

Trabajo Fin de Grado

Grado en Física

Espectro magnético del grafeno
modificado mediante campos eléctricos

Autor:

Gonzalo Blanco Martín

Tutores:

Javier Negro Vadillo

Ivan Alejandro Bocanegra Garay

Julio 2025

Abstract

In this work, the Dirac-Weyl equation which is relevant in describing electrons in graphene, will be used to obtain analytical solutions for both bound and scattering states. These results contribute to a better understanding of the confinement of Dirac fermions in graphene. Additionally, the corresponding energy spectrum associated with bound states are examined, along with the transmission and reflection coefficients for scattering states and the probability current densities in both cases. Finally, the purely magnetic case will be compared with that of adding an electric influence.

Abstract

En este trabajo se resolverá la ecuación de Dirac-Weyl en el grafeno en el caso de que haya presencia de un pozo de potencial magnético con una perturbación eléctrica. Se buscará obtener soluciones analíticas de los estados ligados y de dispersión. También se verán el espectro de energía asociado a los estados ligados, los coeficientes de transmisión y reflexión de los estados de dispersión y las densidades de corriente de probabilidad en ambos casos. Finalmente, se comparará el caso puramente magnético con aquel en el que se añadió la perturbación eléctrica.

Contents

1	Introducción.	2
1.1	Contexto histórico.	2
1.2	El grafeno.	2
1.2.1	Propiedades y estructura del grafeno.	2
1.2.2	Propiedades desde el punto de vista teórico.	3
1.3	Necesidad de una ecuación más allá de la de ecuación de Schrödinger o Klein-Gordon.	4
1.4	Ecuación de Dirac y Dirac-Weyl.	4
1.5	Túnel cuántico y la paradoja de Klein en el grafeno.	5
1.6	Importancia del confinamiento en el grafeno.	5
1.7	Pseudospín, helicidad y implicación con el túnel cuántico.	5
2	Configuración.	6
3	Estados ligados.	7
3.1	Energía de los estados ligados y su discretización.	9
3.2	Función de onda de los estados ligados.	11
3.3	Energía y funciones de onda en función de la perturbación eléctrica.	14
3.4	Interpretación del número de estados ligados a partir de la ecuación de Schrödinger auxiliar	16
3.5	Densidad de corriente de probabilidad.	19
4	Estados Scattering.	20
4.1	Coeficientes de transmisión y reflexión, y funciones de onda en función de la energía. .	21
4.2	Coeficientes de transmisión y reflexión en función del ángulo de incidencia.	22
4.3	Densidad de corriente de probabilidad.	26
5	Comparación del caso estudiado con el puramente magnético.	27
6	Conclusiones.	28
A	Tablas de coeficientes de los estados ligados para k constante.	29
B	Tablas de coeficientes de los estados ligados para γ constante.	29

1 Introducción.

El objetivo de este trabajo consiste en estudiar las consecuencias que tiene introducir una perturbación eléctrica en un sistema puramente magnético que ya es conocido [1]. El sistema es siempre una lámina de grafeno, sometido a lo largo de una banda en cierta dirección a campos magnético y eléctrico. A este sistema lo llamaremos también guía de ondas. El caso que cubrirá este trabajo será el de un pozo de potencial magnético rectangular, tal como se explicará después. Posteriormente, en esta banda se añadirá un potencial eléctrico, también de tipo pozo rectangular, que será considerado como una perturbación.

Este estudio es una continuación de trabajos anteriores [1, 2] en los cuales se han considerado potenciales magnéticos y eléctricos de forma independiente, mientras que este sería un primer paso para ver las consecuencias de trabajar en presencia de ambos. Esto tiene importancia tanto por sus aplicaciones prácticas como por sus consecuencias teóricas, debido a la relevancia que tiene el correcto entendimiento del confinamiento de electrones de Dirac en el grafeno como se verá más en profundidad posteriormente. Pero para ello se deberá entender un poco la estructura y propiedades del grafeno a la vez del porque de la aplicación de la ecuación de Dirac-Weyl a este sistema y sus consecuencias.

Una motivación extra para este trabajo es un artículo [3] que ha tenido bastante repercusión, en el que se considera la lámina de grafeno bajo el efecto de un campo magnético constante. Después se aplica un campo eléctrico perpendicular y se observa cómo se modifica el espectro magnético inicial. En este trabajo modificamos el planteamiento, pero esencialmente es el mismo tipo de problema. En la conclusiones finales se compararán los resultados de [3].

1.1 Contexto histórico.

El grafeno es un material que fue aislado por primera vez en el año 2004 por los científicos Andre Geim y Konstantin Novoselov. Estos lo aislaron mediante un proceso de exfoliación mecánico, donde con cinta adhesiva separaron las capas de una muestra de grafito hasta quedarse solo con una lámina que resultó ser el grafeno. El descubrimiento de este material fue toda una revolución por sus aplicaciones prácticas y experimentales, como por sus implicaciones teóricas. Supuso un hallazgo muy importante para varias ramas de la física: física teórica, física de la materia condensada y en aplicaciones como nanotecnología.

1.2 El grafeno.

En esta investigación se va a utilizar como base el grafeno debido a múltiples razones, como se mencionó, tanto por sus peculiaridades teóricas como por sus posteriores aplicaciones prácticas.

1.2.1 Propiedades y estructura del grafeno.

El *grafeno* es una forma de carbono puro en la que los átomos están organizados en una red bidimensional con patrón hexagonal (véase Figura 1), similar a la del grafito. Se trata de un material extremadamente delgado, de una sola capa atómica de espesor, y sin embargo, posee una resistencia mecánica sorprendente: puede ser hasta 200 veces más fuerte que el acero más resistente, con una densidad comparable a la de la fibra de carbono, y unas cinco veces más ligero que el aluminio. Además, es casi transparente, lo que lo convierte en un material muy prometedor para aplicaciones en pantallas, sensores y electrónica flexible.

Desde el punto de vista químico, el grafeno es un *alótropo del carbono*, es decir, una de las

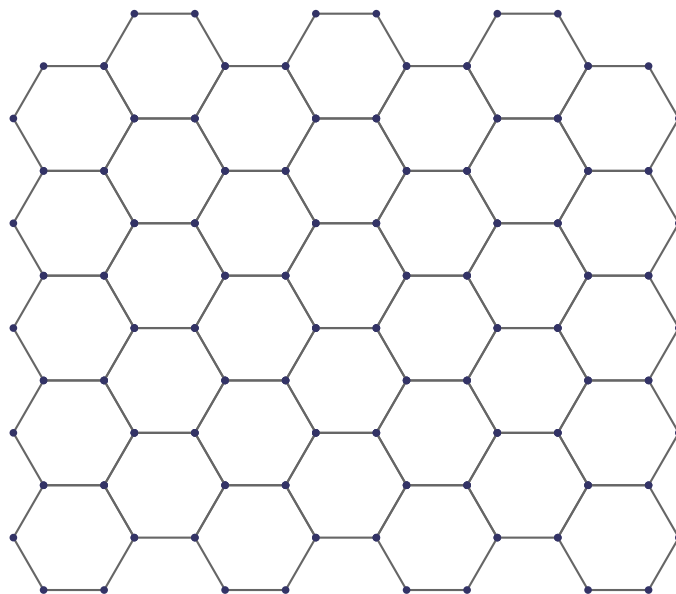


Figure 1: Arreglo hexagonal de la estructura del grafeno.

formas estructurales en las que puede organizarse este elemento. En el grafeno, cada átomo de carbono forma tres enlaces covalentes con sus vecinos mediante *hibridación sp^2* , generando una red plana de hexágonos. Esta configuración favorece ángulos de enlace de aproximadamente 120° .

Cada átomo de carbono tiene un electrón adicional que queda ubicado en un *orbital p* perpendicular al plano de la lámina. Estos orbitales p se superponen lateralmente, formando un sistema de *orbitales π deslocalizados* [4], es decir, una nube electrónica extendida a lo largo de toda la lámina de grafeno. Esta deslocalización electrónica es responsable de muchas de las propiedades notables del grafeno, como su alta conductividad eléctrica y térmica.

El término *grafeno* se deriva del nombre *grafito*, sustituyendo el sufijo “-ito” por “-eno”, en alusión a los enlaces dobles característicos de la estructura. De hecho, el grafito puede considerarse como un apilamiento de múltiples capas de grafeno, unidas entre sí por *fuerzas de Van der Waals* y por interacciones débiles entre los orbitales π de los átomos de carbono. Esta estructura única dota a este material de unas propiedades físicas muy interesantes como pueden ser su alta conductividad eléctrica y térmica, ligereza, gran resistencia y elasticidad entre muchas otras, pero también dota al grafeno de propiedades y aplicaciones teóricas muy útiles.

1.2.2 Propiedades desde el punto de vista teórico.

En cuanto a las peculiaridades teóricas se podrían mencionar muchas interesantes, como puede ser el efecto de *localización de Anderson*, por el cual los electrones en el grafeno tienen libre movilidad y no quedan confinados en zonas de las cuales no pueden salir [5], o el efecto Hall cuántico por el que la conductividad toma valores cuantizados y no puede ser nula [6]. Sin embargo, la característica más importante es el comportamiento de los electrones en este material, que actúan como cuasipartículas sin masa que se desplazan por el material, conocidas como fermiones de Dirac, las cuales se mueven a una velocidad constante independientemente de la energía que tengan, como sucede en el caso de los fotones. La velocidad a la que se mueven estas cuasipartículas es lo que se conoce como velocidad de Fermi que en el caso del grafeno tiene un valor de $v_F \approx 10^6 m/s$ [1].

1.3 Necesidad de una ecuación más allá de la de ecuación de Schrödinger o Klein-Gordon.

Hay muchos sistemas físicos formados por electrones, por ejemplo los semiconductores convencionales, que se pueden estudiar mediante la ecuación de Schrödinger introduciendo un término adicional para el espín, que no tiene en cuenta la ecuación original. Lamentablemente, en el sistema que se tratará en este estudio no es posible debido a que los portadores de carga en el grafeno obedecen una relación de dispersión lineal [2], lo cual exige una descripción relativista [7]. Se podría pensar en aplicar la primera ecuación cuántico-relativista: la ecuación de Klein-Gordon, para describir el sistema, pero estas cuasipartículas oscilan entre dos subredes que se comportan como las componentes del espín. Por lo tanto la ecuación relevante será la de Dirac, o más precisamente su versión de masa nula que se denomina Dirac-Weyl [7, 8]. La función de ondas va a tener dos componentes que describen las componentes de las dos subredes. Por esta razón se habla de pseudoespín en el caso de las componentes del grafeno.

1.4 Ecuación de Dirac y Dirac-Weyl.

Como se ha mencionado antes, los electrones del grafeno se comportan como fermiones de Dirac. La ecuación de Dirac, es una ecuación de ondas que describe la evolución de sistemas cuánticos de espín 1/2, consistente con la relatividad especial. La ecuación de Dirac es una ecuación diferencial matricial de primer orden, para funciones de cuatro componentes, que tiene la siguiente forma

$$(\not{p} - mc)\psi(\vec{x}) = 0, \quad (1)$$

siendo c la velocidad de la luz y usando la notación “slash” de Dirac que es como suele aparecer en la literatura. Desarrollándola un poco, tenemos

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)\psi = 0. \quad (2)$$

Las componentes del operador momento p_μ en la notación slash multiplican a las matrices 4×4 de Dirac γ^μ (que variarán de forma dependiendo de la representación elegida). La función de onda ψ posee cuatro componentes. En forma hamiltoniana se puede escribir

$$i\hbar\partial_t\psi = -i\hbar c \sum_{i=1}^3 \alpha_i \partial_i \psi + mc^2 \beta \psi,$$

siendo $\gamma^0 = \beta$, $\gamma^i = \beta\alpha_i$. Pero hay otra condición más: como ya se ha mencionado, los electrones se comportan como cuasipartículas sin masa, por lo que aplicando esto a la ecuación de Dirac se obtiene una ecuación sin el término de la masa:

$$\gamma^\mu p_\mu \psi = 0, \quad (3)$$

o en forma hamiltoniana,

$$H = -i\hbar c \sum_{i=1}^3 \sigma_i \partial_i \psi,$$

siendo σ_i las matrices de Pauli. Además, la ecuación así obtenida se reduce a dos componentes y entonces se conoce como ecuación de Dirac-Weyl. Dicha ecuación es la que aparece en la aproximación continua para describir los electrones del grafeno. El grafeno es un material bidimensional, es decir, se trata de un sistema con dos dimensiones espaciales y una temporal por lo que estamos en (2+1)D. Entonces podemos elegir la representación de Pauli 2×2 para las matrices de Dirac-Weyl, que toma la forma

$$H = v_F(\vec{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla)) = v_F(\sigma_x(-i\hbar\partial_x) + \sigma_y(-i\hbar\partial_y)). \quad (4)$$

En el grafeno se sustituye la velocidad de la luz c , por v_F , la velocidad de Fermi. El operador asociado al momento $\vec{p}$ es $-i\nabla$ (en unidades $\hbar = 1$) aplicando esto al Hamiltoniano de Dirac-Weyl resultaría que la ecuación de Dirac-Weyl tenga la siguiente forma

$$v_F(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\psi = E\psi, \quad (5)$$

que será la ecuación diferencial que se usará en este trabajo. Como los electrones de nuestro sistema están en presencia de campos eléctricos y magnéticos externos, la interacción se describe en la ecuación mediante lo que se conoce como el *acoplamiento mínimo*, que consiste en cambiar el operador momento

$$\vec{p} \longrightarrow \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}, \quad (6)$$

y la energía H del sistema

$$H \longrightarrow H - e\varphi(x), \quad (7)$$

donde e es la carga del electrón. Utilizaremos una notación simplificada:

$$p_i \rightarrow p_i + A_i(x), \quad H \rightarrow H + V(x).$$

1.5 Túnel cuántico y la paradoja de Klein en el grafeno.

La paradoja de Klein predice que partículas relativistas pueden atravesar barreras de potencial altas sin ser reflejadas [9], algo que desafía la intuición clásica. Esto nunca se había observado directamente con partículas elementales debido a las intensas condiciones requeridas (como campos eléctricos enormes), pero hay artículos basados en experimentos que demuestran que el grafeno permite simular y estudiar esta paradoja en sistemas de materia condensada, gracias a las propiedades relativistas de sus electrones tipo Dirac. [9, 10].

