

Índice general

1	Introducción		4 8	
2	Ecuación de Dirac-Weyl estacionaria Estudio clásico de guía de ondas			
3				11
	3.1	Caso o	clásico de potencial eléctrico	11
		3.1.1	Scattering potencial eléctrico. Paso de la región I a II	11
		3.1.2	Scattering potencial eléctrico. Paso a la región III	13
	3.2	Caso o	clásico de potencial magnético	15
		3.2.1	Scattering potencial magnético para valores de k positivos $\ . \ .$	15
		3.2.2	Scattering potencial magnético para valores de k negativos.	
			Caso 1	18
		3.2.3	Scattering potencial magnético para valores de k negativos.	
			Caso 2	19
4	Estudio cuántico de guía de ondas			23
	4.1	Caso o	cuántico de potencial eléctrico	23
		4.1.1	Scattering potencial eléctrico	24
		4.1.2	Estados confinados en potencial eléctrico	26
		4.1.3	Análisis de las soluciones	28
	4.2 Caso cuántico de potencial magnético		cuántico de potencial magnético	29
		4.2.1	Scattering potencial magnético	29
		4.2.2	Estados confinados en potencial magnético	31
		4.2.3	Análisis de las soluciones	33
5	5 Conclusiones			35

Abstract

In the present work, the stationary Dirac-Weyl equation for massless electrons in a graphene network is solved in the presence of electric and magnetic fields. The objective is to study the dynamics of electrons in graphene in the presence of an electric field and a magnetic field with a certain symmetry to know the scattering conditions and possible confinement states in the region of the graphene plane where these fields are applied. A study will be carried out from the classical and quantum point of view of scattering and electron confinement conditions for wells and barriers of both electrical and magnetic potential. To do this, the Dirac-Weyl equation is expressed in a more convenient form for our particular study and that will allow us to study the dynamics of the massless electron with an equation analogous to a Schrodinger-type equation. This contributes to a better understanding of the physics of the problem to be studied since, in this way, effective energy potentials can be defined as if it were a Schrodinger equation.

Resumen

En el presente trabajo se resuelve la ecuación de Dirac-Weyl estacionaria para electrones sin masa en una red de grafeno en presencia de campos eléctricos y magnéticos. El objetivo es estudiar la dinámica de los electrones en el grafeno en presencia de un campo eléctrico y un campo magnético con una cierta simetría para conocer las condiciones de scattering y de posibles estados de confinamiento en la región del plano del grafeno donde se aplican estos campos. Se hará un estudio desde el punto de vista clásico y cuántico del scattering y de las condiciones de confinamiento del electrón para pozos y barreras de potencial tanto eléctrico como magnético. Para ello, se expresa la ecuación de Dirac-Weyl en una forma más conveniente para nuestro estudio particular y que va a permitir estudiar la dinámica del electrón sin masa con una ecuación análoga a una ecuación de tipo Schrodinger. Esto contribuye a una mejor comprensión de la física del problema a estudiar pues, de esta forma, se pueden definir unos potenciales de energía efectivos como si de una ecuación de Schrodinger se tratara.

1 Introducción

El objetivo del presente trabajo es el estudio de la dinámica del electrón en el grafeno cuando es sometido a campos eléctricos y magnéticos con una configuración y simetría tales que pueden producir el efecto de estados confinados del electrón a modo de una guía de onda.

El carbono tiene cuatro formas cristalinas perfectas, entre ellas el grafito. El grafeno es un alótropo del carbono de un átomo de grosor, que constituye un entramado de átomos de carbono en forma de panal. De esta forma, se puede considerar el grafito como una pila de capas de grafeno. El carbono tiene cuatro electrones de valencia, tres de los cuales forman enlaces estrechos con átomos vecinos en el plano. Sin embargo, los portadores de carga del grafeno son especialmente singulares. Estos portadores imitan a partículas relativistas y se describen a partir de la ecuación de Dirac-Weyl en lugar de la ecuación de Schrodinger. La interacción de los electrones con la red de grafeno da lugar a nuevas cuasipartículas que, a bajas energías, se describen con precisión mediante la ecuación de Dirac-Weyl (2+1) dimensional, con una velocidad efectiva v_F . Estas cuasipartículas se denominan fermiones de Dirac sin masa. Pueden verse como electrones que han perdido su masa en reposo.

En el grafeno, el orbital 2s de cada átomo de carbono interactúa con los orbitales $2p_x$ y $2p_y$ para formar tres orbitales híbridos sp^2 . Las interacciones dan como resultado tres enlaces llamados enlaces σ , que son el tipo más fuerte de enlace covalente. Los enlaces σ tienen los electrones localizados a lo largo del plano que conecta los átomos de carbono y son responsables de las propiedades del grafeno. Los electrones $2p_z$ forman enlaces covalentes llamados enlaces π , donde la nube de electrones se distribuye normal al plano que conecta los átomos de carbono. Los electrones $2p_z$ están débilmente unidos a los núcleos y, por tanto, están relativamente deslocalizados. Estos electrones deslocalizados son los responsables de la propiedades electrónicas del grafeno.

El grafeno tiene una red en forma de panal. La longitud del enlace carbono-carbono es aproximadamente $a_{C-C} \approx 1,42$ Å. La red se puede caracterizar como una red de Bravais con una base de dos átomos, indicados como A y B en la figura 1.0.1, y estos contribuyen con un total de dos electrones π por celda unitaria a las propiedades electrónicas del grafeno. La red es hexagonal, y la celda unitaria primitiva puede considerarse un paralelogramo equilátero de lado $a = |a_1| = |a_2| = a_{C-C}\sqrt{3} \approx$ 2,46 Å.



Figura 1.0.1: Red de grafeno

Si nos centramos en la estructura de bandas del grafeno, debemos construir una función de onda adecuada que cumpla el teorema de Bloch, es decir, $\Psi(r+R) = e^{ikR}\Psi(r)$. A partir de esta función de onda, el cálculo posterior de las bandas de energía es sencillo. Así, la función de onda se construye en términos de combinaciones de orbitales atómicos. Para el grafeno, la función de onda es una combinación de dos funciones de Bloch de subred:

$$\Psi(k,r) = C_A \Phi_A(k,r) + C_B \Phi_B(k,r)$$

donde A y B denotan los dos tipos diferentes de átomos de carbono presentes en la celda unidad del grafeno. De esta manera, podemos considerar que la red del grafeno se compone de dos subredes de carbono equivalentes A y B, lo que da lugar a que los estados electrónicos se compongan de estados pertenecientes a las diferentes subredes, y sus contribuciones relativas se tengan en cuenta utilizando funciones de onda de dos componentes (espinores). De este modo, tendremos, por ejemplo, para el caso de la función de onda de tipo A

$$\Phi_A(k,r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j}^{N} e^{ikR_{Aj}} \phi\left(r - R_{Aj}\right)$$

siendo N el número de celdas unitarias en la red, R_{Aj} son los vectores que identifican las ubicaciones de todos los átomos de tipo A en el grafeno y $\phi(r - R_{Aj})$ las funciones de onda de los orbitales atómicos que son funciones ortonormales suficientemente localizadas como para que, a distancias cada vez más alejadas del punto central R_{Aj} , las funciones decaigan a cero rápidamente. Además, estas funciones $\Phi_A(k, r)$ también deben cumplir el teorema de Bloch.

Una vez definidas las funciones $\Phi_A(k,r)$ y $\Phi_B(k,r)$, teniendo en cuenta que cumplen el teorema de Bloch, así como unas condiciones de contorno, ya se puede construir la función $\Psi(k,r) = C_A \Phi_A + C_B \Phi_B$. Esta función de onda introducida en la ecuación de Schrodinger permite obtener un sistema de ecuaciones en los coeficientes C_A y C_B , con los que se calculan los valores de las bandas de energía en función de k. Las bandas de energía positiva y negativa obtenidas por la resolución de la ecuación se llaman bandas de conducción y bandas de valencia respectivamente. Las bandas de valencia y conducción tienen estructura similar, al menos para energías cercanas a la energía de Fermi. Dentro de este rango restringido, las bandas de energía son aproximadamente imágenes especulares. Esta simetría no se mantiene en una amplia gama de energías, sin embargo, esta aproximación es muy útil porque gran parte de la dinámica electrónica ocurre a lo largo de un rango relativamente pequeño de energías cercanas a la energía de Fermi. Debido a la ausencia de banda prohibida en el nivel de Fermi, y el hecho de que las bandas de conducción y valencia se tocan en la energía de Fermi, el grafeno es considerado un semiconductor semimetálico o de banda prohibida cero. El comportamiento de los electrones del grafeno en la energía de Fermi es de gran interés porque la estructura de bandas tiene una dispersión que es representativa de las llamadas partículas sin masa (partículas con masa efectiva cero). Y para partículas sin masa, la relatividad especial de Einstein tiene un importante papel en la forma de la ecuación de onda de la mecánica cuántica relativista de Dirac para describir la dinámica de las partículas. De aquí que, en el presente trabajo, se aborde el estudio con la ecuación de Dirac (y clásicamente con la relatividad especial) pero para partículas sin masa. Los puntos en los que la banda de conducción y la banda de valencia se tocan se llaman puntos de Dirac, y es en las proximidades de estos puntos en los que se cumple una relación lineal entre la energía y el momento, siendo la constante de proporcionalidad la velocidad de Fermi, v_F , que es el gradiente de la energía respecto del momento.



Figura 1.0.2: Izquierda: Espectro de energía. Derecha: Primer plano de las bandas de energía cerca de uno de los puntos de Dirac.

