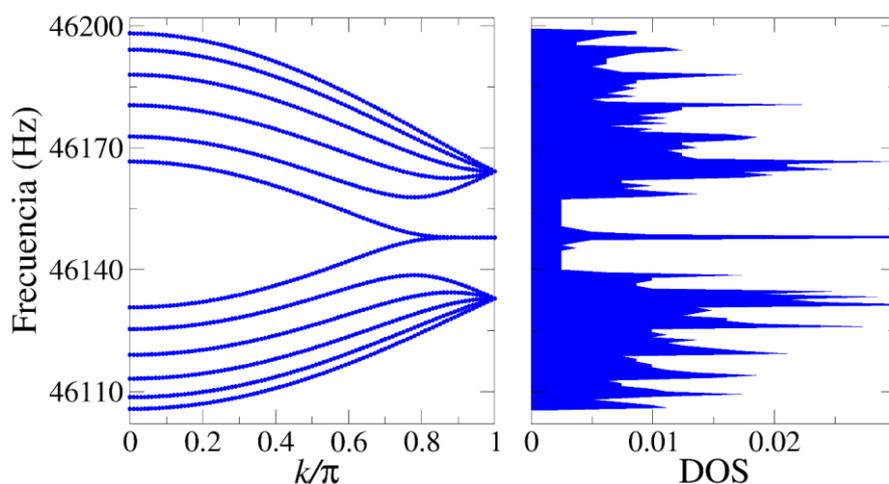


Figura 4.7 Estructura de bandas (lado izquierdo) y densidad de estados (lado derecho) correspondiente a una cinta zigzag con ancho $N = 6$.

Aquí estudiamos diferentes casos de cintas zigzag con la finalidad de comprobar que, para diferentes anchos, el sistema siempre tiene comportamiento conductor. De la Figura 4.6 a la Figura 4.9 presentamos los resultados obtenidos para casos de cintas con anchos $N = 5, 6, 7$ y 8 .

En estos casos observamos una brecha de frecuencias de tamaño cero, en sus correspondientes estructuras de bandas ubicadas al lado izquierdo de cada figura, en $k = 1$, indicando así que corresponden a sistemas conductores.

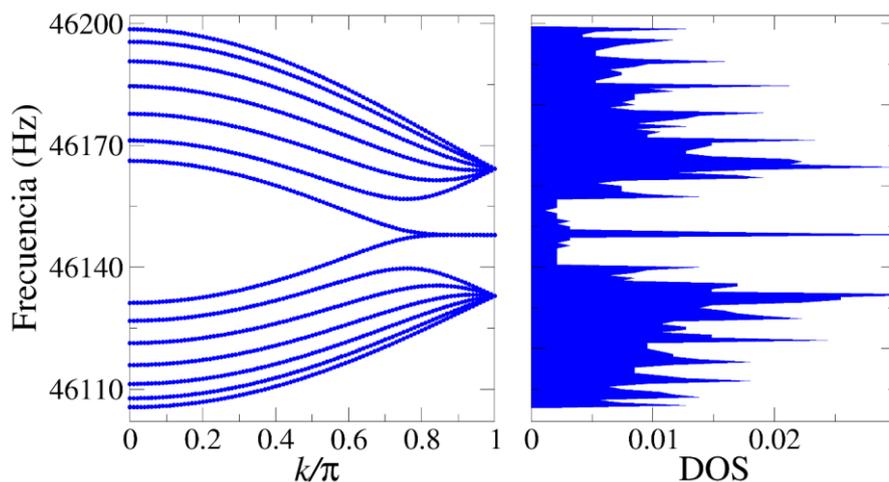


Figura 4.8 Estructura de bandas (lado izquierdo) y densidad de estados (lado derecho) correspondiente a una cinta zigzag con ancho $N = 7$.

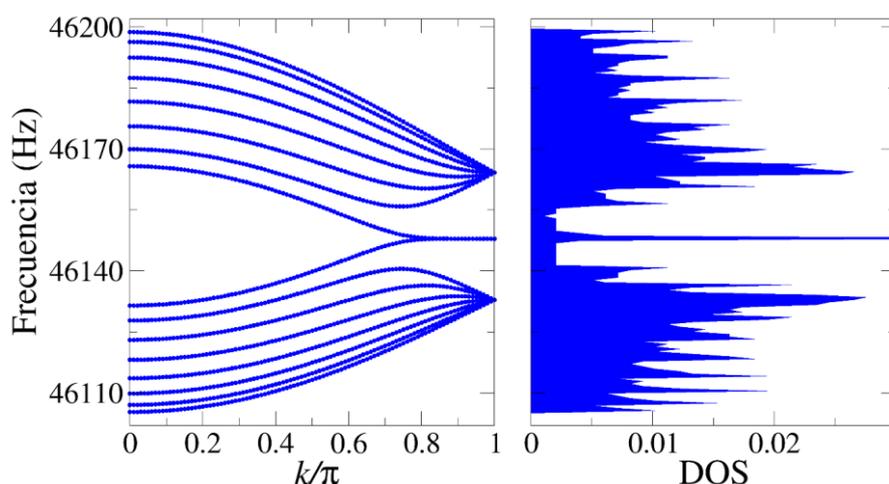


Figura 4.9 Estructura de bandas (lado izquierdo) y densidad de estados (lado derecho) correspondiente a una cinta zigzag con ancho $N = 8$.