1.6 Importancia del confinamiento en el grafeno.

Una de las consecuencias mas directas de este trabajo es una mejor comprensión de los estados ligados de los electrones para conseguir así un confinamiento de estos mediante potenciales externos en el grafeno de tal forma que se pueda evitar la paradoja de Klein bajo ciertas condiciones. Esto es crucial para el diseño de dispositivos cuánticos. Los sistemas relacionados con confinamiento son los *quantum dots* [12], que son nanoestructuras en las que los portadores de carga estan tan confinados en una región pequeña, y que sólo les es posible ocupar ciertos niveles de energía cuantizados, guías de ondas y transistores basados en grafeno.

1.7 Pseudospín, helicidad y implicación con el túnel cuántico.

Se ha mencionado ya en este trabajo el concepto de pseudospín, pero todavía no ha sido definido de forma apropiada. El pseudospín es un grado de libertad matemático que es introducido para describir la estructura de dos subredes, como es el caso del grafeno, que está formado por dos subredes triangulares entrelazadas. Se llama de esta manera a este grado de libertad matemático debido a que se comporta de forma muy parecida al espín real, respeta sus reglas de conmutación, se puede representar con las matrices de Pauli asociadas, y obedece el álgebra de $SU(2)$ [13]. Sin embargo este, a diferencia del espín convencional, no es de origen magnético ni está relacionado con el espín intrínseco del electrón. En [13] se ve como el pseudospín no es solamente una herramienta matemática, si no que es una forma real de espín cuántico para que el momento angular total se conserve, denominado "lattice spin".

Por otro lado, la helicidad análoga al caso del fotón, es otro concepto que también es importante entender en este contexto. Está relacionada con la orientación relativa entre el pseudospín y el

momento del electrón. En grafeno, los electrones tipo Dirac tienen pseudospín alineado o anti-alineado con su vector de momento, lo cual da lugar a dos estados de quiralidad opuesta [14]. Esto da lugar a una propiedad física muy importante para entender correctamente estos procesos que es la conservación de la quiralidad, pero en un pozo de potencial, si un electrón incide perpendicularmente al pozo, no puede cambiar su pseudospín sin violar la conservación de helicidad. Por tanto, la probabilidad de reflexión es exactamente cero, y la transmisión es total, sin importar la altura o el ancho de la barrera. Este fenómeno, conocido como *túnel quiral* [9], o *efecto Klein relativista*, es una manifestación directa de la paradoja de Klein en materia condensada.

2 Configuración.

En este trabajo se estudiará el caso de un potencial magnético con las siguientes componentes: $\vec{A}(x) = (0, A_y(x), 0)$. La perturbación eléctrica consistirá en un potencial eléctrico de la misma forma $V(x) \propto A_y(x)$, pero más débil.

Estos potenciales tienen simetría en la dirección y , ya que dependen exclusivamente de la coordenada x . Este potencial magnético es tal que solo tiene componente no nula en $\vec{A} = (0, A_y, 0)$, dicho potencial da lugar a un campo magnético que cumpla $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, resultando en $\vec{B} = \partial_x A_y$, que da lugar a campo magnético nulo en todo el espacio menos en las dos fronteras que sería dos deltas de Dirac. Esta simetría nos permitirá reducir el problema a la variable x , eliminando la variable y . El potencial magnético tiene la forma cuadrada en la variable x (no depende de la variable y):

$$A_y(x) = \begin{cases} 0, & |x| > L, \\ \mathcal{A}, & |x| < L. \end{cases}$$

Por lo tanto, esta configuración (ver Figura 2), da lugar a tres zonas espaciales (I, II y III). Una zona (II) con un potencial magnético constante $\mathcal{A}$ (y a veces otro eléctrico también será constante, pero más débil), y otras dos zonas (I, III) en las cuales el potencial magnético es nulo. Se resolverá la ecuación de Dirac en cada una de las tres zonas de la variable x , de tal forma que se obtenga la función de onda de los electrones del grafeno para cada zona de esta configuración. Posteriormente, se procederá a aplicar las condiciones de frontera en las discontinuidades del potencial magnético. En particular, en el caso de los estados ligados, esto llevará a una discretización de los valores de energía permitidos, como veremos.

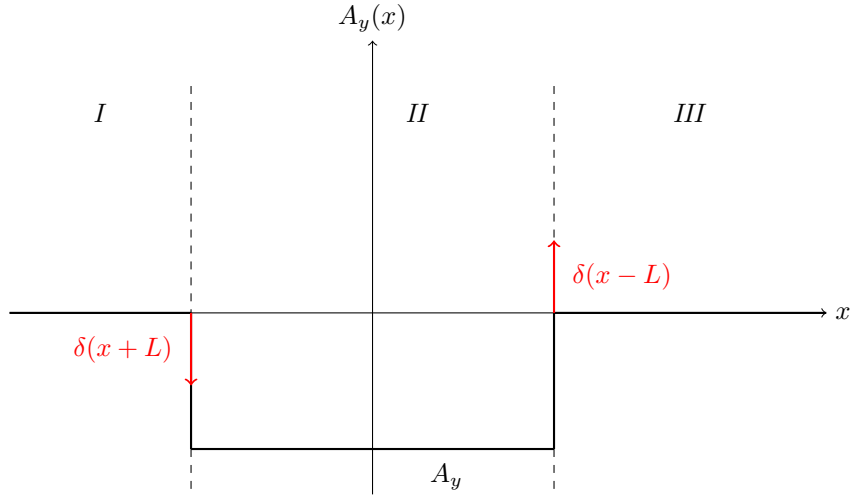


Figure 2: Pozo de potencial magnético cuadrado (línea sólida negra). Derivada de la función $A_y(x)$ con respecto a x (flechas rojas).

3 Estados ligados.

Ahora vamos a estudiar el caso de los estados ligados. La ecuación de Dirac-Weyl se escribe entonces

$$v_F(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}), \quad (8)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi en el grafeno, $\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli usuales y $\vec{p}$ el operador momento lineal. Al aplicar el acoplamiento mínimo, se obtiene

$$v_F(\vec{\sigma} \cdot [\vec{p} + \vec{A}])\psi(\vec{x}) = [E + V(x)]\psi(\vec{x}). \quad (9)$$

Desarrollando el producto escalar, teniendo en cuenta el potencial magnético y eléctrico, resulta

$$v_F(\sigma_x p_x + \sigma_y [p_y + eA_y])\psi(\vec{x}) = [E + V(x)]\psi(\vec{x}). \quad (10)$$

Debido a la simetría en la dirección y y a la forma rectangular de $\vec{A}$ y $V(x)$ se propone una solución del tipo

$$\psi(\vec{x}) = e^{ipx +iky} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

en donde k es el momento en la dirección y , tal que será una constante en todas las zonas y C_1 y C_2 son constantes con distintos valores en cada región. El operador momento en la dirección x viene representado por p , y que viene dado por $-i\hbar\partial_x$, tiene tres valores constantes correspondientes a cada región: dos valores iguales en las regiones I y III: $p_I = p_{III}$, y otro en la región II, p_{II} . Por lo tanto

$$p = \begin{cases} p_I = p_{III}, & |x| > L, \\ p_{II}, & |x| < L. \end{cases}$$

Estos tres valores se calcularán a continuación. Entonces

$$\hbar v_F(\sigma_x p + \sigma_y [k + \frac{e}{\hbar} A_y(x)])\psi(\vec{x}) = [E + V(x)]\psi(\vec{x}). \quad (12)$$

Considerando las matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (13)$$

y definiendo

$$\varepsilon := \frac{E}{\hbar v_F}, \quad \gamma := -\frac{e\varphi(x)}{\hbar v_F}, \quad \mathcal{A} := -\frac{e}{\hbar} A_y(x), \quad (14)$$

resulta en

$$\begin{pmatrix} 0 & p_- \\ p_+ & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = (\varepsilon + \gamma) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

donde se han definido $p_{\pm}$ como

$$p_{\pm} := p \pm i(k + \mathcal{A}). \quad (16)$$

Obtenemos una expresión que relaciona C_2 en función de C_1 , es decir

$$C_2 = \frac{p_+}{\varepsilon + \gamma} \cdot C_1, \quad (17)$$

dejando el problema con tan solo una componente en cada espinor $\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$. Si multiplicamos por la matriz antidiagonal $\begin{pmatrix} 0 & p_- \\ p_+ & 0 \end{pmatrix}$ a ambos lados de la ecuación (15), se obtiene

$$\begin{pmatrix} p_- p_+ & 0 \\ 0 & p_+ p_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = (\varepsilon + \gamma)^2 \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

de donde se obtiene que

$$p_- p_+ C_1 = (\varepsilon + \gamma)^2 C_1, \quad (19)$$

$$p_+ p_- C_2 = (\varepsilon + \gamma)^2 C_2, \quad (20)$$

y obtenemos

$$(\varepsilon + \gamma)^2 = p^2 + (k + \mathcal{A})^2. \quad (21)$$

Con esto se puede sacar una expresión para el momento en lineal

$$p = \pm \sqrt{(\varepsilon + \gamma)^2 - [k + \mathcal{A}]^2}.$$

Tendremos los siguientes valores para p :

- Tanto en la primera zona como en la tercera, el potencial eléctrico y el magnético, $A_y(x) = V(x) = 0$ son nulos, por lo que

$$p = p_I = p_{III} = \pm \sqrt{\varepsilon^2 - k^2}.$$

En el caso de los estados ligados el espinor tiene que decaer conforme $x \rightarrow \pm\infty$, por lo que para estos estados $\varepsilon^2 < k^2$, y podemos escribir $p = \pm i\sqrt{k^2 - \varepsilon^2}$, con

$$k^2 - \varepsilon^2 > 0. \quad (22)$$

En la zona III consideraremos el signo positivo de la raíz y en la zona I el negativo. Entonces (como el espinor se puede determinar hasta una constante multiplicativa) aplicando (17)

$$\psi_I(\vec{x}) = A_1 e^{\sqrt{k^2 - \varepsilon^2}x + iky} \begin{pmatrix} \varepsilon \\ -i\sqrt{k^2 - \varepsilon^2} + ik \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$\psi_{III}(\vec{x}) = A_3 e^{-\sqrt{k^2 - \varepsilon^2}x + iky} \begin{pmatrix} \varepsilon \\ i\sqrt{k^2 - \varepsilon^2} + ik \end{pmatrix}. \quad (24)$$

- En la segunda zona II los potenciales eléctrico y magnético son no nulos, por lo que en las ecuaciones aparecen los valores γ y A_y , resultando en

$$p = p_{II} = \pm \sqrt{(\varepsilon + \gamma)^2 - [k + \mathcal{A}]^2}. \quad (25)$$

Una posibilidad es que en esa zona las soluciones sean ondas planas:

$$(\varepsilon + \gamma)^2 - [k + \mathcal{A}]^2 > 0 \quad (26)$$

En esta zona se tendrán dos soluciones, una para cada signo de la raíz de p . Esto es:

$$\psi_{II}(\vec{x}) = A_2\psi_{II}^+(\vec{x}) + B_2\psi_{II}^-(\vec{x}), \quad (27)$$

donde $\psi_{II}^\pm(\vec{x})$ corresponden a:

$$\psi_{II}^\pm(\vec{x}) = e^{\pm i\sqrt{(\varepsilon+\gamma)^2 - [k+\mathcal{A}]^2}x + iky} \left(\frac{\varepsilon + \gamma}{\pm\sqrt{(\varepsilon + \gamma)^2 - [k + \mathcal{A}]^2} + i[k + \mathcal{A}]} \right). \quad (28)$$

Entonces, tenemos las funciones de onda de los estados estacionarios, en función de cuatro constantes, A_1, A_2, B_2, A_3 a determinar mediante las condiciones de frontera en las discontinuidades del pozo de potencial (dado que el problema es homogéneo hay una constante multiplicativa arbitraria).

3.1 Energía de los estados ligados y su discretización.

Debido a que la ecuación de Dirac-Weyl (8) es una ecuación diferencial de primer orden, las condiciones de frontera en las discontinuidades $x = \mp L$ (véase Figura 2) del pozo de potencial magnético consisten en la exigencia de que las soluciones sean continuas

$$\psi_I(\vec{x})|_{x \rightarrow -L} = \psi_{II}(\vec{x})|_{x \rightarrow -L}, \quad \psi_{II}(\vec{x})|_{x \rightarrow L} = \psi_{III}(\vec{x})|_{x \rightarrow L}. \quad (29)$$

Ahora mismo tenemos un sistema de cuatro ecuaciones lineales homogéneas con cuatro incógnitas, los cuatro coeficientes, por lo que para que el sistema tenga solución no-trivial se tiene que imponer que el determinante de la matriz de coeficientes sea nulo, dando así una condición de discretización para la energía ε de los estados ligados en términos de los parámetros restantes. La ecuación para el determinante resulta ser:

$$\begin{aligned} & \sqrt{-\varepsilon^2 + k^2} \sqrt{-(\mathcal{A} + k)^2 + (\varepsilon + \gamma)^2} \cos\left(2\sqrt{-(\mathcal{A} + k)^2 + (\varepsilon + \gamma)^2}\right) \\ & + [k(\mathcal{A} + k) - \varepsilon(\varepsilon + \gamma)] \sin\left(2\sqrt{-(\mathcal{A} + k)^2 + (\varepsilon + \gamma)^2}\right) = 0. \end{aligned} \quad (30)$$

La Figura 3 muestra las soluciones de la ecuación (30) como función de k y ε , para $\mathcal{A} = 3$, y distintos valores de γ : $\gamma = 0, 1, 2, 3$. Además, se han añadido un par de rectas auxiliares (verde y amarillo) para delimitar la zona $|k| > |\varepsilon|$, de acuerdo con (22), y otro par de rectas auxiliares (morado y rojo) para delimitar la region $|\varepsilon + \gamma| > |k + \mathcal{A}|$, de acuerdo con (26). Estas rectas determinan las regiones en las que pueden existir puntos del espectro de los estados ligados. Finalmente, se ha graficado otra recta adicional (naranja) de referencia para el valor $k = -2.3$ que utilizaremos como referencia, cuyos cortes con las curvas azules dan el espectro para ese valor particular.