En este trabajo se aborda la resolución de la ecuación de Dirac-Weyl estacionaria para electrones sin masa en una red de grafeno en presencia de campos eléctricos y magnéticos. El objetivo es estudiar la dinámica de los electrones en presencia de un campo eléctrico y un campo magnético con una cierta simetría.

En la primera parte del trabajo se expresa la ecuación de Dirac-Weyl en una forma más conveniente para nuestro estudio particular. Esta forma de proceder va a permitir estudiar la dinámica del electrón sin masa con una ecuación análoga a una ecuación de tipo Schrodinger. La razón por la que se procede de esta forma estriba en una mejor comprensión de la física del problema a estudiar pues, de esta forma, se pueden definir unos potenciales de energía efectivos como si de una ecuación de Schrodinger se tratara.

Posteriormente se realiza el estudio desde el punto de vista clásico del scattering y de las condiciones en las que se puede dar confinamiento del electrón para pozos y barreras de potencial. En primer lugar se estudia el scattering para un pozo o barrera de potencial eléctrico constante. En este caso se verá que hay unas determinadas condiciones en la energía, el momento lineal y el valor del potencial que harán que la partícula se comporte dentro del pozo o barrera como si de una guía de onda se tratara, haciendo que la partícula quede confinada dentro de dicha región. En segundo lugar, se estudia el scattering para un pozo o barrera de un potencial vector magnético constante. Igualmente a como ocurre en el caso eléctrico, con el potencial vector magnético también se van a dar unas condiciones determinadas en la energía, momento lineal y potencial vector tales que la partícula permanece confinada en la región donde está presente el potencial vector.

La siguiente parte del trabajo se centra en el estudio del scattering y condiciones de confinamiento del electrón para potencial eléctrico y potencial vector magnético desde el punto de vista cuántico, mediante la resolución de la ecuación de Dirac-Weyl vista en la primera parte del trabajo. Primeramente se estudian las soluciones scattering de la ecuación diferencial de segundo orden para un potencial eléctrico constante, mediante la definición de un potencial de energía efectivo, y se obtienen los coeficientes de transmisión y reflexión. Después se buscan las soluciones que dan lugar al confinamiento del electrón volviendo a resolver la misma ecuación diferencial pero redefiniendo los parámetros que darán lugar a las condiciones en las que el electrón permanece confinado. Posteriormente, se obtienen las soluciones scattering y las que dan lugar al confinamiento del electrón pero con un potencial vector magnético constante, usando la misma ecuación diferencial en la que, también, se ha definido un potencial efectivo pero para un campo magnético.

Finalmente se concluye con un análisis y comparación de las soluciones obtenidas en las dos últimas partes del trabajo, es decir, aquellas que tratan sobre el scattering y el confinamiento abordados, primeramente, desde el estudio clásico y, posteriormente, desde el estudio cuántico.

Para la elaboración de la introducción se han usado las referencias [1] y [2], que son de carácter más general que el resto de los artículos empleados en este trabajo. En el estudio cuántico de las guías de onda tanto eléctricas como magnéticas así como el estudio de la ecuación de Dirac-Weyl se ha tomado la referencia [3]. Y en el resto del trabajo se han considerado las referencias [4] y [5], que son estudios algo más generales que el [3] pero que están directamente enfocados en el estudio del grafeno.

2 Ecuación de Dirac-Weyl estacionaria

La dinámica de baja energía para electrones sin masa y spin 1/2 con velocidad de Fermi en el grafeno viene descrita por la ecuación (2+1) dimensional de Dirac-Weyl (1). Buscaremos las soluciones analíticas de la ecuación en presencia de campos externos eléctrico y magnético con una cierta simetría. En concreto, vamos a considerar la simetría de los campos a lo largo de la dirección del eje 'y'; ambos campos son perpendiculares, el eléctrico estará en el plano xy, mientras que el magnético tendrá la dirección del eje z perpendicular al plano del grafeno.

$$v_F \left(\boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{p} + e\mathbf{A}\right)\right) \Psi \left(\mathbf{x}\right) = \left(E - V\left(\mathbf{x}\right)\right) \Psi \left(\mathbf{x}\right)$$
(2.0.1)

siendo $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ las matrices de Pauli, v_F la velocidad de Fermi, $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_x, \mathbf{p}_y)$ las dos componentes del operador momento en el plano xy, e la carga del electrón y $\mathbf{A}(\mathbf{x}), \mathbf{V}(\mathbf{x})$ los potenciales magnético y eléctrico, respectivamente; la función $\Psi(\mathbf{x})$ es un pseudospinor de dos componentes.

Tal y como han sido definidos anteriormente los potenciales eléctrico y magnético tendremos, para el caso del eléctrico que $V(\mathbf{x}) = V(x)$; y para el caso del magnético, sabiendo que el campo magnético debe ser perpendicular al plano del grafeno, es decir, en la dirección z, y como

$$\mathbf{B} = \mathbf{\nabla} \wedge \mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{B}_{z} = \partial_{x} \mathbf{A}_{y} - \partial_{y} \mathbf{A}_{x}$$

y puesto que hemos considerado una simetría a lo largo del eje 'y' tendremos que $\mathbf{A} = (0, A_y(x))$. De este modo, los campos eléctrico y magnético quedan determinados por los vectores:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\frac{dV(x)}{dx}\mathbf{e}_x; \ \mathbf{B}(x) = \partial_x A_y(x)\mathbf{e}_z$$

Así vemos que, tanto el vector campo eléctrico como el vector campo magnético van a depender sólo de la componente 'x'.

Vamos a considerar como función de onda solución de la ecuación (2.0.1) una función propia del operador momento $p_y = -i\hbar\partial_y$ con valor propio $\hbar k$, ya que

$$p_{y}\Psi\left(x,y\right) = -i\hbar\partial_{y}\Psi\left(x,y\right) = \hbar k\Psi\left(x,y\right) \Rightarrow i\partial_{y}\Psi\left(x,y\right) + k\Psi\left(x,y\right) = 0$$

$$\Psi(x,y) = e^{iky} \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ i\psi_2(x) \end{pmatrix}$$
(2.0.2)

Si, a continuación, reemplazamos todos los campos y operadores en la ecuación (2.0.1)

$$v_F\left[\left(\begin{array}{cc}0&1\\1&0\end{array}\right)p_x+\left(\begin{array}{cc}0&-i\\i&0\end{array}\right)(p_y+eA_y)\right]\Psi\left(\mathbf{x}\right)=(E-V)\Psi\left(\mathbf{x}\right)$$

obtenemos:

$$v_F \left(\begin{array}{cc} 0 & p_x - ip_y - ieA_y \\ p_x + ip_y + ieA_y & 0 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} e^{iky}\psi_1 \\ ie^{iky}\psi_2 \end{array}\right) = (E - V) \left(\begin{array}{c} e^{iky}\psi_1 \\ ie^{iky}\psi_2 \end{array}\right)$$

e introduciendo los operadores del momento lineal

$$v_F \left(\begin{array}{cc} 0 & -i\hbar\partial_x + i^2\hbar\partial_y - ieA_y \\ -i\hbar\partial_x - i^2\hbar\partial_y + ieA_y & 0 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} e^{iky}\psi_1 \\ ie^{iky}\psi_2 \end{array}\right) = (E-V) \left(\begin{array}{c} e^{iky}\psi_1 \\ ie^{iky}\psi_2 \end{array}\right)$$

A continuación, aplicamos los operadores sobre las exponenciales y simplificamos en ambos miembros de la ecuación la función exponencial:

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \partial_x + k + \frac{eA_y}{\hbar} \\ -\partial_x + k + \frac{eA_y}{\hbar} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = (E - V) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Si reordenamos las ecuaciones

$$\partial_x \psi_2 = \frac{E - V}{\hbar v_F} \psi_1 - k \psi_2 - \frac{eA_y}{\hbar} \psi_2$$
$$\partial_x \psi_1 = k \psi_1 + \frac{eA_y}{\hbar} \psi_1 - \frac{(E - V)}{\hbar v_F} \psi_2$$

y expresamos de nuevo de forma matricial

$$\begin{pmatrix} \partial_x & 0\\ 0 & \partial_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1\\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k + \frac{eA_y}{\hbar} & \frac{-(E-V)}{\hbar v_F}\\ \frac{E-V}{\hbar v_F} & -\left(k + \frac{eA_y}{\hbar}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1\\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Podemos simplificar la notación si llamamos

$$W(x) := k + \frac{eA_y}{\hbar}, \ \Delta(x) := \frac{E - V}{\hbar v_F}$$

y de esta forma

$$\partial_x \Psi_R(x) = M \Psi_R(x) \tag{2.0.3}$$

 siendo

$$M = \begin{pmatrix} W(x) & -\Delta(x) \\ \Delta(x) & -W(x) \end{pmatrix}; \Psi_R(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}$$

Si ahora diferenciamos la ecuación (2.0.3)

$$\partial_{xx}\Psi_R(x) = \frac{dM(x)}{dx}\Psi_R(x) + M\partial_x\Psi_R(x)$$
$$M' = \frac{dM}{dx}, \ \Delta' = \frac{d\Delta}{dx}$$

$$\partial_{xx}\Psi_R(x) = M'\Psi_R(x) + MM\Psi_R(x)$$
$$\partial_{xx}\Psi_R(x) = \left(M' + M^2\right)\Psi_R(x)$$
(2.0.4)

siendo

$$M' = \begin{pmatrix} W'(x) & -\Delta'(x) \\ \Delta'(x) & -W'(x) \end{pmatrix}; M^2 = \begin{pmatrix} W^2(x) - \Delta^2(x) & 0 \\ 0 & W^2(x) - \Delta^2(x) \end{pmatrix}$$

Así vemos que una de las matrices es diagonal y la otra lleva la parte no diagonal. Posteriormente se discutirán las opciones de diagonalización para desacoplar las ecuaciones.