Además, notamos la presencia de dos bandas planas centrales, las cuales corresponden a estados de orilla de las cintas (Wakabayashi, Sasaki, Nakanishi, & Enoki, 2010). Esto es, para $0.66 \leq k \leq 1$, alrededor de 46150 Hz la banda superior de la banda de valencia y la banda inferior de la banda de conducción se aplanan y se tocan en esta región. La longitud de estas bandas planas es función del ancho de la celda, es decir, conforme aumenta N , aumenta la longitud de las bandas planas.

Los efectos de orilla localizados también se ven reflejados en la densidad de estados, grafica mostrada al lado derecho de cada figura, donde se observa un pico de frecuencias al centro de cada gráfico, estos corresponden con los estados de orilla localizados.

5. Conclusiones

En esta tesis, emulamos de forma exitosa el modelo de amarre fuerte en sistemas mecánicos. Esto es, emulamos el decaimiento exponencial de la amplitud de onda de una vibración fuera de un resonador. Segundo, obtuvimos un acoplamiento evanescente, a primeros vecinos, de la amplitud de onda de vibración proveniente de otro resonador. Estas son las características principales del modelo de amarre fuerte mecánico, las cuales nos permite tener un alto control de las interacciones a primeros vecinos. Esto es muy difícil de realizar con sistemas ondulatorios clásicos que se han estudiado hasta ahora, tales como en sistemas de microondas o sistemas masa resorte.

Basados en estos resultados que emulan el modelo de amarre fuerte para ondas mecánicas, diseñamos cintas artificiales análogas a cintas de grafeno con orilla zigzag y armchair. Logramos reproducir las propiedades electrónicas que determinan si el sistema es conductor o semiconductor, en el caso de las cintas armchair, dependiendo del ancho de la cinta. Además, observamos que las cintas zigzag tienen comportamiento conductor sin importar el ancho que tengan, y una característica sobresaliente de estas y que también logramos reproducir, son los estados de orilla localizados, los cuales están ausentes en las cintas con orilla armchair.

Estos resultados son de gran relevancia ya que, en la actualidad, aislar cintas de grafeno de anchos pequeños resulta ser todo un reto, esto dificulta tanto la aplicación como la comprobación de los modelos teóricos descritos en la literatura científica.

Los resultados obtenidos en esta tesis dejan el camino abierto y amplía las posibilidades de estudiar las propiedades electrónicas u ondulatorias de otros sistemas, a nivel microscópico, que se describan por el modelo de amarre fuerte. Ejemplos de ello son, el nitruro de boro, defectos en cintas de grafeno y de nitruro de boro, etc.

Referencias

- Bellec, M., Kuhl, U., Montambaux, G., & Mortessagne, F. (2013). Tight-binding couplings in microwave artificial graphene. *Physical Review B*, 88(115437), 1-9.
- Bittner, S., Dietz, B., Miski-Oglu, M., Oria Iriarte, P., Richter, A., & Schäfer, F. (2010). Observation of a Dirac point in microwave experiments with a photonic crystal modeling graphene. *Physical Review B*, 82(014301), 1-5.
- Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 110.
- Chang, R. (2010). *Química* (10ma ed.). McGraw-Hill.
- Cuevas, J. C., & Scheer, E. (2010). *Molecular Electronics: An introduction to theory and experiment*. Singapore: World Scientific Publishing .
- Dubois, S.-M., Zanolli, Z., Declerck, X., & Charlier, J.-C. (2009). Electronic properties and quantum transport in graphene-based nanostructures. *The European Physical Journal B*, 1-24.
- Flores-Olmedo, E., Martínez-Argüello, A., Martínez-Mares, M., Báez, G., Franco-Villafañe, J., & Méndez-Sánchez, R. (2016). Experimental evidence of coherent transport. *Scientific Reports*, 6(25157), 1-5.
- Katsnelson, M. (2007). Graphene: carbon in two dimensions. *Materials Today*, 10(1-2), 20-27.
- Kondakci, H., Abouraddy, A., & Saleh, B. (2015). A photonic thermalization gap in disordered lattices. *Nature Physics*, 11, 930-935.
- Kuhl, U., Barkhofen, S., Tudorovskiy, T., Stöckmann, H.-J., & Hossain, T. (2010). Dirac point and edge states in a microwave realization of tight-binding graphene-like structures. *Physical Review B*, 82(094308), 1-4.
- Leissa, A. (1969). *Vibration of plates*. Columbus, Ohio: U.S. Government Printing Office.