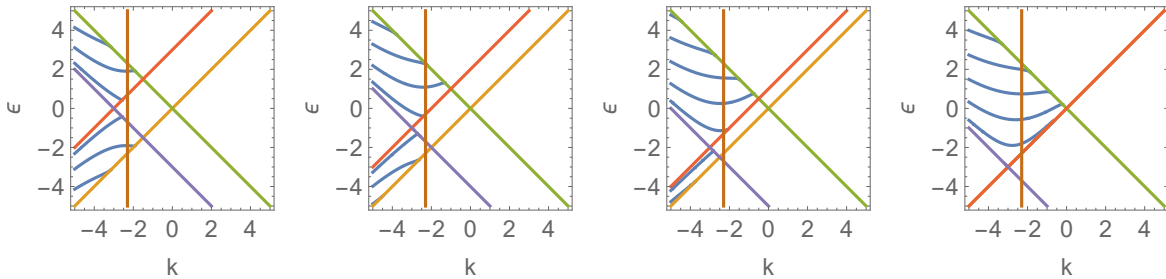


Figure 3: Soluciones (línea azul) de la ecuación (30), para soluciones del tipo (26), como función de k y ε , para $\mathcal{A} = 3$, y $\gamma = 0, 1, 2, 3$.

Se ve como las curvas azules cumplen la desigualdad 26, estando en la zona delimitada por esta. Notamos que hay unas curvas que han sido cortadas, ahora se verá que en efecto estas tienen una

continuación. Hay una segunda opción para las soluciones en el interior del pozo: Una posibilidad es que en esa zona las soluciones no sean ondas planas, sino funciones exponenciales,

$$(\varepsilon + \gamma)^2 - [k + \mathcal{A}]^2 < 0. \quad (31)$$

En este caso, en esa zona, debemos considerar soluciones evanescentes

$$p_{II} = \pm i \sqrt{[k + \mathcal{A}]^2 - (\varepsilon + \gamma)^2}.$$

Después de aplicar las condiciones de frontera (29) e igualar el determinante de la matriz de coeficientes a cero, obtenemos la siguiente condición de discretización para este tipo de soluciones:

$$\begin{aligned} & \sqrt{-\varepsilon^2 + k^2} \sqrt{(A_y + k)^2 - (\varepsilon + \gamma)^2} \cosh\left(2\sqrt{(A_y + k)^2 - (\varepsilon + \gamma)^2}\right) + \\ & [-k(A_y + k) + \varepsilon(\varepsilon + \gamma)] \sinh\left(2\sqrt{(A_y + k)^2 - (\varepsilon + \gamma)^2}\right) = 0. \end{aligned} \quad (32)$$

Para dichas soluciones, las desigualdades relevantes son (22) y (31). Las regiones que verifican estas desigualdades son dos rectángulos que dependen de $\mathcal{A}$ y γ . Este tipo de soluciones se conocen como “estados borde” o “edge states” por las razones que veremos después.

La Figura 4, muestra los valores de la energía de la ecuación (32), para las soluciones de tipo (31). Finalmente, la Figura 5 incluye los resultados de las Figuras 3 y 4 con todas las soluciones.

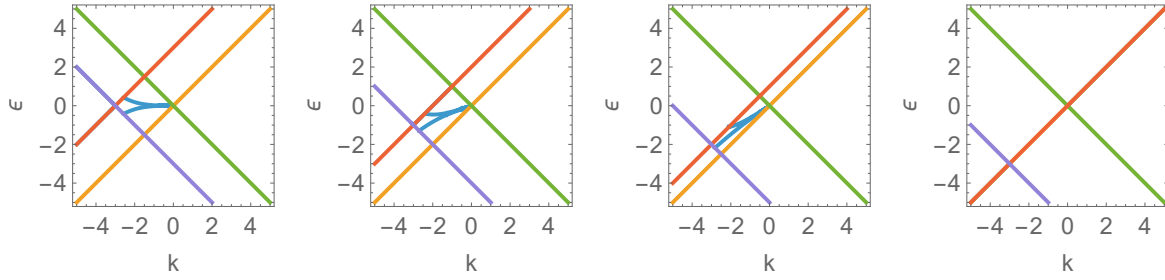


Figure 4: Soluciones (línea azul) de la ecuación (32) como función de k y ε , para los valores de los parámetros que en la Figura 3.

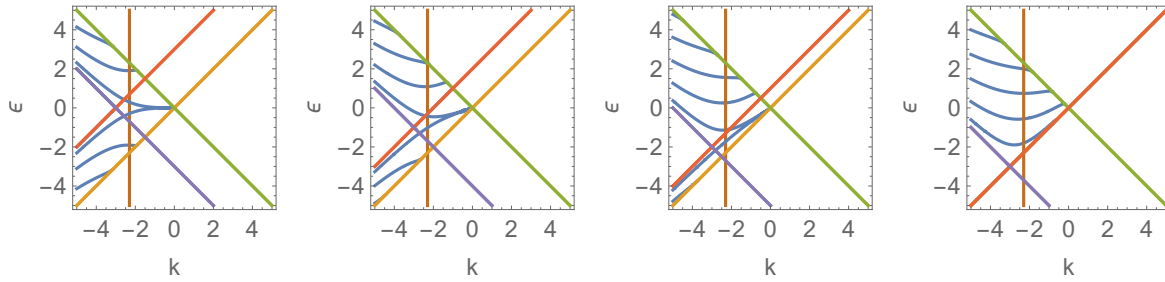


Figure 5: Soluciones (línea azul) de las ecuaciones (30) y (32) como función de k y ε , para los valores de los parámetros que en la Figura 3.

Comentarios al espectro obtenido

- Las curvas del espectro (en color azul) están a un lado de los valores de k (para $k < 0$). Esto es debido a que los estados confinados dependen del signo del momento en la dirección y que hemos llamado k . Esta asimetría es debida a la fuerza de Lorentz que depende de la dirección del momento de la partícula. En una dirección actúa repulsivamente ($k > 0$) y en la opuesta ($k < 0$) de forma atractiva, que es cuando pueden existir estados ligados.

- También hay una simetría del espectro con respecto a las energías positivas y negativas para el caso magnético puro (Figura 5a). Esta simetría se va rompiendo cuando se añaden campos eléctricos (Figuras 5b, 5c, 5d).
- Hay dos partes del espectro: curvas superiores e inferiores. A medida que el potencial eléctrico es más intenso las curvas espectrales inferiores van desapareciendo hasta quedar solamente las superiores.

3.2 Función de onda de los estados ligados.

Como se mencionó, en las gráficas anteriores también se representó la recta $k = -2.3$. Para este valor de k se obtienen las energías de los estados ligados. Luego es posible calcular, para cada una de ellas, los valores de las constantes A_1, A_2, B_2, A_3 que determinan el espinor (11), pudiendo analizar así las consecuencias de la aparición de potencial eléctrico en el sistema magnético en las funciones de onda de cada uno de los estados ligados.

1. Caso puramente magnético, $\gamma = 0$, para $k = -2.3$

Se tienen las siguientes energías (obtenidas numéricamente)

$$\varepsilon_1 = -1.9085, \quad \varepsilon_2 = -0.2943, \quad \varepsilon_3 = 0.2943, \quad \varepsilon_4 = 1.9085.$$

Para $\varepsilon_1 = -1.9085$, los valores de las constantes son

$$A_1 = 1, \quad A_2 = 0.2991 + 0.2036i, \quad B_2 = 0.2991 - 0.2036i, \quad A_3 = -1.8777.$$

Para $\varepsilon_2 = -0.2943$

$$A_1 = 1, \quad A_2 = -0.1980, \quad B_2 = 0.8981, \quad A_3 = 15.5614.$$

Para $\varepsilon_3 = 0.2943$

$$A_1 = 1, \quad A_2 = -0.1980, \quad B_2 = 0.8981, \quad A_3 = 15.5614.$$

Para $\varepsilon_4 = 1.9085$

$$A_1 = 1, \quad A_2 = 0.2991 + 0.2036i, \quad B_2 = 0.2991 - 0.2036i, \quad A_3 = -1.8777.$$

La Figura 6 muestra algunas de las componentes $\psi_1(x)$ (línea azul) del espinor $\psi(\vec{x}) = e^{iky} \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}$, para las energías permitidas ε_i , $i = 1, 2, 3, 4$, respectivamente de arriba a abajo, primero la columna izquierda y luego la derecha

En particular, para la energía mas negativa, ε_1 , se ha representado también la componente $\psi_2(x)$ (línea roja) del espinor resultante de la ecuación de Dirac. Se ve una clara simetría en ambas componentes, es por esto que de aquí en adelante se tendrá en cuenta solamente la componente $\psi_1(x)$ del espinor, porque con la información de una componente ya se puede obtener toda la información del sistema. En particular es interesante ver las funciones intermedias, cuyo corte de k con la curva azul esta en la zona de funciones hiperbólicas, (ver Figura 5, y por esto tienen esa forma, estas son conocidas como estados borde o edge states.

Ahora se irá introduciendo una perturbación eléctrica para ver como esto afectará a las energías y a las funciones de onda correspondientes.

2. Caso magnético con una parte eléctrica, $\gamma = 1$, para $k = -2.3$

Para $\gamma = 1$, repitiendo el mismo proceso que antes se obtienen las siguientes energías:

$$\varepsilon_1 = -1.0193,$$

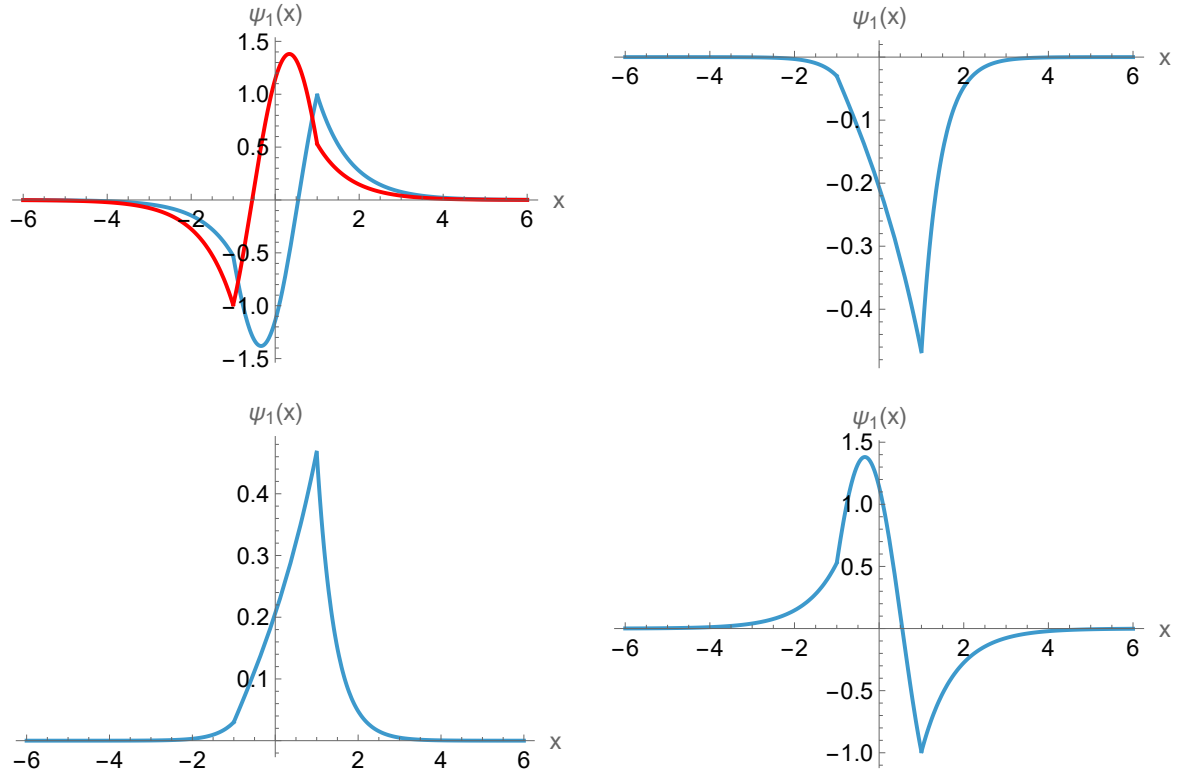


Figure 6: Componentes $\psi_{1,2}(x)$ del espinor resultante de la ecuación de Dirac $k = -2.3$, $\mathcal{A} = 3$, $\gamma = 0$, $\varepsilon_1 = -1.9085$ (izquierda-arriba), $\varepsilon_2 = -0.2943$ (derecha-arriba), $\varepsilon_3 = 0.2943$ (izquierda-abajo) y $\varepsilon_4 = 1.9085$ (derecha-abajo).

$$\varepsilon_2 = -0.4280,$$

$$\varepsilon_3 = 1.0904,$$

$$\varepsilon_4 = 2.2758.$$

Y si se calculan los coeficientes de manera análoga a la realizada con anterioridad (presentadas en el Anexo A), se representan las funciones de onda y se ven modificaciones que aparecen en cada uno de los estados por la perturbación eléctrica. La Figura 7 muestra las componentes $\psi_1(x)$ del espinor resultante de la ecuación de Dirac $k = -2.3$, $\mathcal{A} = 3$, $\gamma = 1$ y ε_i , $i = 1, 2, 3, 4$.

2. Casos magnéticos con una parte eléctrica, $\gamma = 2, 3$, para $k = -2.3$

Si se repite este mismo procedimiento con las perturbaciones $\gamma = 2$ y $\gamma = 3$, y se obtienen las siguientes energías dadas en la Tabla 1. A su vez, la Figura 8 muestra las soluciones para los casos

γ	ε_1	ε_2	ε_3	ε_4
2	-1.7278	-1.1344	0.2574	1.5564
3	-1.801	-0.5637	0.7422	1.9908

Table 1: Valores de la energía ε correspondientes a $\gamma = 2, 3$.