3 Estudio clásico de guía de ondas

En este apartado nos proponemos discutir desde el punto de vista clásico los diferentes casos de scattering de un electrón que atraviesa una barrera de potencial. Veremos los casos en los que sólo tengamos una barrera/pozo de potencial eléctrico y sólo una barrera/pozo de potencial magnético.

3.1. Caso clásico de potencial eléctrico

En este caso vamos a suponer una barrera/pozo de potencial de la forma

$$\mathcal{V}(x) = \begin{cases} -v_0, & |x| < 1, \\ 0, & |x| > 1 \end{cases}$$

Hay, por tanto, tres regiones: I para x < -1, II para -1 < x < 1 y III para x > 1. Y, por otro lado, si $v_0 > 0$ será un pozo de potencial y en el caso de que $v_0 < 0$ será una barrera de potencial. Vamos a analizar el caso de una partícula clásica que incide desde la izquierda, es decir, desde x < -1, y cuyo valor de p_x esté comprendido entre cero e infinito. Estudiaremos el comportamiento del electrón en las fronteras de las tres regiones.

3.1.1. Scattering potencial eléctrico. Paso de la región I a II

Debemos tener en cuenta que la energía no permanece constante puesto que el electrón pasa a una una zona con un potencial diferente de cero. Supongamos que inicialmente la partícula tiene una energía E y un momento $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$; a la componente p_y le asignamos un valor constante $p_y = k$. La componente p_x , de acuerdo con la relación relativista (tomando c = 1)

$$E^2 = p_x^2 + p_y^2 \Rightarrow E^2 = p_x^2 + k^2 \Rightarrow p_x = \sqrt{E^2 - k^2}$$

Justo al otro lado de la frontera, en la región II, su energía efectiva valdrá $E' = E + v_0$. Y en cuanto a la componente p'_x en la región II, su expresión será

$$p'_x = \sqrt{(E+v_0)^2 - k^2}$$

el electrón se ve sometido a la acción de una fuerza eléctrica debido al gradiente de potencial que existe en la frontera. La fuerza que aparecerá hará que la cantidad de movimiento p_x se modifique. Es decir, aparece una fuerza favorable a la entrada en la región II si se trata de un pozo de potencial (se incrementa la cantidad de movimiento puesto que $p'_x > p_x$ al ser $v_0 > 0$) y desfavorable si se trata de una barrera (en este caso al ser $v_0 < 0 \Rightarrow p'_x < p_x$). Si nos fijamos ahora en la expresión de la componente horizontal del momento lineal, vemos que se deberá cumplir que

$$p_x = \sqrt{E^2 - k^2} \Rightarrow |E| > |k|$$

esto implica que p'_x tendrá en principio un valor mínimo cuando E = k, de valor

$$p'_{x,min} = \sqrt{(k+v_0)^2 - k^2}$$

Sin embargo, si se trata de una barrera de potencial $(v_0 < 0)$ el valor de $p'_{x,min}$ es complejo y, por tanto, la partícula no atravesará la barrera. En este último caso será necesario que la energía mínima para pasar a la región II con una barrera de potencial cumpla

$$|E + v_0| > |k|$$

Atendiendo a la expresión

$$p'_x = \sqrt{(E+v_0)^2 - k^2}$$

podemos analizar la situación en la que

$$|E + v_0| > |k| \ y \ |E| < |k|$$

En este caso, al imponer que |E| < |k| implica que es imposible que esté en la región I pero, si también se impone que $|E+v_0| > |k|$, entonces la partícula sí puede estar en la región II. Luego si la partícula tiene unos valores de la energía que cumplan estas últimas condiciones, permanecerá dentro de la región II. La partícula se encuentra con un gradiente de potencial desfavorable para salir de la región II puesto que su energía es insuficiente para superarlo. Por tanto, clásicamente, se da una situación concreta donde la partícula permanece en un estado confinado.

Ángulos de incidencia y salida

Podemos ahora considerar el estudio desde el punto de vista de los ángulos de incidencia y salida de la partícula al atravesar la frontera. Si llamamos α al ángulo de incidencia desde la región I y β al de salida a la región II:

$$\tan \alpha = \frac{p_y}{p_x} = \frac{k}{p_x} = \frac{k}{\sqrt{E^2 - k^2}}, \ \tan \beta = \frac{k}{p'_x} = \frac{k}{\sqrt{(E + v_0)^2 - k^2}} \Rightarrow \alpha > \beta$$

Así, si el ángulo de incidencia es cero entonces la componente p_y del momento lineal tanto en la región I como en la II es cero, por lo que k = 0, y en consecuencia

$$\tan \alpha = \tan \beta = 0 \Rightarrow \alpha = \beta = 0$$

Si el ángulo de incidencia ahora es de noventa grados

$$\tan \alpha \to \infty \Rightarrow p_x = 0 \Rightarrow E = k \Rightarrow \beta < \pi/2$$

En la figura 3.1.1 se ha representado tanto el ángulo de incidencia en la región I como el refractado en la región II en función de la energía. Tal y como puede verse, cuando el valor de la energía es próximo al valor de k el ángulo de incidencia tiende hacia el valor máximo, mientras que el ángulo refractado permanece siempre inferior al de incidencia. También puede verse la dependencia respecto al valor del potencial eléctrico. Para valores de potencial positivos, es decir, pozos de potencial, a mayor valor, mayor rango de valores de la energía en los que es posible tener estados confinados. En el caso de barreras de potencial se observa que no hay confinamiento y, además, el valor del ángulo de incidencia es inferior que el ángulo refractado, lo que indica la imposibilidad de atravesar la barrera a partir de un cierto ángulo de entrada a la región II.



Figura 3.1.1: Ángulos de incidencia y salida para diferentes valores de energía y potencial eléctrico. En verde se representa la curva de valores para el ángulo incidente, en azul el máximo ángulo de entrada, y en rojo el ángulo de salida. La zona sombreada corresponde a los valores en los que hay confinamiento.

3.1.2. Scattering potencial eléctrico. Paso a la región III

En el paso de la región II a la región III todo sucederá de manera análoga a la situación anterior pero en sentido inverso. Así, si ahora inicialmente los valores de

la energía y el momento lineal en la región II son, respectivamente,

$$E + v_0, \ p'_x = \sqrt{\left(E + v_0\right)^2 - k^2}$$

con $p'_y = k$, al llegar a la frontera de separación la componente p'_y no se verá afectada y, en la región III, la componente $p''_y = k$. Con la energía tendremos que, en la región III, volverá a valer lo mismo que en la región I, ya que ahora el potencial vuelve a valer cero después de pasar la frontera. Y con la componente p'_x ocurrirá que pasará a valer

$$p_x'' = \sqrt{E^2 - k^2} = p_x$$

puesto que ahora la partícula se enfrenta a un gradiente de potencial desfavorable (favorable si es una barrera) para pasar a la región III, por lo que su momento lineal p'_x disminuirá (aumentará para una barrera) hasta el valor que tenía inicialmente en la región I.

La figura 3.1.2 representa bajo qué condiciones de energía, momento lineal y potencial eléctrico se da confinamiento. En la gráfica (a) se observa que la región de confinamiento es simétrica respecto al momento lineal, puesto que la fuerza eléctrica no depende del signo del momento lineal. Las rectas que aparecen en verde y azul corresponden a las condiciones $|E| < |k| y |E + v_0| > k$, respectivamente, puestas como igualdades. De ahí que el vértice inferior cambiará de posición al modificar el valor del potencial, desplazándose más hacia abajo para mayor valor del potencial. En la gráfica (b) se ha representado la energía frente al potencial. También presenta simetría respecto al potencial debido al valor absoluto en la condición de confinamiento.



Figura 3.1.2: En sombreado se representa la zona donde se da confinamiento

3.2. Caso clásico de potencial magnético

En nuestro caso estamos considerando que el potencial vector magnético sólo tiene componente $A_y(x)$ y en consecuencia, como $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A} \Longrightarrow \mathbf{B} = (0, 0, \partial_x A_y(x))$. Y la expresión de la barrera/pozo del potencial vector magnético será de la forma:

$$\mathcal{A}_{y}(x) = \begin{cases} -a_{0}, & |x| < 1\\ 0, & |x| > 1 \end{cases}$$

Igual que sucedía con el caso eléctrico, también tenemos tres regiones: la región I para x < -1, la II para -1 < x < 1 y la III para x > 1. Y de manera equivalente al caso eléctrico si $a_0 < 0$ será una barrera y si $a_0 > 0$ será un pozo.

A diferencia del caso eléctrico, ahora la energía de la partícula no va a cambiar al pasar las dos fronteras de las regiones puesto que el campo magnético no modifica la energía del electrón. Además, el momento lineal sí se va a ver modificado al atravesar las fronteras. El campo magnético existente en las fronteras de separación es perpendicular al plano por el que se mueve la partícula y, teniendo en cuenta la característica de la fuerza de Lorentz, la partícula se verá desviada de la trayectoria de una manera o de otra dependiendo de la componente p_y del momento lineal. A esta componente, como en el caso eléctrico, le vamos a asignar el valor k. A diferencia del caso eléctrico, ya no existe simetría en cuanto a la dirección de la componente p_y sea positiva y negativa (cuando k > 0 y k < 0). La razón está en que la fuerza de Lorentz de la partícula, dirección que va estar determinada por el momento lineal. Vamos a considerar también que la partícula incide desde la izquierda.