- Martínez-Argüello, A. M., Martínez-Mares, M., Cobián-Suarez, M., Báez, G., & Méndez-Sánchez, R. (2015). A new Fano resonance in measurement processes. *A Letters Journal Exploring the Frontiers of Physics*, 110(54003), 1-5.
- Morales, A., Flores, J., Gutierrez, L., & Méndez-Sánchez, R. (2002). Compresional and torsional wave amplitudes in rods with periodic structures. *Journal Acoustic Society of América*, 112(5), 1961-1967.
- Novoselov, K., Fal'ko, V., Colombo, L., Gellert, P., Schwab, M., & Kim, K. (2012, Octubre 11). A roadmap for graphene. *Nature*, 192-200.
- Novoselov, K., Geim, A., Morozov, S., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S., . . . Firsov, A. (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 666-669.
- Ramírez, F., Flores, E., Báez, G., Sadurní, E., & Méndez, R. A. (2020). Emulating tightly bound electrons in crystalline solids using mechanical waves. *Scientific Reports*, 10(10229), 1-7.
- Ruffieux, P., Cai, J., Plumb, N., Patthey, L., Prezzi, D., Ferreti, A., . . . Fasel, R. (2012). Electronic structure of atomically precise graphene nanoribbons. *American Chemical Society*, 6930-6935.
- Saito, R., Dresselhaus, G., & Dresselhaus, M. (1998). *Physical properties of carbon nanotubes*. London: Imperial College Press.
- Stegmann, T., Franco-Villafañe, J. A., Kuhl, U., Mortessagne, F., & Seligman, T. H. (2017). Transport gap engineering by contact geometry in graphene nanoribbons: Experimental and theoretical studies on artificial materials. *Physical Review B*, 95(035413), 1-7.
- Torrent, D., & Sánchez-Dehesa, J. (2012). Acoustic analogue of graphene: Observation of Dirac cones in acoustic surface waves. *Physical Review Letters*, 108(174301), 1-5.

- Torrent, D., Mayou, D., & Sánchez-Dehesa, J. (2013). Elastic analog of graphene: Dirac cones and edge states for flexural waves in thin plates. *Physical Review B*.
- Wakabayashi, K., Sasaki, K.-i., Nakanishi, T., & Enoki, T. (2010). Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions. *Science and technology of advanced materials*, 1-18.
- Wallace, P. (1947). The band theory of graphite. *Physical Review*, 622-634.



Cuernavaca, Mor., a 01 de JUNIO del 2021.

**FORMA T-4A
NOMBRAMIENTO COMITÉ REVISOR**

**MTRO. JUAN MANUEL ZAGAL SANCHEZ
DR. JUAN CARLOS GARCIA CASTREJON
DR. JOSE ALFREDO ARIZA ESPINOZA
MTRO. ANDRES AGUILAR NEGRETE
DR. ANGEL MARBEL MARTINEZ ARGUELLO
P R E S E N T E S**

Me permito comunicarles que han sido designados integrantes del **COMITÉ REVISOR** del trabajo de:

TESIS

Titulado:

**VIBRACIONES MECANICAS EN ESTRUCTURAS
TIPO ZIG ZAG Y DESCANZABRAZO**

Que presenta el **C. SOTELO PARRA EDGAR GERARDO**

Del programa educativo de: **INGENIERÍA MECÁNICA**

A T E N T A M E N T E
Por una humanidad culta

**DRA. VIRIDIANA AYDEÉ LEÓN HERNÁNDEZ
DIRECTORA**

(SE ANEXA FIRMA ELECTRÓNICA)

D I C T A M E N

DRA. VIRIDIANA AYDEÉ LEÓN HERNÁNDEZ

DIRECTORA DE LA FCQeI

P R E S E N T E

En respuesta a su amable solicitud para emitir DICTAMEN sobre el trabajo que se menciona, me permito informarle que nuestro voto es:

VOTO	NOMBRE	FIRMA
	MTRO. JUAN MANUEL ZAGAL SANCHEZ	
APROBATORIO	DR. JUAN CARLOS GARCIA CASTREJON	
APROBATORIO	DR. JOSE ALFREDO ARIZA ESPINOZA	
APROBATORIO	MTRO. ANDRES AGUILAR NEGRETE	
APROBATORIO	DR. ANGEL MARBEL MARTINEZ ARGUELLO	