$\gamma = 2$ (columna izquierda) y $\gamma = 3$ (columna derecha). Las energías más negativas corresponden a la fila superior y las más positivas a la inferior.

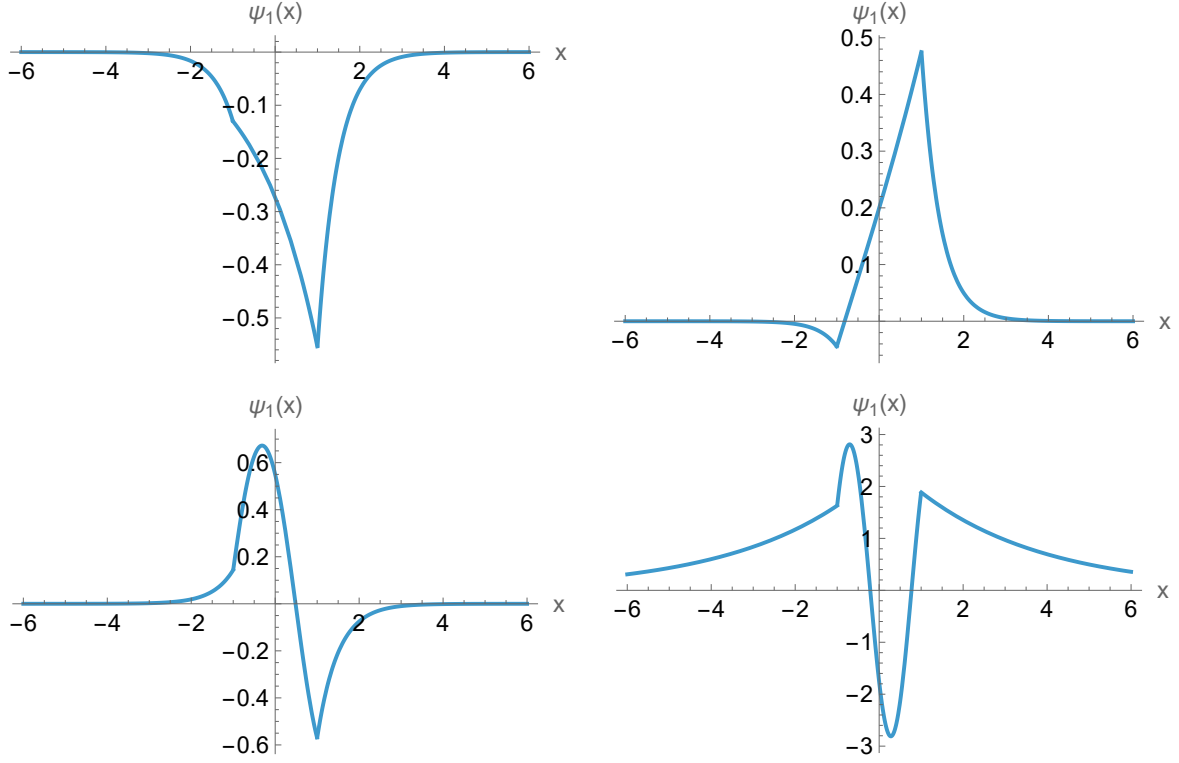


Figure 7: Componentes $\psi_1(x)$ del espinor resultante de la ecuación de Dirac $k = -2.3$, $\mathcal{A} = 3$, $\gamma = 1$, $\varepsilon_1 = -1.0193$ (izquierda-arriba), $\varepsilon_2 = -0.4289$ (derecha-arriba), $\varepsilon_3 = 1.0904$ (izquierda-abajo) y $\varepsilon_4 = 2.2758$ (derecha-abajo).

Es importante resaltar la diferencia entre los comportamientos trigonométricos (oscilatorios) y los hiperbólicos observados en las soluciones en la zona II en las Figuras 6, 7 y 8, cuando $p_{II} = \pm\sqrt{(\varepsilon + \gamma)^2 - [k + \mathcal{A}]^2}$ y $p_{II} = \pm i\sqrt{[k + \mathcal{A}]^2 - (\varepsilon + \gamma)^2}$ que corresponden, respectivamente, a las regiones representadas en las Figuras 3 y 4.

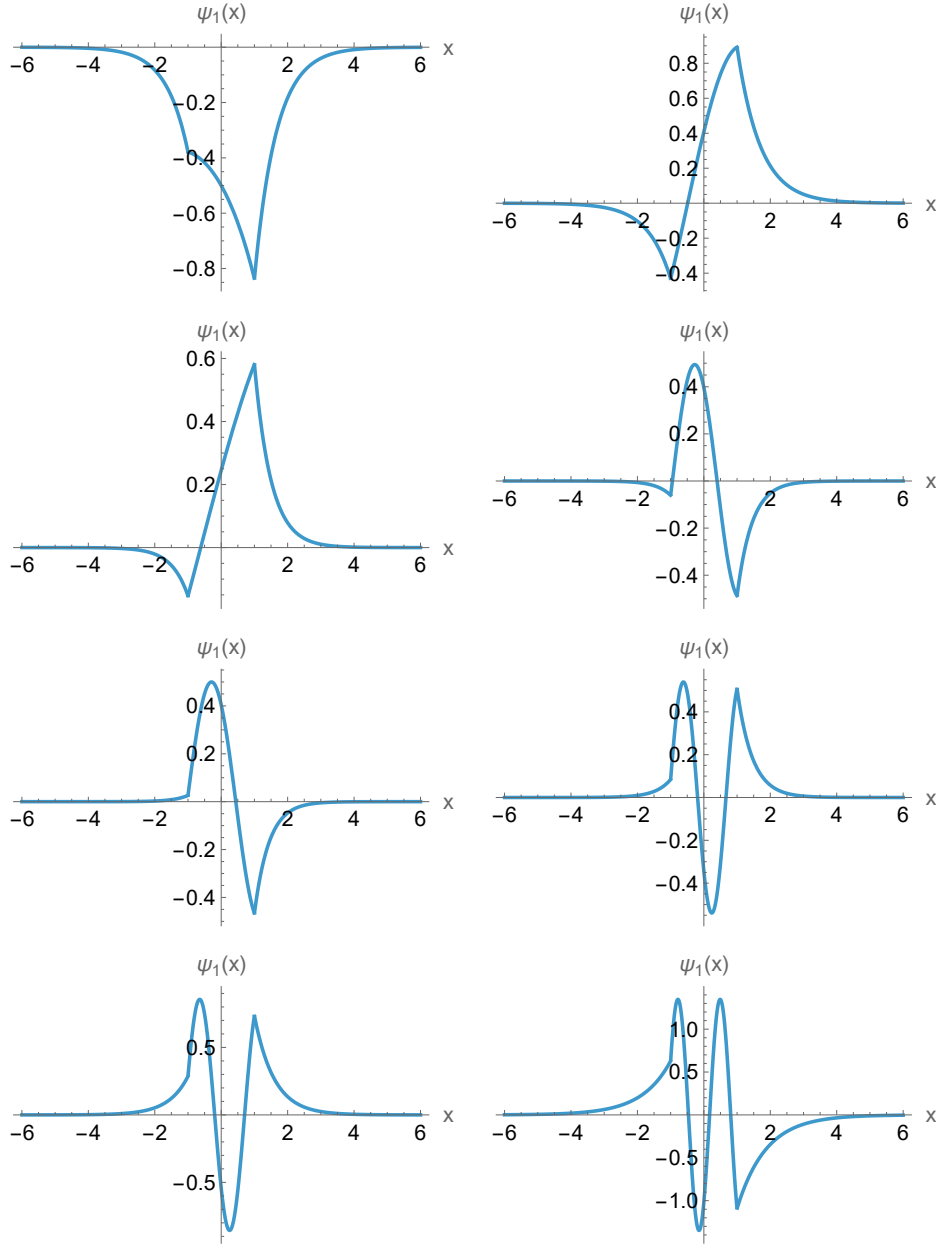


Figure 8: Componentes $\psi_1(x)$ del espinor resultante de la ecuación de Dirac $k = -2.3$, $\mathcal{A} = 3$, $\gamma = 2$ (columna izquierda), $\gamma = 3$ (columna derecha), correspondientes a las energías ε_i , $i = 1$ (primera fila), $i = 2$ (segunda fila), $i = 3$ (tercera fila), $i = 4$ (cuarta fila), en la Tabla 1.

3.3 Energía y funciones de onda en función de la perturbación eléctrica.

Ahora se presentará un análisis de la energía ε en función del potencial eléctrico $V(x)$, o equivalentemente de γ . Para valores fijos de k , y $\mathcal{A} = 3$.

La Figura 9 muestra las soluciones de las ecuaciones (30) y (32), en donde se puede ver en función de γ y ε , manteniendo en el campo magnético, para $k = -2.3, -2.5, -2.7, -3$. Además, un par de líneas horizontales color verde delimitan la banda permitida ($|k| < |\varepsilon|$), y una línea vertical color rojo representa la perturbación de valor $\gamma = 2$. Se puede apreciar como a medida que se escoge un $|k|$ mayor, la banda de energías permitidas se hace más grande.

En este rango de valores lo único que se aprecia es la dependencia lineal del espectro con la

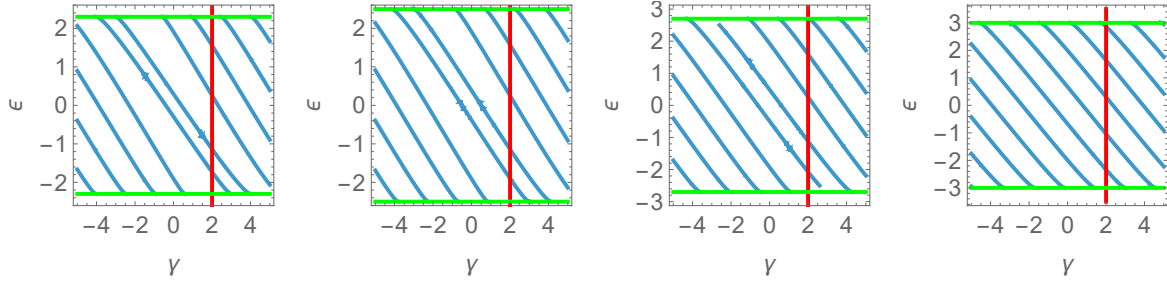


Figure 9: Soluciones (línea azul) de las ecuaciones (30) y (32) como función de γ y ε , para $\mathcal{A} = 3$ y $k = -2.3, -2.5, -2.7, -3$, respectivamente, de izquierda a derecha.

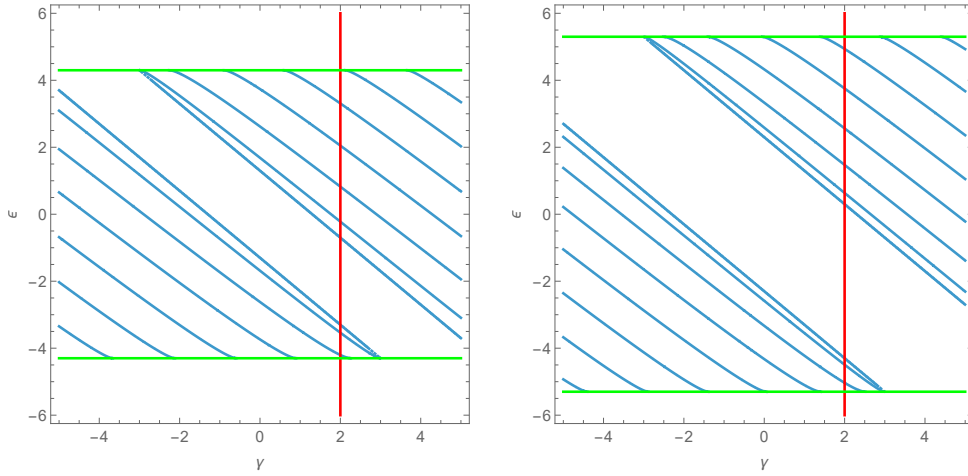


Figure 10: Soluciones (línea azul) de las ecuaciones (30) y (32) como función de γ y ε , para $\mathcal{A} = 3$ $k = -4.3$ (izquierda) y $k = -5.3$ (derecha).

perturbación γ , de manera que si $\gamma > 0$, la energía disminuye ya que corresponde a potencial eléctrico negativo, y aumenta para valores $\gamma < 0$. Es un comportamiento aceptable, pero no tiene nada de sorprendente.

Hemos hecho otra selección del rango de valores de los parámetros y hemos obtenido la Figura 11. En este caso hemos tomado valores más negativos de k . La influencia de la perturbación eléctrica es más interesante. Vemos que hay un gap entre niveles de energía superiores e inferiores. A medida que aumentamos γ los niveles bajan, pero lo más importante es que los dos inferiores colapsan en $\gamma = 3$. Lo mismo sucede cuando γ aumenta: hay dos niveles que colapsan en $\gamma = -3$.

Este comportamiento recuerda a estudiado en la referencia [3], en donde se mostraba el colapso de niveles magnéticos en otras condiciones. El hecho que lo hayamos confirmado para guías de onda nos parece un hecho relevante que se podría comprobar en un experimento de laboratorio.

3.4 Interpretación del número de estados ligados a partir de la ecuación de Schrödinger auxiliar

Ahora se realizará un cálculo que nos ayudará a dar sentido al número de estados ligados presentes en el sistema, conforme cambia k , y a través de una ecuación *auxiliar* del tipo Schrödinger. En lugar de la solución (11), vamos a proponer una solución del tipo

$$\psi(\vec{x}) = e^{iky} \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ i\psi_2(x) \end{pmatrix}, \quad (33)$$

para la ecuación (10). Ahora vamos a manipular la ecuación 10 en todas las zonas menos en las fronteras como primera aproximación, no teniendo en cuenta las deltas de Dirac que aparecen en estos puntos con el objetivo de simplificar las cuentas y las representaciones. Posteriormente se verá en que influye el no haber tenido esto en cuenta.