3.2.1. Scattering potencial magnético para valores de k positivos

Tal y como hicimos en el caso eléctrico analizaremos qué ocurre con la partícula al atravesar las dos fronteras que separan las regiones.

Paso de la región I a la II

En el paso de la región I a la II la energía de la partícula, al tratarse de un campo magnético, no se va a ver modificada. Vamos a considerar que la energía y las componentes del momento lineal en la región I son, respectivamente, E, p_x, k . Estas magnitudes estarán relacionadas a través de

$$E^2 = p_x^2 + k^2 \Longrightarrow p_x = \sqrt{E^2 - k^2}$$

para partículas relativistas de masa cero (tomando c = 1). Por tanto, en principio la energía debe tener al menos un valor mínimo $|E| \ge |k|$. A diferencia del caso eléctrico, ahora la componente del momento lineal p_y sí va a cambiar al pasar a la región II:

$$p_y' = p_y - \mathcal{A}_y = k + a_0$$

Así, la componente del momento lineal en la región II tendrá la expresión

$$p'_x = \sqrt{E^2 - (k + a_0)^2}$$

Es necesario que la energía de la partícula sea superior a un determinado valor para que pueda pasar la frontera. Ese valor mínimo de la energía será

$$|E| \ge |k + a_0|$$

Luego, para que sea posible el paso a la región II la energía mínima debe ser $k + a_0$ y no k como se había propuesto al principio, por lo que el p_x mínimo será

$$p_{x,min} = \sqrt{\left(k + a_0\right)^2 - k^2}$$

De esta última condición vemos que

$$|k+a_0| > |k|$$

si $a_0 > 0$. Pero en el caso de una barrera, como estamos considerando k > 0, y el momento lineal p'_y en la región II pasa a valer $k - |a_0|$, el valor de p_x será complejo, ya que $|E| > |k + a_0| < |k|$, y se dará la situación de confinamiento al ser imposible que esté la partícula en la región I pero sí en la región II.

Angulos de incidencia y salida

Si ahora consideramos el estudio desde el punto de vista de los ángulos de incidencia y salida de la partícula al atravesar la frontera entre las regiones I y II, llamando α al ángulo de incidencia y β al de salida a la región II, tenemos:

$$\tan \alpha = \frac{|k|}{p_x} \le \frac{|k|}{p_{x,min}} \Rightarrow \begin{cases} \frac{|k|}{\sqrt{(|k|+a_0)^2 - k^2}} = \tan \alpha_{max} & a_0 > 0\\ \alpha_{max} = \frac{\pi}{2} & a_0 < 0 \end{cases}$$

$$\tan \beta = \frac{p'_y}{p'_x} = \frac{|k| + a_0}{\sqrt{E^2 - (|k| + a_0)^2}}; E = |k| + a_0 \Rightarrow \beta_{max} = \frac{\pi}{2}$$

De esta forma, si la partícula se acerca a la frontera de separación entre las regiones I y II con una energía superior a la mínima y una dirección tal que su segunda componente del momento lineal sea positiva, al llegar a la frontera experimentará una fuerza debido a la variación del potencial vector magnético en forma de escalón que hay en la separación entre las regiones. Esta variación del potencial vector se traduce en un campo magnético perpendicular al plano que, por acción de la fuerza de Lorentz, provoca una desviación de la partícula en un ángulo β . Si la energía tiene el valor mínimo, entonces el máximo ángulo de desviación en la región II será de $\pi/2$ y, en consecuencia, la partícula se moverá sobre la frontera y no pasará a la región II. Para energías inferiores a la mínima la partícula se verá sometida a una reflexión sobre la frontera de separación, regresando de nuevo a la región I. Esto es así porque la dirección del vector momento lineal es tal que, al verse sometido a un campo magnético perpendicular al plano, da lugar a una fuerza de Lorentz cuya dirección está en el plano pero que expulsa a la partícula de nuevo a la región I.



Figura 3.2.1: Ángulos de incidencia y salida para diferentes valores de la energía y el potencial vector. En verde se representa la curva de valores para el ángulo incidente, en azul el máximo ángulo de entrada, y en rojo el ángulo de salida. La zona sombreada corresponde a los valores para los que se da confinamiento.

En la figura 3.2.1 puede verse que, elegido un valor de k constante, sólo aparece confinamiento cuando se trata de barreras de potencial. En este caso el ángulo de incidencia siempre es superior al de refracción. Sin embargo, en los casos en los que hay un pozo de potencial no se produce confinamiento y el ángulo de incidencia es inferior al de refracción debido a la tendencia del potencial vector magnético a expulsar a la partícula. De hecho, para valores del ángulo de incidencia cercanos a su máximo se observa que el ángulo refractado se acerca a los 90°, es decir, que al llegar al máximo de incidencia la partícula no pasa a la región II.

Paso de la región II a la III

En el paso de la región II a la III, también la energía permanece constante y variará el momento lineal. Como ya se ha visto antes sólo pasará a la región II cuando la energía sea superior a $|k + a_0|$, por lo que sólo se pueden considerar energías superiores a la mínima. Así, si en la región II la componente del momento

lineal p'_y era $k + a_0$, al atravesar la frontera de separación entre las regiones II y III volverá a sufrir una variación de signo opuesto al del paso por la frontera entre I y II, por lo que

$$p''_y = k + a_0 - a_0 = k = p_y$$

Y de igual manera,

$$p''_{x} = \sqrt{E^{2} - (p'_{y} - a_{0})^{2}} = \sqrt{E^{2} - (k + a_{0} - a_{0})^{2}} = p_{x}$$

En el momento de atravesar la frontera la partícula se ve sometida a un campo magnético perpendicular al plano que, por acción de la fuerza de Lorentz, desvía la trayectoria de la partícula emergiendo a la región III con un ángulo igual al de incidencia en la región I. Como se ha podido analizar, en ningún caso tenemos a la partícula confinada dentro de la región II.

3.2.2. Scattering potencial magnético para valores de k negativos. Caso 1

En este primer caso se considera que la segunda componente del momento lineal en la región II es negativa, es decir, $p'_y < 0$. Ahora la partícula se va a dirigir a la frontera de separación en una dirección tal que la componente segunda del momento lineal es negativa. Esto cambiará algunas situaciones respecto al caso anterior.

Consideremos que la energía y el momento lineal en la región I son $E, p_x, p_y = k$ y, como en el caso anterior

$$E^2 = p_x^2 + k^2 \Longrightarrow p_x = \sqrt{E^2 - k^2}$$

A continuación, obtenemos la expresión para el momento lineal en la región II considerando que, al igual que en el caso anterior, la energía no cambia y la componente del momento lineal p_y experimenta un cambio

$$p_y' = p_y - \mathcal{A}_y = k + a_0$$

Por tanto, la expresión de la componente del momento lineal p_x^\prime en la región II será

$$p'_x = \sqrt{E^2 - p'^2_y}$$

Si $p'_{y} < 0$ tendremos que

$$k + a_0 < 0$$

Esta condición se cumple siempre que tengamos una barrera porque $a_0 < 0$, pero no siempre en un pozo (donde $a_0 > 0$). Por tanto,

$$p'_x = \sqrt{E^2 - (k + a_0)^2}$$

y el valor mínimo que debe tener p'_x corresponderá cuando

$$E = k + a_0$$

ya que

$$p_x = \sqrt{(k+a_0)^2 - k^2}$$

condición que se cumplirá siempre que $a_0 < 0$ (barrera de potencial) y no se cumplirá en pozos de potencial. De este modo, $p'_x > p'_{x,min}$ y, en consecuencia, la partícula atraviesa la frontera de separación. Nunca la atravesará si se trata de un pozo de potencial.

Angulos de incidencia y salida

Desde el punto de vista de los ángulos de incidencia en la región I, α , y salida a la región II, β , tendremos:

$$\tan \alpha = \frac{-|k|}{p_x} \le \frac{-|k|}{p_{x,minimo}} = \frac{-|k|}{\sqrt{(-|k| - |a_0|)^2 - k^2}} = \tan \alpha_{max}$$
$$\tan \beta = \frac{p'_y}{p'_x} = \frac{-|k| - |a_0|}{\sqrt{E^2 - (-|k| - |a_0|)^2}}; E = -|k| - |a_0| \Rightarrow \beta_{max} = \frac{\pi}{2}$$

3.2.3. Scattering potencial magnético para valores de k negativos. Caso 2

Ahora, en este segundo caso, se aborda la situación en la que la segunda componente del momento lineal es positiva, es decir, $p'_y > 0$. Así, si $p'_y > 0$ tendremos que

$$-|k| + a_0 > 0 \Rightarrow a_0 > |k|$$

Y esta condición sólo se puede cumplir si $a_0 > 0$, es decir, para pozos de potencial. En este caso no puede atravesar una barrera de potencial. Sin embargo, aquí se pueden dar dos casos:

• Que $p'_y < |k|$, en consecuencia,

$$0 < -|k| + |a_0| < |k| \Rightarrow |k| < |a_0| < 2|k|$$

De la expresión de $p_{x,\min}'$ se tiene que $p_x' > p_{x,\min}'$ si

$$|E| > |k + a_0|$$

pero en esta situación también se cumple que, al ser k < 0 y $a_0 > 0,$

$$|E| < |k|$$

y encontramos que

$$p_x = \sqrt{\left(-|k| + |a_0|\right)^2 - k^2}$$

no tiene solución real, luego estamos en una situación donde la partícula permanece confinada en la región II. • Que $p'_y > |k|$ implica que

$$-|k| + |a_0| > |k| \Rightarrow |a_0| > 2|k|$$

Y, en este caso, con una energía

$$E = -|k| + |a_0|$$

sería posible que la partícula pase a la región II, puesto que ahora

$$p_x = \sqrt{\left(-|k| + |a_0|\right)^2 - k^2}$$

con $|a_0| > 2|k|$, no tiene un valor complejo como en el caso anterior.