Se anexan firmas electrónicas

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

VIRIDIANA AYDEE LEON HERNANDEZ | Fecha:2021-06-02 17:29:37 | Firmante

JfLw63/QWxM9le1P1ssC5jSbRWgcelrSO9OXufhNfJXrJ+4vEdO2u2l0WJzo9h1RslRvBYdh18zkiSqCZwQhBQHTP7d444T319AwgcGrwgulu5a61LeryN6qu7FxpQQwZkxi8ZQh9gHm9x1an0Qh7xqGqT1OqCVI0YvnOlpb17Y1F4zqT9hLgS0YVB2HGzmuuGdZ1lkssbHFkkGkKCwBsHTIOqITNg8kVkl7L/4NQj/H8kUlbnJBFbu0IMUctqiafWCEG00SdsZanPpo1wO3OQZ9t6B+HLa3/75taWCQIO+18w23l2wE1vdjgU8JtOILYFdqxmXrznurMD8rL7Q==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



JqNg8a

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/RMuTyk8jqdloXF3mtCYhM3svCLn41rSI>



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

JOSE ALFREDO ARIZA ESPINOZA | Fecha:2021-06-07 15:49:23 | Firmante

bxlztw8JoMbf/mbGJUti2yfffi7P4aPzCN6xPM1XKd9C+cJ5Li4+3PhWTsoYZynwzD1pdM8cZLFC5a2CJioZJX5TgTOLT/jnYbBnN83i6XfDRZKqB7H3P9igBasN9v+yzlkjxxchsC4b
wS+7PT0WZrcG2xzUyG5aFVGpx73RAly1CHKm3f+KabrEckLJ4V7E1uSCwPjW8XzlnHrm47/sP4G1jsXwOoqbn0kjinDq1FzAzOMj02UKQLwq20FydfEb56eRdMUxZdHL6FDSk/x
ikgKmBXLWtOogH4bYhei5JglLalGKiGP9fUn8BTtD9tEz+0w0sVesNELXgvXuJkdyg==

JUAN CARLOS GARCIA CASTREJON | Fecha:2021-06-07 15:58:13 | Firmante

Qo2j7VmraxLzyAlfshGaTCsyR80/c+17qB25fYbTXAkdOQoU21DiyreRVuaDNnJogWizyjrBiuNop7e3+sx8B.JmZCs5v3OE5Fyls6X03ltkZv0LCr6OK4YBRVwF4ldNXkkKxsluv8oe
Z3vLatyofcMaFL28yNZFCSX1Vvrpl/logVKoQdTtAtCzJ718Ka3BtNs9yIMl/hlzZguJMdV7o7YL34N8q7Mj+pleXK85WwD4VBj0VsnmXWCnNvlsyR3XOelG+gvE7sJqwkark4ohvVw
6zBBGm7H4luKtAW9YP5CQgDKiAlbjLYGgAhwVQtCSzyZH9DNHEQyfdUWO2UPWA==

ANGEL MARBEL MARTÍNEZ ARGÜELLO | Fecha:2021-06-07 16:47:26 | Firmante

pJoipSwTnHF/USZG6YulKuMi1xHZvQN+FtWCMhOsF/ILzx5lWaxqwX6e5ap2zVf2W/QXoaKYN6qo+s/uCKe4lDQa6/uPz3/Pk4O/6MwwSqqAysOo8yz56xLsPCKDmr1mEi4unGu
vRR2amMgzUcBRkK2xt7u8NrnSPIGMfG/fuHgKXhfegVv4YBwashjM7mdKQA1Qte9+V8n3dF2NVxUOBF7TqrytZ9Xa6SSIB5Od2SVSYFUfUg6ysB+XbOrlJVto0W6laFY/jKU
fmYp0nRN5u2Y26itBQbOXpUn0cSHYjAEfQvUOPra/00lYDf23P59zpCt1NDEFAdMqPAgcw==

ANDRES AGUILAR NEGRETE | Fecha:2021-06-07 19:43:48 | Firmante

H5ziQb2F7+nzB+8P3taUpeYXC0r2YPB2avPXNHGhqH5fYzGbTP9WGaRn2BP9MyVsZW4zhloz8lIKMiXQDaV9W1pU5RDRmuNtz+WGIllwTivtzNqjbfzqDsILYrekL6lFdyyTxsUw
c5goDWiWHf2vnxqbLTPjH74O/WHwJlpNZhhKj6DbnE7BZG4EjRQ3lCd8PriVPcJ/w9ZZXBhPHEK0rhJBEWjKxn4UuUycwutRpJNVcgu2vp2gE/fyqJlTMKaHpqiJ0gScfYMQkbSF
HEqWZux44bprubVBka3PSmOKA+ECpZEGcSBj8NjPj/RSfilryoK7dkyepS7S+8PpfT5uQ==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o
escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



9p6Szd

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/tD8rvKBwrof5sayAiUHVtXp3C31QGaDv>