Esto nos lleva a

$$\begin{pmatrix} 0 & \partial_x + k + \mathcal{A} \\ -\partial_x + k + \mathcal{A} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = [\varepsilon + \gamma(x)] \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}. \quad (34)$$

Si definimos los operadores

$$K_{\pm} = \pm \partial_x + w, \quad w = k + \mathcal{A}, \quad (35)$$

y multiplicamos ambos lados de la ecuación (34) por $\begin{pmatrix} 0 & K_+ \\ K_- & 0 \end{pmatrix}$, se obtiene

$$\begin{pmatrix} K_+K_- & 0 \\ 0 & K_-K_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = (\varepsilon + \gamma)^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (36)$$

por lo que se ve la aparición de dos nuevos operadores; K_+K_- y K_-K_+ , que resultan ser:

$$K_+K_- = -\partial_{xx} + \partial_x w + w^2, \quad (37)$$

$$K_-K_+ = -\partial_{xx} - \partial_x w + w^2. \quad (38)$$

Nótese que se tienen entonces un par de ecuaciones tipo Schrödinger

$$H_{\pm}\psi_{\pm} = \varepsilon^2\psi_{\pm}, \quad (39)$$

donde $H_{\pm} = -\partial_{xx} + V_{\pm}$, $V_{\pm} = \pm \partial_x w + w^2 - 2\varepsilon\gamma - \gamma^2$ y $\psi_{\pm} = \psi_{1,2}$. Se puede apreciar que los potenciales de Schrödinger $V_{\pm}$ son pozos (o barreras) dependientes de la energía ε , con un par de deltas de Dirac (como las mostradas en color rojo en la Figura 2), por el primer término en $V_{\pm}$. Esto explica 1) que conforme $|k|$ aumente, un mayor número de estados ligados podrá alojar el pozo de Schrödinger, de acuerdo con lo que se vio en la sección anterior, y 2) que en el límite $|k| \rightarrow 0$, el potencial de Schrödinger tendrá un estado ligado (el correspondiente a la delta de Dirac negativa).

Es interesante representar estos $V_{\pm}$ para los valores de los parámetros en la Figura 5, esto es, para $k = -2, 3$, $\mathcal{A} = 3$, y $\gamma = 0, 1, 2, 3$, en las Figuras 11, 12, 13 y 14, respectivamente (sin tomar en cuenta las deltas de Dirac), para cada una de las energías accesibles (4 en cada caso) correspondientes a la Figura 5. Se puede apreciar la dependencia de la profundidad del pozo de potencial con la energía ε y que las energías (líneas horizontales rojas) correspondientes a las soluciones de (30) (aquellas en la Figura 3) se encuentran dentro del pozo de potencial, mientras que las soluciones de (32) (aquellas en la Figura 4, y correspondientes a los estados borde o edge states) yacen por debajo del mismo (compare con las Figuras 6, 7 y 8).

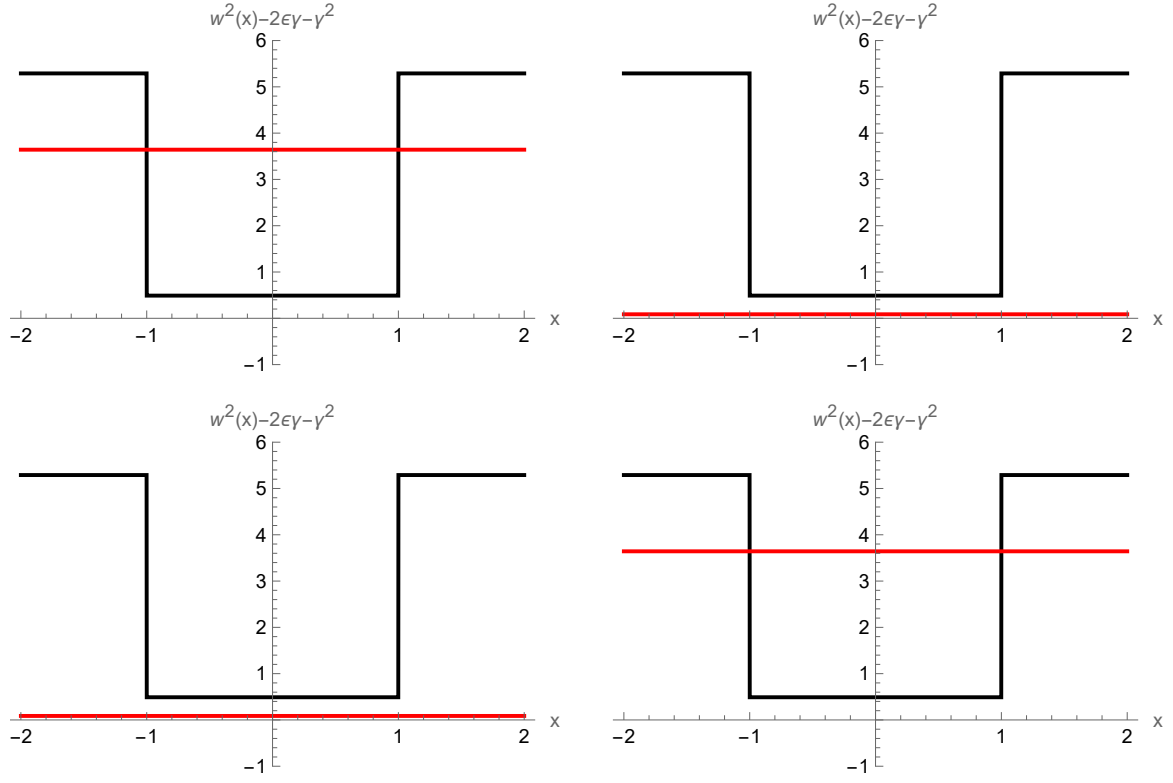


Figure 11: Potenciales para los estados ligados asociados a $k = -2, 3$, $\mathcal{A} = 3$, $\gamma = 0$, $\varepsilon_1 = -1.9085$ (izquierda-arriba), $\varepsilon_2 = -0.2943$ (derecha-arriba), $\varepsilon_3 = 0.2943$ (izquierda-abajo) y $\varepsilon_4 = 1.9085$ (derecha-abajo).

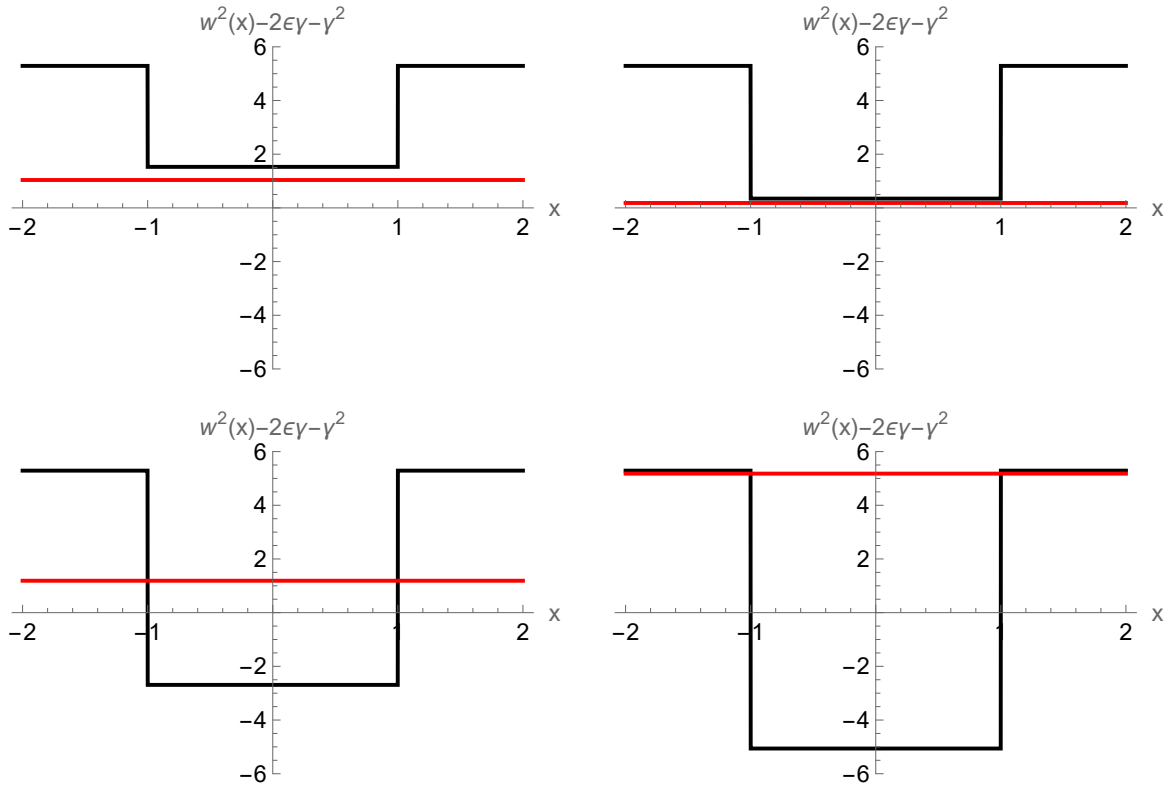


Figure 12: Potenciales para los estados ligados asociados a $k = -2, 3$, $\mathcal{A} = 3$, $\gamma = 1$, $\varepsilon_1 = -1.0193$ (izquierda-arriba), $\varepsilon_2 = -0.4289$ (derecha-arriba), $\varepsilon_3 = 1.0904$ (izquierda-abajo) y $\varepsilon_4 = 2.2758$ (derecha-abajo).

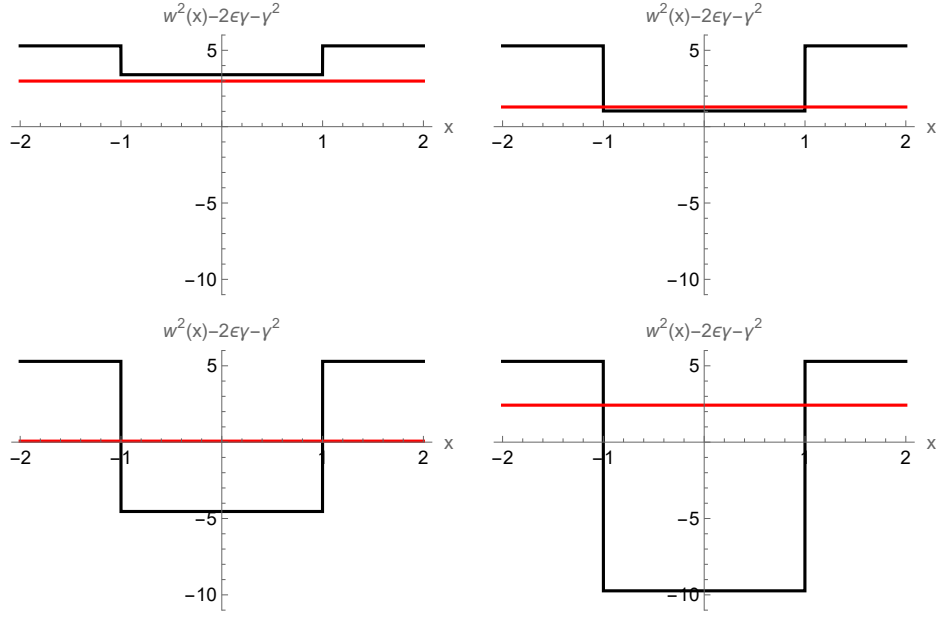


Figure 13: Potenciales para los estados ligados asociados a $k = -2, 3$, $\mathcal{A} = 3$, $\gamma = 2$, $\varepsilon_1 = -1.7278$ (izquierda-arriba), $\varepsilon_2 = -1.1344$ (derecha-arriba), $\varepsilon_3 = 0.2574$ (izquierda-abajo) y $\varepsilon_4 = 1.5564$ (derecha-abajo).

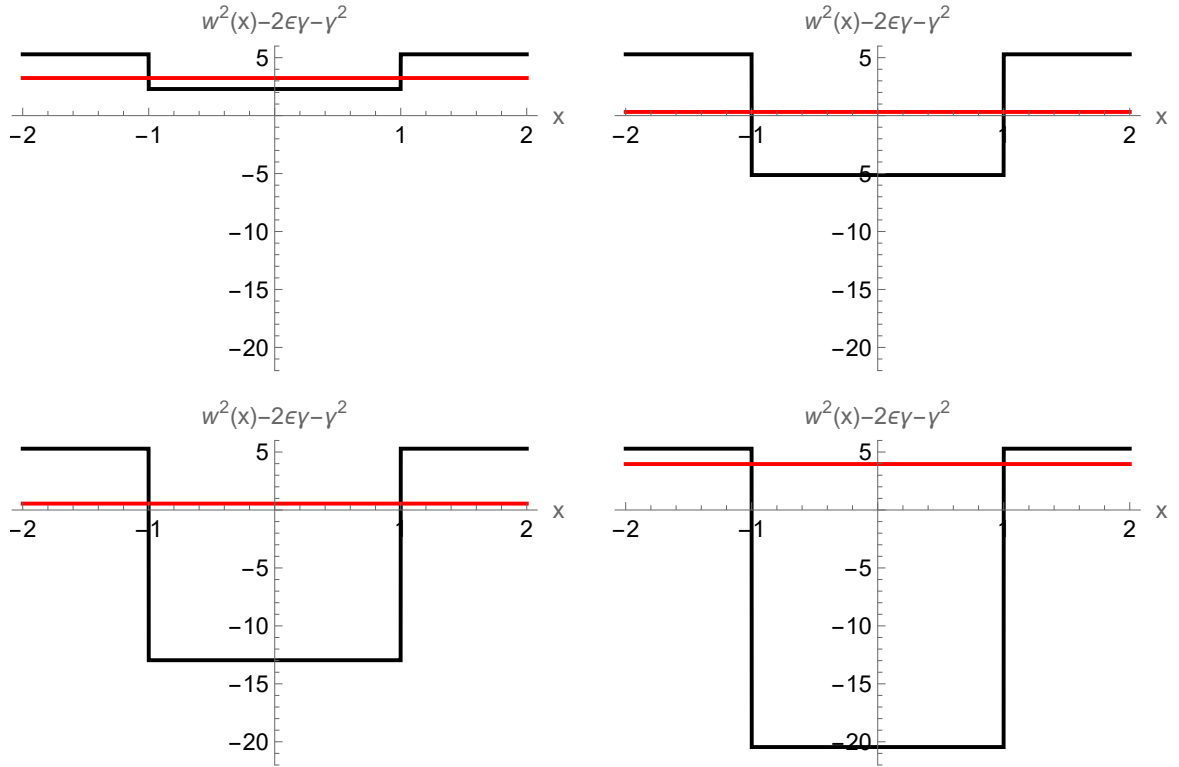


Figure 14: Potenciales para los estados ligados asociados a $k = -2, 3$, $\mathcal{A} = 3$, $\gamma = 3$, $\varepsilon_1 = -1.801$ (izquierda-arriba), $\varepsilon_2 = -0.5637$ (derecha-arriba), $\varepsilon_3 = 0.7422$ (izquierda-abajo) y $\varepsilon_4 = 1.9908$ (derecha-abajo).