Ángulos de incidencia y salida

En términos de los ángulos de incidencia y salida:

$$\tan \alpha = \frac{-|k|}{p_x} \le \frac{-|k|}{p_{x,minimo}} = \frac{-|k|}{\sqrt{(-|k|+|a_0|)^2 - k^2}} = \tan \alpha_{max}$$
$$\tan \beta = \frac{p'_y}{p'_x} = \frac{-|k|+|a_0|}{\sqrt{E^2 - (-|k|+|a_0|)^2}}; E = -|k|+|a_0| \Rightarrow \beta_{max} = \frac{\pi}{2}$$

En la figura 3.2.2 se han representado cuatro situaciones correspondientes al mismo valor de k < 0 pero diferentes valores del potencial vector magnético. En la gráfica (a), al tratarse de una barrera, no aparece zona de confinamiento, que sí se da en las gráficas (b) y (c). En estas dos, hay un pozo de potencial con diferente valor en cada una de ellas. Un mayor valor del potencial vector hace que el ángulo de refracción pase a tener valores positivos. En la gráfica (d), el valor del potencial vector es superior al doble del valor absoluto de k, lo que hace que, no sólo el ángulo de refracción siga siendo positivo, también implica que no se dé confinamiento de la partícula. Tanto en la gráfica (c) como en la (d) los ángulos de refracción son bastante pequeños y positivos hasta que el ángulo de incidencia se aproxima a su valor máximo; es en ese momento en el que el ángulo de refracción en (d) aumenta más rápido llegando a alcanzar valores en los que la partícula se quedaría en la zona de separación de las dos regiones.



Figura 3.2.2: Ángulos de incidencia y salida para distintos valores de la energía y el potencial vector. En verde se representa la curva de valores para el ángulo incidente, en azul el máximo ángulo de entrada, y en rojo el ángulo de salida. La zona sombreada corresponde a los valores en los que hay confinamiento.

La figura 3.2.3 representa las zonas de confinamiento en función de la energía, el momento lineal y el potencial vector magnético. La gráfica (a) representa la energía frente al momento para un valor fijo del potencial vector. Las rectas que aparecen en verde y azul corresponden a las condiciones |E| < |k| y $|E| > |k + a_0|$, respectivamente, puestas como igualdades. Se observa ahora que la simetría en la zona de confinamiento ha cambiado respecto a la que se daba con el potencial eléctrico. Esto es así porque la energía no se ve modificada por la acción del potencial vector magnético.



Figura 3.2.3: Representación en sombreado de las zonas en las que existe confinamiento

4 Estudio cuántico de guía de ondas

Después de un análisis clásico de las barreras/pozos de potencial eléctrico y magnético es momento de abordar el estudio desde el punto de vista cuántico haciendo uso de la ecuación de Dirac-Weyl (2.0.1), que para nuestro estudio particular se concreta en la ecuación (2.0.4). Recordemos brevemente esta última ecuación y los parámetros a ella asociados:

$$\partial_{xx}\Psi_{R}\left(x\right) = \left(M' + M^{2}\right)\Psi_{R}\left(x\right)$$

donde

$$M' = \begin{pmatrix} W'(x) & -\Delta'(x) \\ \Delta'(x) & -W'(x) \end{pmatrix}; M^{2} = \begin{pmatrix} W^{2}(x) - \Delta^{2}(x) & 0 \\ 0 & W^{2}(x) - \Delta^{2}(x) \end{pmatrix}$$

siendo la prima la derivada respecto de x,

$$W(x) := k + \frac{eA_y}{\hbar} := k + \mathcal{A}_y(\mathbf{x}); \ \Delta(x) := \frac{E - V}{\hbar v_F} := \varepsilon - \mathcal{V}(\mathbf{x})$$

4.1. Caso cuántico de potencial eléctrico

Igual que en el estudio clásico, suponemos como en el caso clásico un potencial eléctrico de la forma:

$$\mathcal{V}(\mathbf{x}) = \begin{cases} -v_0, & |x| < 1, \\ 0, & |x| > 1 \end{cases}$$

Como no hay presencia de campo magnético la ecuación (2.0.4) quedará simplificada de la siguiente forma:

$$\partial_{xx}\Psi_R(x) = \left[\begin{pmatrix} 0 & -\Delta'(x) \\ \Delta'(x) & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k^2 - \Delta^2(x) & 0 \\ 0 & k^2 - \Delta^2(x) \end{pmatrix} \right] \Psi_R(x)$$
(4.1.1)

donde ahora $W(x) = k \Rightarrow W'(x) = 0$, así como $\Delta(x) = \varepsilon - \mathcal{V}(x) \Rightarrow \Delta'(x) = -\mathcal{V}'(x)$.

Para proceder a su resolución debemos diagonalizar la matriz

$$M' = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta'(x) \\ \Delta'(x) & 0 \end{pmatrix} = \mathcal{V}'(x) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Si calculamos los valores propios de la matriz $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$, obtenemos $\lambda = \pm i$, a los que corresponde como vectores propios $\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$. Por tanto, la matriz de

cambio de base será

$$T = \left(\begin{array}{cc} 1 & 1\\ i & -i \end{array}\right)$$

de tal forma que la nueva matriz ${\cal M}$ diagonalizada resulta

$$\widetilde{M'} = T^{-1}M'T = \mathcal{V}'(x) \begin{pmatrix} -i & 0\\ 0 & i \end{pmatrix}$$

Esta diagonalización implica un cambio de base, que afectará a Ψ_R de la forma

$$\widetilde{\Psi}_R = T^{-1}\Psi_R = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \widetilde{\psi}_1 = \frac{1}{2} (\psi_1 - i\psi_2) \\ \widetilde{\psi}_2 = \frac{1}{2} (\psi_1 + i\psi_2) \end{cases}$$

Y el sistema dado por la ecuación (4.1.1) resulta

$$\partial_{xx} \widetilde{\Psi} = \left(\widetilde{M'} + \widetilde{M}^2\right) \widetilde{\Psi}$$
$$\begin{cases} \partial_{xx} \widetilde{\psi}_1 = \left(-i\mathcal{V'} + k^2 - (\varepsilon - \mathcal{V})^2\right) \widetilde{\psi}_1\\ \partial_{xx} \widetilde{\psi}_2 = \left(i\mathcal{V'} + k^2 - (\varepsilon - \mathcal{V})^2\right) \widetilde{\psi}_2 \end{cases}$$

Si ahora introducimos la expresión para $\mathcal{V}(x)$, y consideramos sólo la ecuación de $\widetilde{\psi}_1$:

$$-\partial_{xx}\widetilde{\psi}_{1}(x) + V_{ef}(x)\widetilde{\psi}_{1}(x) = \varepsilon^{2}\widetilde{\psi}_{1}(x); \quad p_{x}^{2} = \varepsilon^{2} - k^{2}$$

$$V_{ef} = \begin{cases} -iv_{0}\delta(x+1) + iv_{0}\delta(x-1) - 2v_{0}\varepsilon - v_{0}^{2} & |x| \leq 1 \\ k^{2} & |x| > 1 \end{cases}$$
(4.1.2)

Al igual que en el caso clásico, tendremos las tres regiones en las que resolver la ecuación (4.1.2). La expresión de V_{ef} introduce no sólo el desarrollo del cuadrado del binomio que contiene la energía de la partícula y el potencial eléctrico $(\varepsilon - \mathcal{V})^2$, también introduce la función delta de Dirac. Es la derivada del escalón de potencial la que da cuenta de la aparición de la función delta de Dirac con peso iv_0 , y que nos dará lugar a una de las condiciones que hay que exigir para el cálculo de la solución, que es el cambio en la derivada de la función solución en los puntos donde cambia el potencial. Este cambio será necesariamente el valor del peso de la delta de Dirac, iv_0 . También hay que exigir la continuidad de la función solución en los mismos puntos. Por tanto, las dos condiciones son:

$$\widetilde{\psi}_{1,I}(-1) = \widetilde{\psi}_{1,II}(-1); \ \partial_x \widetilde{\psi}_{1,I}(-1) - iv_0 \widetilde{\psi}_{1,I}(-1) = \partial_x \widetilde{\psi}_{1,II}(-1)$$
$$\widetilde{\psi}_{1,II}(1) = \widetilde{\psi}_{1,III}(1); \ \partial_x \widetilde{\psi}_{1,II}(1) + iv_0 \widetilde{\psi}_{1,II}(1) = \partial_x \widetilde{\psi}_{1,III}(1)$$

4.1.1. Scattering potencial eléctrico

Veamos primeramente las soluciones generales por regiones:

• Región I (x < -1):

$$\partial_{xx}\widetilde{\psi}_{1,I}\left(x\right) = -p_{x}^{2}\widetilde{\psi}_{1,I}\left(x\right) \Rightarrow \widetilde{\psi}_{1,I} = \alpha_{I}e^{-ip_{x}x} + \beta_{I}e^{ip_{x}x}$$

donde las soluciones son del tipo onda asociada a partícula libre incidente y reflejada. Aquí vemos que $p_x = \sqrt{\varepsilon^2 - k^2}$ es el momento lineal de la partícula. Como en el caso clásico, si $|\varepsilon| < |k|$ entonces el momento lineal es complejo.

• Región II (-1 < x < 1):

$$\partial_{xx}\widetilde{\psi}_{1,II}\left(x\right) = (-2v_0\varepsilon - v_0^2 - \varepsilon^2 + k^2)\widetilde{\psi}_{1,II}\left(x\right) \Rightarrow \partial_{xx}\widetilde{\psi}_{1,II}\left(x\right) = -p_x'^2\widetilde{\psi}_{1,II}\left(x\right)$$

siendo $p'^2_x = (\varepsilon + v_0)^2 - k^2$. Así, las soluciones son:

$$\widetilde{\psi}_{1,II} = \alpha_{II} e^{-ip'_x x} + \beta_{II} e^{ip'_x x}$$

• Región III (x > 1):

$$\partial_{xx}\widetilde{\psi}_{1,III}\left(x\right) = -p_{x}^{2}\widetilde{\psi}_{1,III}\left(x\right) \Rightarrow \widetilde{\psi}_{1,III} = \alpha_{III}e^{-ip_{x}x} + \beta_{III}e^{ip_{x}x}$$

solución que coincide con la de la región I, es decir, de tipo onda asociada a una partícula libre.

Si queremos obtener los coeficientes de transmisión y de reflexión debemos exigir que la función de onda sea continua y derivable en los puntos x = -1 y x = 1:

$$\alpha_{I}e^{ip_{x}} + \beta_{I}e^{-ip_{x}} = \alpha_{II}e^{ip'_{x}} + \beta_{II}e^{-ip'_{x}}$$
$$-\alpha_{I}ip_{x}e^{ip_{x}} + \beta_{I}ip_{x}e^{-ip_{x}} = -\alpha_{II}ip'_{x}e^{ip'_{x}} + \beta_{II}ip'_{x}e^{-ip'_{x}}$$
$$\alpha_{II}e^{-ip'_{x}} + \beta_{II}e^{ip'_{x}} = \alpha_{III}e^{-ip_{x}} + \beta_{III}e^{ip_{x}}$$
$$-\alpha_{II}ip'_{x}e^{-ip'_{x}} + \beta_{II}ip'_{x}e^{ip'_{x}} = -\alpha_{III}ip_{x}e^{-ip_{x}} + \beta_{III}ip_{x}e^{ip_{x}}$$

Resolviendo el sistema, con $\alpha_{III} = 0$, en función del parámetro β_I obtenemos los coeficientes de transmisión y reflexión:

$$T_e = \left|\frac{\beta_{III}}{\beta_I}\right|^2 = \frac{4p_x^2 p_x'^2}{4p_x^2 p_x'^2 \cos^2\left(2p_x'\right) + \left(p_x'^2 + p_x^2\right)^2 \sin^2\left(2p_x'\right)}$$
$$R_e = \left|\frac{\alpha_I}{\beta_I}\right|^2 = \frac{\left(p_x'^2 - p_x^2\right)^2 \sin^2\left(2p_x'\right)}{4p_x^2 p_x'^2 \cos^2\left(2p_x'\right) + \left(p_x'^2 + p_x^2\right)^2 \sin^2\left(2p_x'\right)}$$

La figura 4.1.1 representa el coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia para diferentes valores del potencial eléctrico. Se observa que a medida que el valor del potencial eléctrico se acerca a cero la gráfica del coeficiente es más plana y muy cercana al valor 1; y cuando se trata de potenciales que cumplen $v_0 < 0$, es decir, barreras de potencial, donde clásicamente no hay paso a la región II, aquí también se observa que el coeficiente de transmisión va a cero. Es decir, no se aprecia un efecto túnel. También es de destacar que se producen resonancias en el coeficiente de transmisión que hacen que alcanze el valor máximo, es decir, la unidad, cuando el valor del momento lineal que aparece en las funciones seno y coseno del denominador en la expresión del coeficiente de transmisión es tal que cancela la función seno. De alguna manera hay un cierto impedimento al paso a través de la región II.



Figura 4.1.1: Coeficiente de transmisión frente al ángulo de incidencia

4.1.2. Estados confinados en potencial eléctrico

Las soluciones para estados confinados son:

Región I:

$$\partial_{xx}\widetilde{\psi}_{1,I} = p_x^2\widetilde{\psi}_{1,I} \Longrightarrow \widetilde{\psi}_{1,I} = Ae^{p_x x}, \ p_x = \sqrt{k^2 - \varepsilon^2} > 0$$

• Región II:

$$\begin{aligned} &-\partial_{xx}\widetilde{\psi}_{1,II} + \left(-2v_0\varepsilon - v_0^2\right)\widetilde{\psi}_{1,II} = (\varepsilon^2 - k^2)\widetilde{\psi}_{1,II} \Longrightarrow \widetilde{\psi}_{1,II} = Ce^{ip'_x x} + De^{-ip'_x x} \\ &\text{siendo } p'_x = \sqrt{\left(\varepsilon + v_0\right)^2 - k^2} > 0 \end{aligned}$$

• Región III:

$$-\partial_{xx}\widetilde{\psi}_{1,III} = -p_x^2\widetilde{\psi}_{1,III} \Longrightarrow \widetilde{\psi}_{1,III} = Fe^{-p_xx}, \ p_x = \sqrt{k^2 - \varepsilon^2} > 0$$

Teniendo en cuenta las dos condiciones que deben cumplir las funciones solución se llega a las siguientes ecuaciones para determinar los parámetros A, C, D y F:

$$Ae^{-p_{x}} = Ce^{-ip'_{x}} + De^{ip'_{x}}$$

$$Ap_{x}e^{-p_{x}} = iv_{0}Ae^{-p_{x}} + Cip'_{x}e^{-ip'_{x}} - Dip'_{x}e^{ip'_{x}}$$

$$Ce^{ip'_{x}} + De^{-ip'_{x}} = Fe^{-p_{x}}$$

$$Cip'_{x}e^{ip'_{x}} - Dip'_{x}e^{-ip'_{x}} = -Fp_{x}e^{-p_{x}} - iv_{0}\left(Ce^{ip'_{x}} + De^{-ip'_{x}}\right)$$

Para que exista solución distinta de la trivial, el determinante de la matriz de los coeficientes debe ser igual a cero. Esto implica una relación de los parámetros p_x, p'_x y v_0 (o lo que es equivalente, de los parámetros $k, \varepsilon \neq v_0$) que resulta:

$$\tan 2p'_x = \frac{2p_x p'_x}{p'^2_x - p^2_x - v_0^2}$$
$$\sqrt{k^2 - \varepsilon^2} \sqrt{(\varepsilon + v_0)^2 - k^2} = \left[\varepsilon \left(\varepsilon + v_0\right) - k^2\right] \tan 2\sqrt{(\varepsilon + v_0)^2 - k^2}$$

Esta última igualdad es la condición que deben cumplir las soluciones en el caso de estados confinados. Sus soluciones nos dan el espectro discreto de energías posibles, es decir, la cuantización.

En las gráficas de la figura 4.1.2 se representan en sombreado las zonas de confinamiento, tal y como se representaron en el estudio clásico, pero donde ahora se observa la discretización de la energía. Si en cualquiera de las gráficas se fija un valor, bien de k o bien de v_0 , entonces el número de estados de energía posibles será sólo de hasta tres valores diferentes. Esto claramente contrasta con el estudio clásico donde existe un espectro continuo de energía.



Figura 4.1.2: Representación del espectro de energías para k = 2 y $v_0 = 3$



Figura 4.1.3: Representación de la parte real de la función de onda en dos niveles diferentes de energía excitados para estados confinados correspondientes a k = 2 y $v_0 = 3$

4.1.3. Análisis de las soluciones

A continuación, vamos a analizar las soluciones obtenidas en cada región y comparar las situaciones con el caso clásico.

• Región I: en el momento de obtener la solución, puesto que hemos estudiado el caso en el que la partícula está confinada, la exponencial debe ser decreciente cuando x tiende a menos infinito. Por esta razón, $p_x = \sqrt{k^2 - \varepsilon^2} > 0$, lo que implica que la energía debe tener un valor inferior al momento lineal, $|\varepsilon| < |k|$. Clásicamente también obtuvimos que, en la región I, la energía debía tener un valor inferior a |k|.

Si no hubiéramos exigido que $p_x > 0$, entonces la exponencial sería compleja, donde ahora $|\varepsilon| > |k|$, y sería la solución para una onda plana que una parte se transmite a la siguiente región y otra se refleja en la frontera de separación, tal y como se estudió clásicamente.

 Región II: en esta región, la función de onda solución son exponenciales complejas correspondientes a soluciones tipo onda transmitida y reflejada, que están confinadas en un pozo/barrera de anchura fija. La cuantización de la energía viene determinada al exigir que tengamos dentro de la anchura del pozo/barrera un número entero de semilongitudes de onda.

Por otra parte, la condición $p'_x = \sqrt{(\varepsilon + v_0)^2 - k^2} > 0$ implica que $|\varepsilon + v_0| > |k|$, condición que también se da en el caso clásico.

 Región III: de manera análoga a la región I, la exponencial solución debe ser decreciente para estados confinados. Esto implica la misma condición que en la región I. También, en el caso de que |ε| > |k|, la solución corresponderá a una onda plana.