3.5 Densidad de corriente de probabilidad.

En la ecuación de Dirac J_x y J_y tienen otra definición distinta a la usada normalmente con la ecuación de Schrödinger

$$J_i = \psi^\dagger(\vec{x}) \sigma_i \psi(\vec{x}), \quad i = x, y, \quad \psi(\vec{x}) = e^{iky} \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}, \quad (40)$$

(nótese la diferencia en la segunda componente en $\psi(\vec{x})$ con respecto a la solución propuesta en la sección anterior). Se tiene que de forma general para las tres zonas

$$J_x = \psi^\dagger(\vec{x}) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \psi(\vec{x}) = \psi_1^* \psi_2 + \psi_1 \psi_2^* = 2 \operatorname{Re}(\psi_1 \psi_2^*). \quad (41)$$

De forma análoga para J_y resulta que

$$J_y = -2 \operatorname{Im}(\psi_1 \psi_2^*). \quad (42)$$

Por lo que el proceso para calcular la densidad de corriente en cada zona será utilizar las expresiones (41) y (42). Para la zona I, si llamamos a $\beta = \sqrt{k^2 - \varepsilon^2}$, la solución

$$\psi(\vec{x}) = \psi_I(\vec{x}) = A_1 e^{\beta x + iky} \begin{pmatrix} \varepsilon \\ -i\beta + ik \end{pmatrix}, \quad (43)$$

por lo que entonces

$$\psi_1 = A_1 \varepsilon e^{\beta x + iky}, \quad (44)$$

$$\psi_2 = -i A_1 (\beta - k) e^{\beta x + iky}, \quad (45)$$

y haciendo el conjugado hermitico de ψ_2

$$\psi_2^* = i A_1^* (\beta - k) e^{\beta x - iky}. \quad (46)$$

Se tiene entonces que

$$\psi_1 \psi_2^* = i |A_1|^2 \varepsilon (\beta - k) e^{2\beta x}, \quad (47)$$

y usando (41) y (42)

$$J_x = 0, \quad (48)$$

$$J_y = -2 |A_1|^2 \varepsilon (\beta - k) e^{2\beta x}. \quad (49)$$

De manera análoga, para la zona III

$$\psi(\vec{x}) = \psi_{III}(\vec{x}) = A_3 e^{-\beta x + iky} \begin{pmatrix} \varepsilon \\ i\beta + ik \end{pmatrix}. \quad (50)$$

Entonces, el producto de la primera componente por la segunda conjuada

$$\psi_1 \psi_2^* = -i |A_3|^2 \varepsilon (\beta + k) e^{-2\beta x}. \quad (51)$$

Por lo que las densidades de corriente de probabilidad en a zona III resultan

$$J_x = 0, \quad (52)$$

$$J_y = 2 |A_3|^2 \varepsilon (\beta + k) e^{-2\beta x}. \quad (53)$$

En la zona II el cálculo será algo mas tedioso, debido a que cada componente de la función de onda depende de dos contantes

$$\psi(\vec{x}) = e^{iky} \begin{pmatrix} (\varepsilon + \gamma)[A_2 e^{i\beta'x} + B_2 e^{-i\beta'x}] \\ A_2(\beta' + ik') e^{i\beta'x} + B_2(-\beta' + ik') e^{-i\beta'x} \end{pmatrix}, \quad (54)$$

donde se han definido $\beta' = \sqrt{(\varepsilon + \gamma)^2 - k'^2}$ y $k' = k + \mathcal{A}$. Y de nuevo se calcula el conjugado de la segunda componente:

$$\psi_2^* = e^{-iky} (A_2^* (\beta' - ik') e^{-i\beta' x} - B_2^* (\beta' + ik') e^{i\beta' x}). \quad (55)$$

Consecuentemente el producto de las dos componentes

$$\psi_1 \psi_2^* = (\varepsilon + \gamma) \{ \beta' [|A_2|^2 - |B_2|^2 - 2i \operatorname{Im}(A_2 B_2^* e^{2i\beta' x})] - ik' [|A_2|^2 + |B_2|^2 + 2 \operatorname{Re}(A_2 B_2^* e^{2i\beta' x})] \}, \quad (56)$$

por lo que la densidad de corriente de probabilidad en la segunda zona

$$J_x = 2(\varepsilon + \gamma) (|A_2|^2 - |B_2|^2) \operatorname{Re}(\beta'), \quad (57)$$

$$J_y = -2(\varepsilon + \gamma) \{ k' [|A_2|^2 + |B_2|^2 + 2 \operatorname{Re}(A_2 B_2^* e^{2i\beta' x})] + \operatorname{Im}(\beta' [|A_2|^2 - |B_2|^2 - 2i \operatorname{Im}(A_2 B_2^* e^{2i\beta' x})]) \}, \quad (58)$$

que pueden parecer expresiones muy complicadas, pero solo tienen dependencia en x con senos y cosenos.

4 Estados Scattering.

Una vez se han visto los estados ligados y sus energías, es interesante estudiar los estados de dispersión o scattering. La composición de la función de onda va a ser diferente dependiendo de en que zona estemos. En la primera zona se va a tener dos términos uno que corresponde a la onda incidente, y otro al de la reflejada. En la segunda zona de nuevo, al igual que la primera, constituirán la función de onda un término de la transmitida y otro de la reflejada. Y por último en la tercera zona solo habrá un término de onda transmitida. La función de onda en la primera zona será:

$$\psi(\vec{x}) = \psi_I^+(x) + \psi_I^-(x), \quad (59)$$

donde $\psi_I^+(x)$ corresponde al término de onda incidente, momento positivo, y $\psi_I^-(x)$ corresponde al término de onda reflejada, momento negativo. Teniendo en cuenta los cálculos ya realizados para los estados ligados, estos tendrán la siguiente forma:

$$\psi_I^\pm(x) = I_\pm e^{i(\pm\tilde{\mu}x + ky)} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \pm\tilde{\mu} + ik \end{pmatrix}. \quad (60)$$

Por la similitud de las zonas I y III es trivial ver que para la tercera zona:

$$\psi_{III}^+(x) = T_+ e^{i(\tilde{\mu}x + ky)} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \tilde{\mu} + ik \end{pmatrix}, \quad (61)$$

debido a que en esta solo tendremos término positivo como ya se mencionó, y teniendo en cuenta que se definió $\tilde{\mu} = \sqrt{\varepsilon^2 - k^2}$. En la segunda zona se tiene tanto potencial eléctrico como magnético, y hay dos términos:

$$\psi_{II}(\vec{x}) = \psi_{II}^+(x) + \psi_{II}^-(x), \quad (62)$$

que tienen la forma:

$$\psi_{II}^\pm(x) = A_\pm e^{i(\pm\mu x + ky)} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon + \gamma \\ \pm\mu + i(k + \mathcal{A}) \end{pmatrix}, \quad (63)$$

en donde $\mu = \sqrt{(\varepsilon + \gamma)^2 - (k + \mathcal{A})^2}$. Si se procede de la misma forma que en el caso de los estados ligados, aplicando las condiciones de frontera, fijando valores del potencial eléctrico y magnético y el momento en y , se pueden obtener los valores de las constantes $I_\pm, A_\pm, T_+$, y consecuentemente de los coeficientes de transmisión T y reflexión R , y para hallar los coeficientes de reflexión y de transmisión solo habría que hacer los cocientes

$$R = \frac{I_-}{I_+}, \quad T = \frac{T_+}{I_+}. \quad (64)$$

4.1 Coeficientes de transmisión y reflexión, y funciones de onda en función de la energía.

Usando las soluciones de la sección previa, se obtiene una expresión para el coeficiente de transmisión

$$T = \frac{\mu\tilde{\mu}e^{-2i\tilde{\mu}}\tilde{\mu}\mu}{\mu\tilde{\mu}\cos(2\mu) - i[\varepsilon(\varepsilon + \gamma) - k(\mathcal{A} + k)]\sin(2\mu)}, \quad (65)$$

A la vez que se sabe que

$$T + R = 1. \quad (66)$$

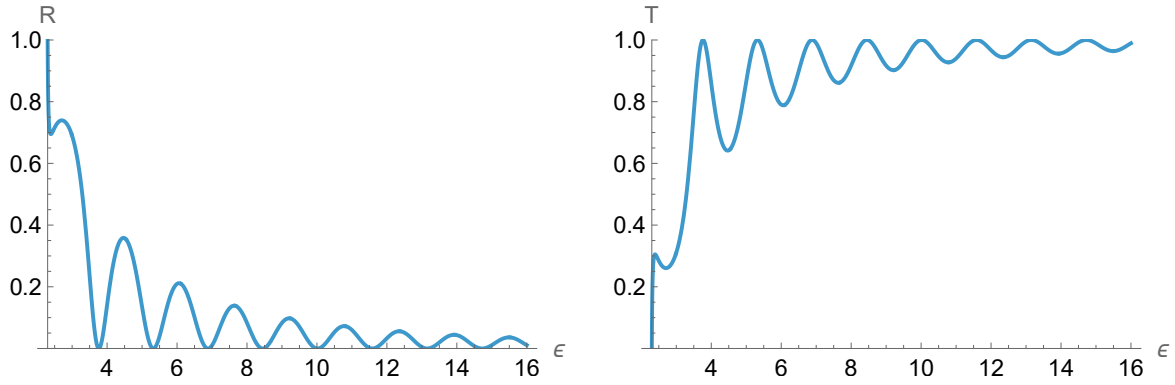


Figure 15: Coeficientes de Transmisión y reflexión, de acuerdo con (65) y (66), para $k = -2.3$, $\mathcal{A}$ y $\gamma = 1$.

La Figura 15 muestra los coeficientes de reflexión R (izquierda) y transmisión T (derecha), para algunos valores de los parámetros. Nótese que el régimen de dispersión se tiene para $|\varepsilon| > |k|$. Se puede ver fácilmente como aparecen puntos donde $T = 1$, estos son conocidos como puntos de resonancia, donde toda la onda incidente es transmitida y cumplen la condición de $\mu = n\pi$. Se puede ver ahora como cambia esto al cambiar el potencial eléctrico. Se aprecia como no hay ningún patrón claro a la hora de ir incrementando γ de izquierda a derecha en la Figura 16.

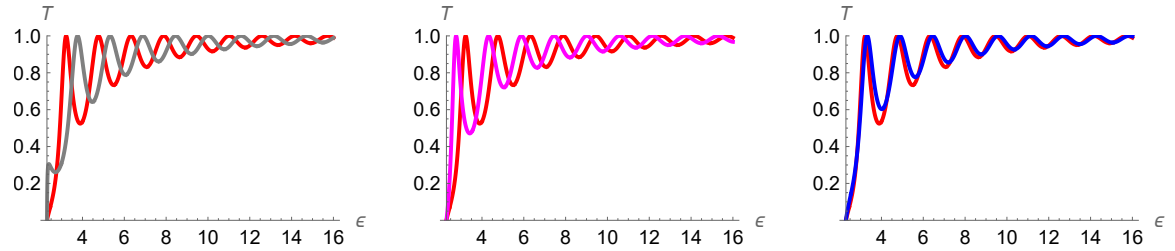


Figure 16: Comparativa del coeficiente de transmisión en el caso puramente con los tres casos con perturbación eléctrica, $\gamma = 0$ en rojo, $\gamma = 1$ en gris, $\gamma = 2$ en rosa, $\gamma = 3$ en azul.

Ahora es interesante ver la forma que tiene la solución $\psi_1(x)$ para distintos casos de energía: para puntos de resonancia, punto genérico y un punto donde T es mínimo. La Figura 17 muestra la solución $\psi_1(x)$, para dos energías ε que corresponden a puntos resonantes son $\varepsilon = 3.7641$ (izquierda) y $\varepsilon = 5.32206$ (derecha). Se aprecia como la amplitud de la onda incidente es la misma que la amplitud de la onda saliente, siendo ambas funciones muy similares, con la diferencia que al aumentar ε aparecen más oscilaciones en la zona II.

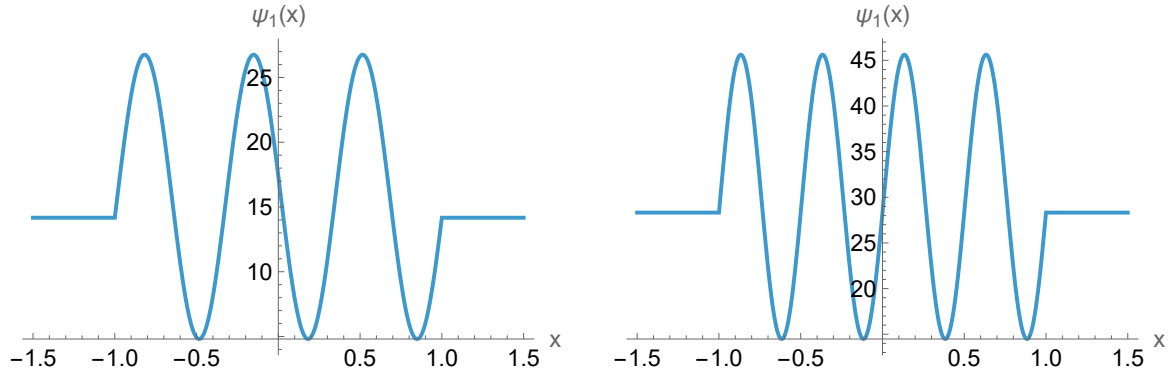


Figure 17: Soluciones $\psi_1(x)$ correspondientes a puntos de resonancia, $\varepsilon = 3.7641$ (izquierda) y $\varepsilon = 5.32206$ (derecha).

A su vez, la Figura 18 muestra la solución $\psi_1(x)$ para la energía asociada a un punto genérico y a un punto de mínima transmisión, $\varepsilon = 4$ y $\varepsilon = 4.5$, respectivamente. En esta ocasión es fácil ver que no se transmite toda la onda, si no que solo es transmitida una fracción de la amplitud incidente, siendo mucho menor en el caso de la transmisión mínima como era de esperar.

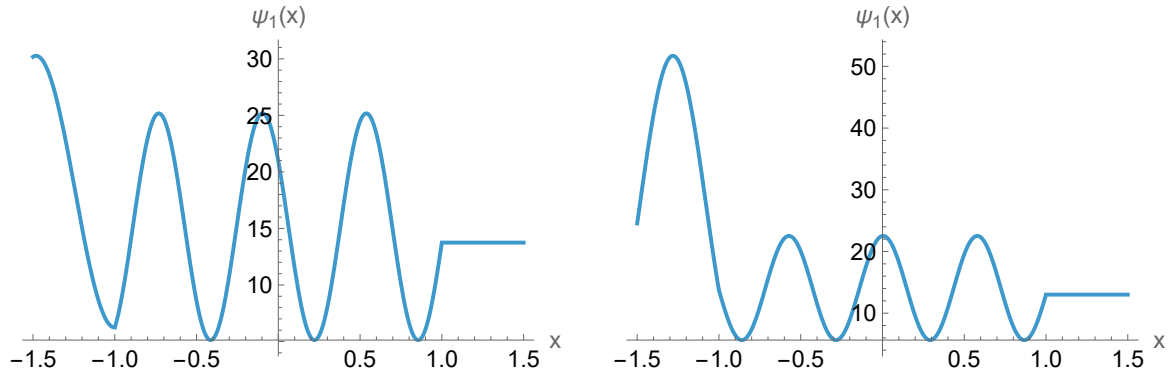


Figure 18: Soluciones $\psi_1(x)$ correspondientes a un punto genérico y un punto de mínima transmisión, $\varepsilon = 4$ (izquierda) y $\varepsilon = 4.5$ (derecha).

4.2 Coeficientes de transmisión y reflexión en función del ángulo de incidencia.

Una vez se ha estudiado el coeficiente de transmisión en función del valor de la energía, es interesante también parametrizarlo con el ángulo de incidencia θ para estudiar como variará la transmisión dependiendo de la dirección de incidencia de la partícula.

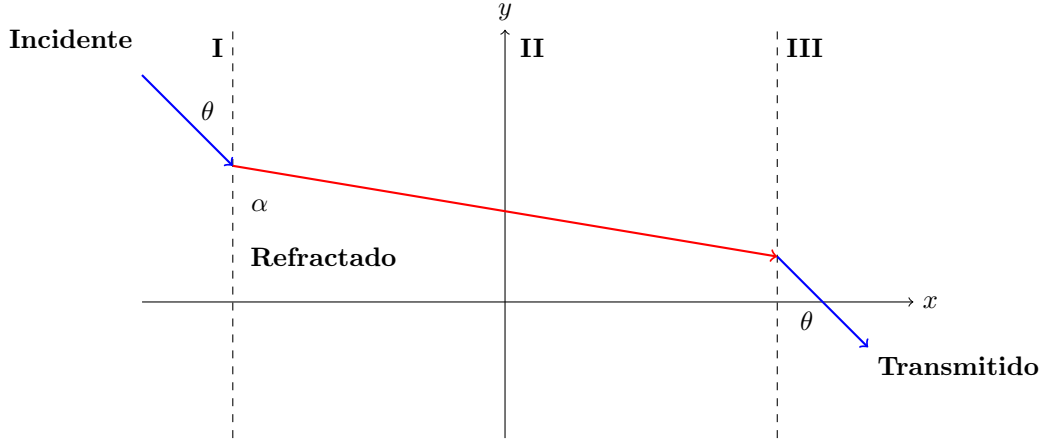


Figure 19: Haz de electrones incidentes y transmitidos con ángulo θ , y refractados con ángulo α

Si el electrón incide con un momento $\vec{p} = (p, k)$, se tiene que incide con un ángulo θ tal que (vea Figura 19)

$$\tan(\theta) = \frac{k}{p}. \quad (67)$$

Además, la energía ε se relacionaba con los momentos en ambas direcciones de la siguiente manera

$$\varepsilon^2 = k^2 + p^2. \quad (68)$$

Es posible entonces mediante esas ecuaciones obtener la energía en función del ángulo de incidencia θ y k , resultando en

$$\varepsilon = \frac{k}{\sin \theta}. \quad (69)$$

Por lo que ahora en la expresión del coeficiente de transmisión (65) la dependencia no será con ε , si no que dependerá de $\frac{k}{\sin \theta}$. Entonces, ahora se volverá a representar el coeficiente de transmisión T como en función del seno y coseno del ángulo de incidencia, una vez fijados los valores de γ , $\mathcal{A}$, y k , como se hizo anteriormente.

Para el caso en el que no se introduce la perturbación eléctrica, $\gamma = 0$, $\mathcal{A} = 3$ vamos a estudiar dos casos para $k < 0$ y para $k > 0$ por razones que se verán a continuación.

El coeficiente de transmisión T para $k = \pm 2.3$ se muestra en la Figuras 20 y 21, respectivamente.

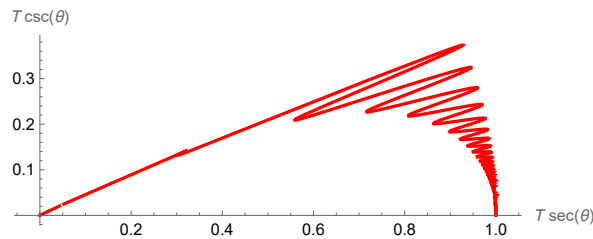


Figure 20: Coeficiente de transmisión T para $\gamma = 0$, $\mathcal{A} = 3$ y $k = 2.3$.

Sin embargo, para apreciar mejor sus diferencias se puede representar todo en el mismo gráfico. Esto se muestra en la Figura 22. En este caso los puntos de resonancia son los puntos en los que el gráfico tiene radio unitario. Como se puede apreciar no existe simetría en el signo del momento en el eje como cabría esperar, debido a que el campo magnético está en esta dirección, lo que hace que no sea equivalente incidir positiva o negativamente en la dirección y .

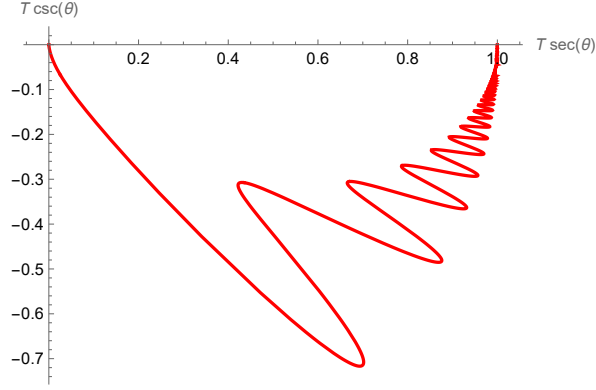


Figure 21: Coeficiente de transmisión T para $\gamma = 0$, $\mathcal{A} = 3$ y $k = -2.3$.

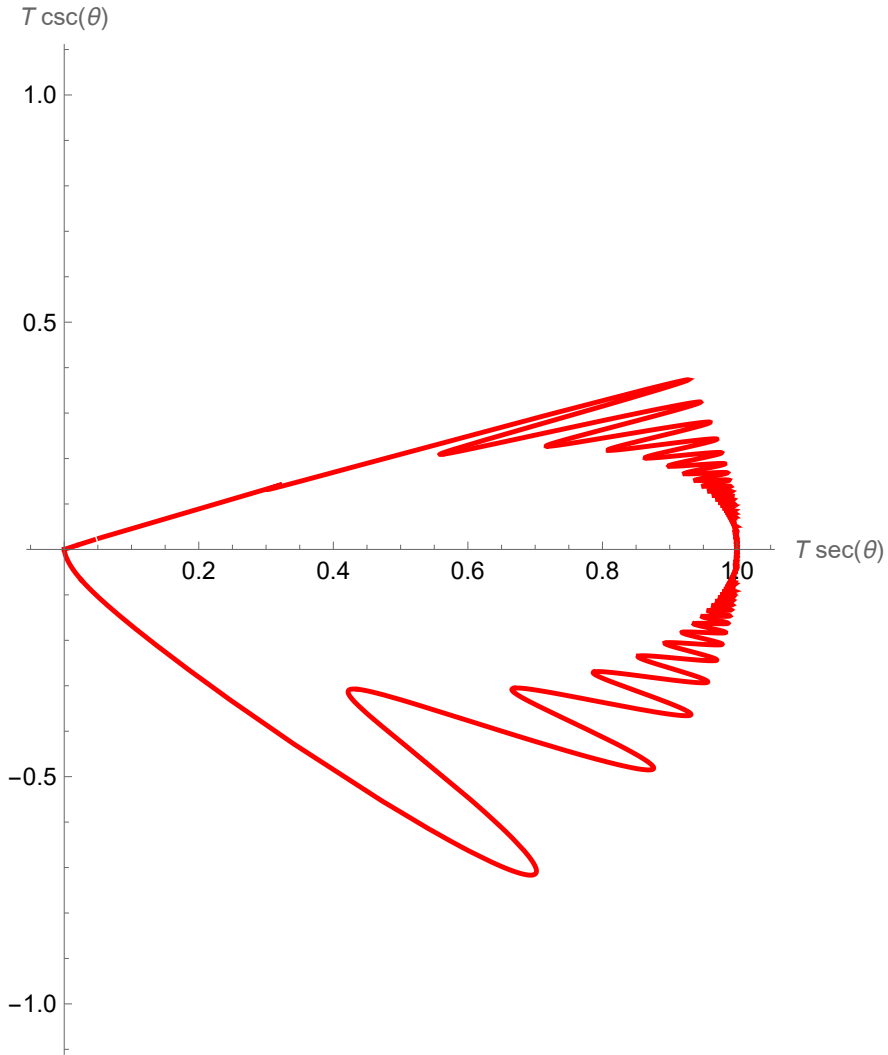


Figure 22: Coeficiente de transmisión T para $\gamma = 0$, $\mathcal{A} = 3$ y $k = \pm 2.3$.

Si ahora se introduce la perturbación eléctrica, $\gamma = 1$ por ejemplo, el coeficiente de transmisión T para $k = \pm 2.3$ se muestra en la Figura 23. Se pueden observar algunas variaciones con respecto al caso anterior, sin embargo la tendencia es la misma.

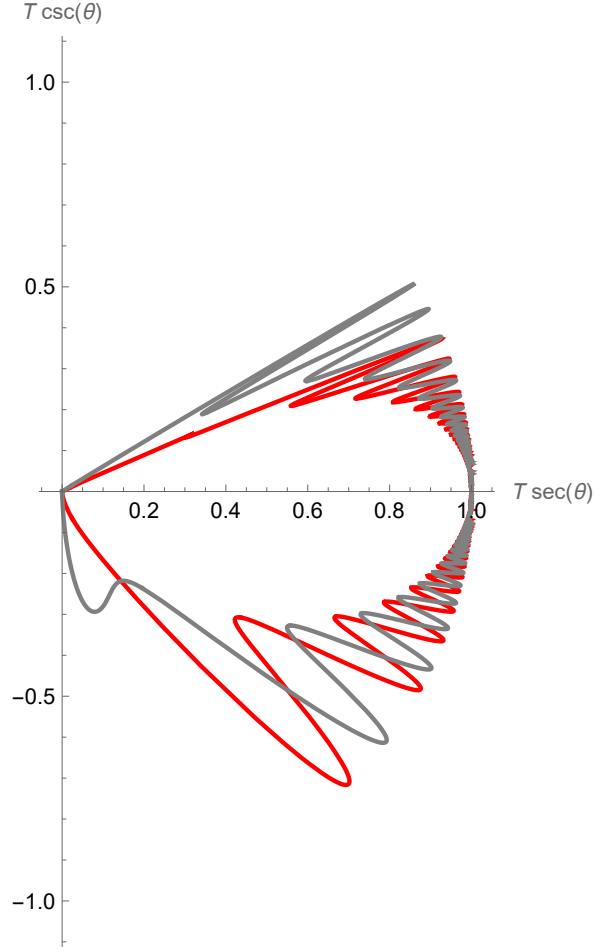


Figure 23: Coeficiente de transmisión para $\gamma = 1$, $\mathcal{A} = 3$ y $k = \pm 2.3$ (gris) comparado con el caso puramente magnético ($\mathcal{A} = 0$ en color rojo).

Cuando la perturbación eléctrica es comparable al campo magnético aplicado que la gráfica del coeficiente de transmisión cambia drásticamente. En particular, la Figura 24 muestra el caso $\gamma = A_y = 3$.