4.2. Caso cuántico de potencial magnético

Supondremos, análogamente al caso eléctrico, un potencial vector magnético de la forma:

$$\mathcal{A}_{y}(x) = \begin{cases} -a_{0}, & |x| < 1\\ 0, & |x| > 1 \end{cases}$$

Como ahora no hay presencia del campo eléctrico, la ecuación (2.0.4) será de la forma:

$$\partial_{xx}\Psi_{R}(x) = \begin{pmatrix} W'(x) & 0\\ 0 & -W'(x) \end{pmatrix} \Psi_{R}(x) + \begin{pmatrix} W^{2} - \varepsilon^{2} & 0\\ 0 & W^{2} - \varepsilon^{2} \end{pmatrix} \Psi_{R}(x)$$

donde

$$W(x) := k + \frac{e}{\hbar} A_y(x) := k - \mathcal{A}_y(x); \quad W'(x) = -\mathcal{A}'_y(x)$$
$$\partial_{xx} \Psi_R(x) = \begin{pmatrix} -\mathcal{A}'_y(x) + (k - \mathcal{A}_y(x))^2 - \varepsilon^2 & 0\\ 0 & \mathcal{A}'_y(x) + (k - \mathcal{A}_y(x))^2 - \varepsilon^2 \end{pmatrix} \Psi_R(x)$$

De este sistema de ecuaciones resolvemos la primera de las ecuaciones que nos dará como solución la función ψ_1 :

$$-\partial_{xx}\psi_{1}(x) + (-\mathcal{A}'_{y}(x) + (k - \mathcal{A}_{y}(x))^{2})\psi_{1}(x) = \varepsilon^{2}\psi_{1}(x)$$
(4.2.1)

Si desarrollamos el cuadrado del binomio, introducimos un potencial efectivo como en el caso eléctrico y particularizamos para el pozo de potencial vector magnético:

$$V_{ef} = \begin{cases} -a_0 \delta (x+1) + a_0 \delta (x-1) + a_0^2 + 2ka_0 & |x| < 1\\ k^2 & |x| > 1 \end{cases}$$
$$-\partial_{xx} \psi_1 (x) + V_{ef} \psi_1 (x) = \varepsilon^2 \psi_1 (x) , \quad p_x^2 = \varepsilon^2 - k^2 \end{cases}$$

4.2.1. Scattering potencial magnético

Al igual que en el caso eléctrico, obtengamos primero las soluciones generales:

• Región I (x < -1):

$$\partial_{xx}\psi_{1,I}\left(x\right) = -p_{x}^{2}\psi_{1,I}\left(x\right) \Rightarrow \psi_{1,I} = \alpha_{I}'e^{-ip_{x}x} + \beta_{I}'e^{ip_{x}x}$$

solución que corresponde a la de una onda asociada a una partícula libre con momento $p_x = \sqrt{\varepsilon^2 - k^2}$.

• Región II (-1 < x < 1):

$$\partial_{xx}\psi_{1,II}(x) = \left(k^2 + a_0^2 + 2ka_0 - \varepsilon^2\right)\psi_{1,II}(x) \Rightarrow \partial_{xx}\psi_{1,II}(x) = -p_x'^2\psi_1(x)$$
siendo $p_x' = \sqrt{\varepsilon^2 - (k+a_0)^2}$, y que tiene por solución

$$\psi_{1,II} = \alpha'_{II} e^{-ip'_x x} + \beta'_{II} e^{ip'_x x}$$

• Región III (x > 1):

$$\partial_{xx}\psi_{1,III}\left(x\right) = -p_{x}^{2}\psi_{1,III}\left(x\right) \Rightarrow \psi_{1,III} = \alpha_{III}^{\prime}e^{-ip_{x}x} + \beta_{III}^{\prime}e^{ip_{x}x}$$

solución que coincide con la región I.

Si queremos obtener los coeficientes de transmisión y de reflexión debemos exigir que la función de onda sea continua y derivable en los puntos x = -1 y x = 1:

$$\alpha'_{I}e^{ip_{x}} + \beta'_{I}e^{-ip_{x}} = \alpha'_{II}e^{ip'_{x}} + \beta'_{II}e^{-ip'_{x}}$$
$$-\alpha'_{I}ip_{x}e^{ip_{x}} + \beta'_{I}ip_{x}e^{-ip_{x}} = -\alpha'_{II}ip'_{x}e^{ip'_{x}} + \beta'_{II}ip'_{x}e^{-ip'_{x}}$$
$$\alpha'_{II}e^{-ip'_{x}} + \beta'_{II}e^{ip'_{x}} = \alpha'_{III}e^{-ip_{x}} + \beta'_{III}e^{ip_{x}}$$
$$-\alpha'_{II}ip'_{x}e^{-ip'_{x}} + \beta'_{II}ip'_{x}e^{ip'_{x}} = -\alpha'_{III}ip_{x}e^{-ip_{x}} + \beta'_{III}ip_{x}e^{ip_{x}}$$

Resolviendo el sistema, con $\alpha'_{III} = 0$, en función del parámetro β'_I obtenemos los coeficientes de transmisión y reflexión:

$$T_m = \left|\frac{\beta'_{III}}{\beta'_I}\right|^2 = \frac{4p_x^2 p_x'^2}{4p_x^2 p_x'^2 \cos^2\left(2p'_x\right) + \left(p'_x^2 + p_x^2\right)^2 \sin^2\left(2p'_x\right)}$$
$$R_m = \left|\frac{\alpha'_I}{\beta'_I}\right|^2 = \frac{\left(p'_x^2 - p_x^2\right)^2 \sin^2\left(2p'_x\right)}{4p_x^2 p_x'^2 \cos^2\left(2p'_x\right) + \left(p'_x^2 + p_x^2\right)^2 \sin^2\left(2p'_x\right)}$$

La figura 4.2.1 representa el coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia para diferentes valores del potencial vector magnético. Se observa que a medida que el valor del potencial vector se acerca a cero la gráfica del coeficiente es más plana y muy cercana al valor 1; y cuando se trata de potenciales vector magnético en los que $a_0 > 0$, es decir, condiciones donde clásicamente hay un impedimento al paso a la región II (como si actuaran a modo de barreras de potencial eléctrico), aquí también se observa que el coeficiente de transmisión va a cero. Es decir, no se aprecia un efecto túnel.

Es de destacar que se producen resonancias en el coeficiente de transmisión que hacen que alcanze el valor máximo, es decir, la unidad, cuando el valor del momento lineal que aparece en las funciones seno y coseno del denominador en la expresión del coeficiente de transmisión es tal que cancela la función seno. De alguna manera hay un cierto impedimento al paso a través de la región II.



Figura 4.2.1: Coeficiente de transmisión frente al ángulo de incidencia

4.2.2. Estados confinados en potencial magnético

Las soluciones para estados confinados son:

Región I:

$$\partial_{xx}\psi_{1,I} = p_x^2\psi_{1,I} \Rightarrow \psi_{1,I} = A'e^{p_xx}, \ p_x = \sqrt{k^2 - \varepsilon^2} > 0$$

• Región II:

$$\partial_{xx}\psi_{1,II} = \left(a_0^2 + 2ka_0 + k^2 - \varepsilon^2\right)\psi_{1,II} \Rightarrow \partial_{xx}\psi_{1,II} = -p_x'^2\psi_{1,II} \Rightarrow \psi_{1,II} = C'e^{ip_x'x} + D'e^{-ip_x'x}$$
$$p_x' = \sqrt{\varepsilon^2 - (k+a_0)^2}$$

• Región III:

$$\partial_{xx}\psi_{1,III} = p_x^2\psi_{1,III} \Rightarrow \psi_{1,III} = F'e^{-p_x x}, \ p_x = \sqrt{k^2 - \varepsilon^2} > 0$$

Si imponemos las condiciones de continuidad:

$$\psi_{1,I}(-1) = \psi_{1,II}(-1); \ \partial_x \psi_{1,I}(-1) - a_0 \psi_{1,I}(-1) = \partial_x \psi_{1,II}(-1)$$

 $\psi_{1,II}(1) = \psi_{1,III}(1); \ \partial_x \psi_{1,II}(1) + a_0 \psi_{1,II}(1) = \partial_x \psi_{1,III}(1)$

que nos llevan al sistema homogéneo:

$$A'e^{-p_x} = C'e^{-ip'_x} + D'e^{ip'_x}$$

$$A'p_x e^{-p_x} - a_0 A'e^{-p_x} = C'ip'_x e^{-ip'_x} - D'ip'_x e^{ip'_x}$$

$$C'e^{ip'_x} + D'e^{-ip'_x} = F'e^{-p_x}$$

$$C'ip'_x e^{ip'_x} - D'ip'_x e^{-ip'_x} + a_0 C'e^{ip'_x} + a_0 D'e^{-ip'_x} = -F'p_x e^{-p_x}$$

de donde se llega a la relación:

$$\tan 2p'_{x} = \frac{2p_{x}p'_{x}}{p'^{2}_{x} + a^{2}_{0} - p^{2}_{x}}$$
$$\sqrt{k^{2} - \varepsilon^{2}}\sqrt{\varepsilon^{2} - (k + a_{0})^{2}} = (\varepsilon^{2} - k^{2} - ka_{0})\tan 2\sqrt{\varepsilon^{2} - (k + a_{0})^{2}}$$

Esta última igualdad es la condición que deben cumplir las soluciones en el caso de estados confinados. Sus soluciones nos dan el espectro discreto de energías posibles, es decir, la cuantización.

En las gráficas de la figura 4.2.2 se representan en sombreado las zonas de confinamiento, tal y como se representaron en el estudio clásico, pero donde ahora se observa la discretización de la energía. Si en cualquiera de las gráficas se fija un valor, bien de k o bien de a_0 , entonces el número de estados de energía posibles será sólo de hasta tres valores diferentes. Esto claramente contrasta con el estudio clásico donde existe un espectro continuo de energía.