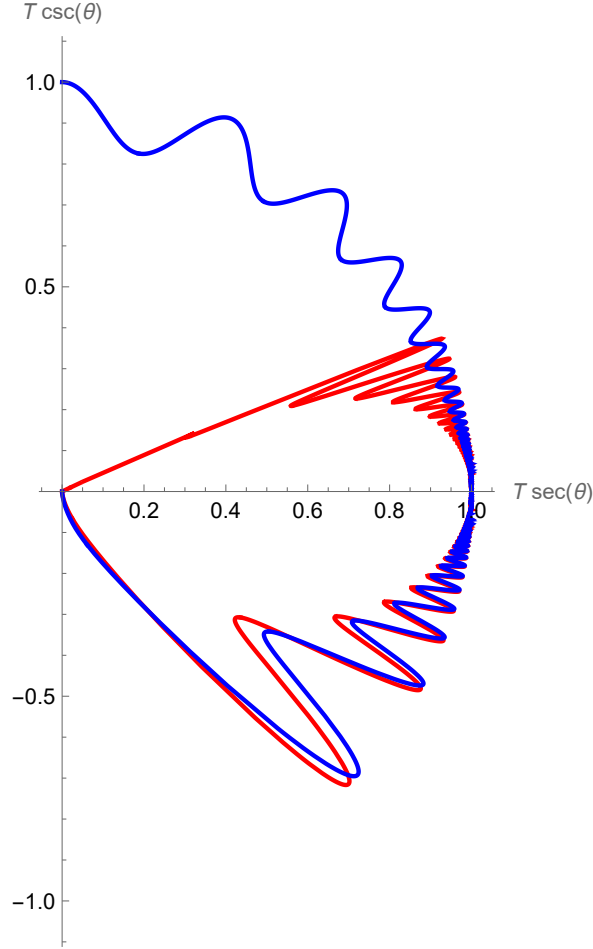


Figure 24: Coeficiente de transmisión para $\gamma = \mathcal{A} = 3$ y $k = \pm 2.3$ (azul), comparado con el caso puramente magnético ($\mathcal{A} = 0$ en color rojo).

4.3 Densidad de corriente de probabilidad.

Para obtener la información de la densidad de corriente de probabilidad en el caso de los estados de dispersión, el cálculo sería igual que en el caso de los estados ligados, pero usando las funciones de onda correspondientes de los estados de dispersión en cada zona. Es decir que se aplicará de nuevo las ecuaciones (41) y (42) para hallar J_x y J_y . En la primera zona la función de onda viene dada por

$$\psi_I(\vec{x}) = e^{iky} \begin{pmatrix} \varepsilon(I_+ e^{i\tilde{\mu}x} + I_- e^{-i\tilde{\mu}x}) \\ I_+ e^{i\tilde{\mu}x}(\tilde{\mu} + ik) + I_- e^{-i\tilde{\mu}x}(-\tilde{\mu} + ik) \end{pmatrix}, \quad (70)$$

por lo que el producto de la primera componente por la segunda conjugada resulta

$$\psi_1 \psi_2^* = \varepsilon \{ |I_+|^2 (\tilde{\mu} - ik) - |I_-|^2 (\tilde{\mu} + ik) - 2i \operatorname{Im}(I_+ I_-^* [\tilde{\mu} + ik] e^{2i\tilde{\mu}x}) \}. \quad (71)$$

Entonces, en la primera zona

$$J_x = 2\varepsilon \operatorname{Re}(\tilde{\mu})(|A|^2 - |B|^2), \quad (72)$$

$$J_y = -2\varepsilon \{ \operatorname{Im}(\tilde{\mu})(|A|^2 - |B|^2) - k(|A|^2 + |B|^2) - 2 \operatorname{Im}(AB^* [\tilde{\mu} + ik] e^{2i\tilde{\mu}x}) \}. \quad (73)$$

Ahora repetimos el proceso para las zonas II y III. En la segunda zona

$$J_x = 2\varepsilon \operatorname{Re}(\mu)(|A_+|^2 - |A_-|^2), \quad (74)$$

$$J_y = -2\varepsilon \{ \operatorname{Im}(\mu)(|A_+|^2 - |A_-|^2) - k'(|A_+|^2 + |A_-|^2) - 2 \operatorname{Im}(A_+ A_-^* [\mu + ik'] e^{2i\mu x}) \}. \quad (75)$$

En la tercera:

$$J_x = 2|T|^2 \varepsilon \operatorname{Re}(\tilde{\mu}), \quad (76)$$

$$J_y = -2|T|^2 \varepsilon [\operatorname{Im}(\tilde{\mu}) - k]. \quad (77)$$

A diferencia del caso de los estados ligados, ahora $J_x \neq 0$ en la primera y tercera zona, lo cual tiene sentido porque los estados ligados se desvanecen en estas zonas mientras que los estados de dispersión no.

5 Comparación del caso estudiado con el puramente magnético.

Una vez se han obtenido los estados ligados y sus energías, los estados de dispersión, los coeficientes de transmisión y reflexión, es interesante ver y comparar como la aparición de la perturbación eléctrica ha modificado el espectro del sistema en cada ocasión.

En cada respectivo apartado cuando se realizaron los calculos ya se mencionaron las diferencias más visibles tanto valores numéricos como cambios en el comportamiento de las magnitudes físicas involucradas pero ahora se va indagar un poco mas en las causas físicas de estos cambios en los resultados.

Antes de que haya un campo eléctrico tal que esté asociado a un potencial $V(x)$, se disponía de una simetría espacial en la dirección x . En el momento en el que se introduce $V(x) \neq 0$ en la zona II, se rompe dicha simetría, lo cual se refleja en factores como la deformación de las funciones de onda y en la asimetría del coeficiente de transmisión con el ángulo de incidencia. Otra diferencia que es causante de la variación de los resultados en ambos caso es el hecho de introducir el término del potencial en el acople mínimo, alterando directamente el término de energía del Hamiltoniano. También se ha visto como hay una pérdida de transmisión perfecta a la hora de introducir campo eléctrico en nuestro sistema, esto se debe a que una vez hay potencial eléctrico no nulo, ya no está garantizada la conservación de la quiralidad y del pseudoespín como en el caso puramente magnético, por lo que se ve como hay una pérdida de transmisión perfecta debido a esto. Es por estos argumentos y causas físicas que se dan las diferencias en los resultados obtenidos de los casos magnético puro $\gamma = 0$ y con campo eléctrico y magnético $\gamma \neq 0$.

6 Conclusiones.

Ahora en esta sección se va realizar un resumen paso por paso de lo que se ha realizado en este trabajo en cada apartado y las implicaciones más importantes en cada uno de estos.

Energía de los estados ligados en función de k y ε , variando $V(x)$. Se estudiaron las peculiaridades de trabajar con un pozo de Dirac en lugar del caso común de Schrödinger, viendo como daba lugar a funciones de onda hiperbólicas y dependiendo de la zona de la gráfica se tuvo que utilizar una de las dos desigualdades. Se obtuvieron las energías correspondientes a cada estado y posteriormente se representaron dichas funciones de onda, viendo una clara simetría entre ambas componentes del espinor.

Energía de los estados ligados en función de $V(x)$ y ε , variando k . En este apartado se aplicó el mismo procedimiento explicado anteriormente, estudiando las energías como función de V y ε , a su vez observando una consistencia con los resultados obtenidos en el caso de la dependencia en k y ε .

Interpretación. Tras haber calculado los estados se dió una explicación al número de estados ligados presentes en el sistema dependiendo de los parametros del problema y tambien se vió la particularidad del caso estudiado viendo como la energía del sistema influenciaba al pozo con el que se trabajó. Posteriormente se calculó las densidades de corriente de los estados ligados viendo como estas en las zonas exteriores eran nulas en la componente x como era de esperar al tratarse de estados ligados.

Estados de dispersión. Ahora se pasó a estudiar los estados de Scattering calculando los coeficientes de transmisión y reflexión en función de la energía. Se vieron tambien los puntos de resonancia en estos y sus respectivas funciones de onda. Después se estudió una vez más el coeficiente de transmisión como función del ángulo de incidencia, en lugar de la energía,.

Comparación. Se vió por último las causas físicas algo mas profundas de las diferencias entre el caso puramente magnético y el caso con campo eléctrico.

Se puede concluir entonces la consistencia de los resultados obtenidos en el presente trabajo, teniendo en cuenta las limitaciones de este debido a las fuertes condiciones y aproximaciones que han sido utilizadas, pero por el cual a través de este se ven soluciones analíticas, aplicables posteriormente al confinamiento de electrones de Dirac en el grafeno.

A Tablas de coeficientes de los estados ligados para k constante.

En el trabajo solo se incluyen los valores obtenidos para las constantes de las funciones de onda en un caso para que no sea monótono, en este Anexo se adjuntan los valores para los casos restantes, para $\gamma = 1$:

	A_1	A_2	B_2	A_3
ε_1	1	-0.1976	14.2930	4.2789
ε_2	1	-0.3747	0.7229	-10.6536
ε_3	1	0.1314+0.0927i	0.1314-0.927i	-3.9662
ε_4	1	-0.2689+0.3341i	-0.2689-0.3341i	1.1269

Table 2: Valor de las constantes de las funciones de onda de los estados ligados.

Para $\gamma = 2$:

	A_1	A_2	B_2	A_3
ε_1	1	-0.3091	-1.5274	2.2098
ε_2	1	0.1416-0.4355i	0.1416+0.4355i	-3.7912
ε_3	1	0.0896+0.0651i	0.0896-0.0651i	-17.8137
ε_4	1	-0.0762+0.0931i	-0.0762-0.0931i	2.5657

Table 3: Valor de las constantes de las funciones de onda de los estados ligados.

Para $\gamma = 3$:

	A_1	A_2	B_2	A_3
ε_1	1	0.1711-0.3337i	0.1711+0.3337i	-2.0711
ε_2	1	0.0814+0.0605i	0.0814-0.0605i	8.0347
ε_3	1	-0.0459+0.0555i	-0.0459-0.0555i	6.0313
ε_4	1	-0.1019-0.0885i	-0.1019+0.0885i	-1.7339

Table 4: Valor de las constantes de las funciones de onda de los estados ligados.

B Tablas de coeficientes de los estados ligados para γ constante.

Aquí vienen los valores de las constantes de las funciones de onda para el caso en el que se fija un valor del potencial eléctrico, $\gamma = 2$, y se hallan los estados para diferentes valores de k . Para $k=-2.3$:

	A_1	A_2	B_2	A_3
ε_1	1	0.8513-2.9035i	0.8513+2.9035i	5.4171
ε_2	1	0.1416-0.4355i	0.1416+0.4355i	-3.7912
ε_3	1	0.0896+0.0650i	0.0896-0.0650	-17.8137
ε_4	1	-0.0762+0.0931i	-0.0762-0.0931i	2.5657

Table 5: Valor de las constantes de las funciones de onda de los estados ligados.

Para $k = -2.5$

Para $k = -2.7$

	A_1	A_2	B_2	A_3
ε_1	1	-0.4839	-4.7317	2.1731
ε_2	1	0.1472-0.2861i	0.1472+0.2861i	-4.1445
ε_3	1	0.0747+0.0596i	0.0747-0.0596i	-19.806
ε_4	1	-0.0652+0.0751i	-0.0652-0.0751i	2.8310

Table 6: Valor de las constantes de las funciones de onda de los estados ligados.

	A_1	A_2	B_2	A_3
ε_1	1	-1.0663	8.6673	2.1274
ε_2	1	0.1452 - 0.2070i	0.1452+0.2070i	-4.6093
ε_3	1	0.0620+0.0542i	0.0620-0.0542i	-20.575
ε_4	1	-0.0561+0.0610i	-0.0561-0.0610i	3.0672

Table 7: Valor de las constantes de las funciones de onda de los estados ligados.

References

- [1] Ates, I. B., Kuru, S., and Negro, J. (2022). Graphene Dirac fermions in symmetric electric and magnetic fields: the case of an electric square well. *Physica Scripta*, 98(1), 015816. <https://doi.org/10.1088/1402-4896/aca631>
- [2] Kuru, S., Negro, J., and Nieto, L. M. (2009). Exact analytic solutions for a Dirac electron moving in graphene under magnetic fields. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(45), 455305. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/45/455305>
- [3] Lukose, V., R. Shankar, and G. Baskaran, 2007, *Phys. Rev. Lett.* 98, 116802.
- [4] Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., and Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81(1), 109–162. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- [5] Xiong, S.-J., and Xiong, Y. (2007). Anderson localization of electron states in graphene in different types of disorder. *Phys. Rev. B*, 76(21), 214204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.214204>
- [6] Zhang, Y., Tan, Y.-W., Stormer, H. L., and Kim, P. (2005). Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene. *Nature*, 438(7065), 201–204. <https://doi.org/10.1038/nature04235>
- [7] Groessing, G. (2002). Derivation of the Schroedinger Equation and the Klein-Gordon Equation from First Principles. arXiv preprint quant-ph/0205047. <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0205047>
- [8] Wharton, K. B. (2009). A Novel Interpretation of the Klein-Gordon Equation. *Foundations of Physics*, 40(3), 313–332. <https://doi.org/10.1007/s10701-009-9398-2>
- [9] Beenakker, C. W. J. (2008). Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 80(4), 1337–1354. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.1337>
- [10] Contreras-Astorga, A., Correa, F., and Jakubsky, V. (2020). Super-Klein tunneling of Dirac fermions through electrostatic gratings in graphene. *Phys. Rev. B*, 102(11), 115429. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.115429>
- [11] Castillo-Celeita, M., Díaz-Bautista, E., and Oliva-Leyva, M. (2020). Coherent states for graphene under the interaction of crossed electric and magnetic fields. *Annals of Physics*, 421, 168287. <https://doi.org/10.1016/j.aop.2020.168287>

- [12] Bardarson, J. H., Titov, M., and Brouwer, P. W. (2009). Electrostatic Confinement of Electrons in an Integrable Graphene Quantum Dot. *Phys. Rev. Lett.*, 102(22), 226803. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.226803>
- [13] Mecklenburg, M., and Regan, B. C. (2011). Spin and the Honeycomb Lattice: Lessons from Graphene. *Physical Review Letters*, 106(11), 116803. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.116803>
- [14] Kuru, S., Negro, J., Nieto, L. M., and Sourrouille, L. (2022). Massive and massless two-dimensional Dirac particles in electric quantum dots. *Physica E*, 142, 115312. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2022.115312>