Figura 4.2.2: Representación del espectro discreto de energías



Figura 4.2.3: Representación de la parte real de la función de onda en dos niveles diferentes de energía para estados confinados correspondientes a k = -4 y $a_0 = 2$

4.2.3. Análisis de las soluciones

Análogamente a como hemos hecho para el campo eléctrico ahora analizamos las soluciones en cada región.

- Regiones I y III: si hemos buscado soluciones donde se dé confinamiento, la función deberá ser una exponencial decreciente con la condición de que $p_x = \sqrt{k^2 \varepsilon^2} > 0 \Rightarrow |\varepsilon| < |k|$. Caso contrario, obtendríamos una onda plana que atraviesa la frontera y que también puede sufrir una reflexión.
- Región II: en esta región, la función de onda solución son exponenciales complejas correspondientes a soluciones tipo onda transmitida y reflejada, que están confinadas en un pozo/barrera de anchura fija. La cuantización de la energía viene determinada al exigir que tengamos dentro de la anchura del pozo/barrera un número entero de semilongitudes de onda.

Por otra parte, la condición $p'_x = \sqrt{\varepsilon^2 - (k + a_0)^2} > 0$, implica que $|\varepsilon| > |k + a_0|$. Además, en el caso de confinamiento, también tenemos la condición

de $|\varepsilon| < |k|$. Es decir, es necesario que la partícula incida en una dirección en la que la segunda componente del momento lineal sea negativa. Esta era la misma condición que se obtuvo clásicamente, donde existía una cierta asimetría según fuera la dirección incidente.

5 Conclusiones

A lo largo del presente trabajo se ha estudiado, tanto desde el punto de vista clásico como cuántico, el comportamiento del electrón sin masa en el grafeno para guías de onda eléctricas y magnéticas. Resumimos aquí los detalles más interesantes: En el caso de guías de onda eléctricas:

- En el estudio del scattering clásico para un perfil rectangular de tipo pozo/barrera en guías de onda eléctricas se ha visto que existe una simetría en la dinámica del electrón, en relación al signo de la segunda componente del momento lineal (k), en el momento de incidir sobre la superficie de separación. Esto es debido al hecho de que la fuerza eléctrica no depende de la dirección del momento lineal incidente.
- Por otra parte, las condiciones respecto a los parámetros: momento lineal (k), energía y valor del potencial eléctrico que determinan el confinamiento del electrón en la zona donde se aplica el potencial eléctrico, están claramente muy delimitadas por unas condiciones. Estas condiciones deben ser tal que el valor absoluto de k en el momento de incidir sea superior al valor absoluto de la energía, pero inferior al valor absoluto de la suma de energía y potencial eléctrico. Además, esta condición se cumple para el caso de barreras de potencial.
- En el estudio cuántico del scattering, la simetría encontrada en el estudio clásico también se cumple cuando se estudia mediante la ecuación de Dirac-Weyl. En este caso la simetría viene del hecho de que, al resolver la ecuación, se deben imponer unas condiciones de scattering que den como solución en la región I una onda plana incidente asociada al electrón (partícula libre). Es de resaltar que cuando se trata de potenciales que cumplen $v_0 < 0$, es decir, barreras de potencial, donde clásicamente no hay paso a la región II, aquí también se observa que el coeficciente de transmisión cae a cero. Es decir, no se aprecia un efecto túnel. Se producen resonancias, en los estados scattering, en el coeficiente de transmisión que hacen que alcanze el valor máximo, es decir, la unidad, cuando el valor del momento lineal que aparece en las funciones seno y coseno del denominador en la expresión del coeficiente de transmisión es tal que cancela la función seno. De alguna manera hay un cierto impedimento al paso a través de la región II.
- Para el estudio cuántico de estados confinados se impuso a las ecuaciones que, la función de onda del electrón incidente decreciera a cero para distancias lejanas a la zona donde se aplica el potencial. Esta restricción lleva a las mismas condiciones de confinamiento respecto a los parámetros de energía, momento lineal (k) y potencial eléctrico que se dan en el caso clásico.

 Al imponer en la resolución de la ecuación de Dirac-Weyl para estados confinados que la función de onda sea continua y derivable en los puntos de separación de las tres regiones, se obtiene una ecuación no lineal en los parámetros energía, momento lineal (k) y potencial eléctrico. Esta situación no se da en el caso clásico porque, desde un punto de vista cuántico, la anchura de la región de confinamiento debe ser un múltiplo entero de semilongitudes de onda asociadas al electrón confinado en la región II para diferentes valores de la energía . Esta situación es la que conduce a la cuantización o discretización de los niveles de energía en dicha región.

Para guías de onda magnéticas:

- Análogamente, también se ha estudiado el scattering clásico para un perfil rectangular de tipo pozo/barrera en guías de onda magnéticas. En este caso existe cierta simetría en la dinámica de la partícula, pero esta vez la simetría viene dada respecto a la energía. Esto es debido a que la acción del potencial vector magnético no influye sobre la energía del electrón, y sí sobre su dirección, rompiéndose ahora la simetría que antes se daba en el caso eléctrico respecto del momento lineal. La razón está en que la fuerza magnética depende del momento lineal.
- Las condiciones de confinamiento, en el caso clásico en la región II, están también determinadas por unas condiciones en los parámetros de energía, momento lineal y potencial vector magnético. En este caso, una de las condiciones coincide con el caso eléctrico, y es que la energía en valor absoluto tenga un valor inferior al valor absoluto de k. La segunda condición es que el valor absoluto de la energía sea superior al valor absoluto de la suma de k y el potencial vector magnético. Estas condiciones implican que es posible el confinamiento en el caso de pozos de potencial si k < 0, pero también se puede dar confinamiento con barreras de potencial si k > 0.
- Al analizar el scattering del electrón usando la ecuación de Dirac-Weyl se da la misma simetría respecto a la energía que en el caso clásico. Al resolver la ecuación e imponer condiciones de scattering en las que la partícula incidente se comporte como una onda plana (partícula libre) se tienen los mismos requisitos que se obtuvieron clásicamente respecto a los parámetros de energía, momento lineal y potencial vector magnético. Por otro lado, cuando se trata de potenciales vector magnético en los que $a_0 > 0$, es decir, condiciones donde clásicamente hay un impedimento al paso a la región II también se observa que el coeficciente de transmisión cae a cero. Es decir, no se aprecia un efecto túnel. Se observa que se producen resonancias en el coeficiente de transmisión en los estados de scattering, que hacen que alcanze el valor máximo, es decir, la unidad, cuando el valor del momento lineal que aparece en las funciones seno y coseno del denominador en la expresión del coeficiente de transmisión es tal que cancela la función seno. De alguna manera hay un cierto impedimento al paso a través de la región II.
- En el estudio cuántico del confinamiento, también se deben cumplir las mismas condiciones que en el caso cuántico del potencial eléctrico, es decir, función de

onda decreciente y que tiende a cero para distancias lejanas a la región II. Esto lleva a las mismas condiciones para el confinamiento que en el estudio clásico. También en este caso, al imponer que la función de onda sea continua y derivable en los puntos de separación de las tres regiones, se obtiene una ecuación no lineal que relaciona los parámetros de energía, momento lineal y potencial vector magnético. Su resolución conduce a la obtención de los valores del espectro discreto de la energía, es decir, a la cuantización de los niveles de energía en la zona de confinamiento.

En este estudio sobre guías de onda eléctricas y magnéticas en el grafeno, tanto su enfoque clásico como cuántico arrojan importantes similitudes. Esto es de esperar, como corresponde al uso de ambas teorías, pues un estudio clásico siempre permite dar una primera visión que, al final, necesitará, por tratarse de un sistema como el grafeno, del aporte de la teoría cuántica. Mediante el estudio a través de la ecuación de Dirac-Weyl no sólo se vuelven a reproducir las conclusiones que se alcanzan desde el punto de vista clásico, también permite dar cuenta de algunos hechos no previstos por la teoría clásica. Sin duda, lo más destacable es la discretización de los niveles de energía para estados ligados del electrón dentro de la región en la que se aplican los potenciales eléctrico y magnético, así como los fenómenos de resonancias en el coeficiente de transmisión en los estados de scattering. Además, no es apreciable un efecto túnel en las barreras de potencial; un análisis más detallado, con la posibilidad de variación de la anchura de la región II arrojaría más resultados.

Un estudio cuántico, tanto de los estados confinados como de los estados de scattering, puede ser abordado con más profundidad en posteriores trabajos. Existen detalles importantes de la función de onda en los diferentes estados de energía que podrían ser estudiados en las zonas de separación de las regiones en las que se aplican los potenciales. Asimismo, se pueden analizar las resonancias en estados scattering tanto para potenciales eléctricos como magnéticos, teniendo en cuenta, además, posibles variaciones en la anchura de la región en la que se aplican los potenciales.

Todas las gráficas han sido realizadas por el autor del presente trabajo mediante el software Mathematica.

Bibliografía

- [1] Prasanta K. Misra, Physics of Condensed Matter. 2012, Elsevier Inc.
- [2] H.-S. Philip Wong, Deji Akinwande, Carbon Nanotube and Graphene Device Physics, Cambridge University Press 2011.
- [3] İsmail Burak Ateş, Şengül Kuru and Javier Negro, Graphene Dirac fermions in symmetric electric and magnetic fields: the case of an electric square well, Phys. Scr. 98 (2023) 015816.
- [4] M.O. Goerbig, Electronic properties of graphene in a strong magnetic field, Reviews of Modern Physics, volume 83, October-December 2011.
- [5] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, The electronic properties of graphene, Reviews of Modern Physics, volume 81, January-March 2009.