



El efecto Aharonov-Bohm en materiales semiconductores de carácter topológico analizado desde la ecuación de Dirac- Weyl

Juan Sebastian Cruz Hoyos

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Física
Manizales, Colombia
2020

El efecto Aharonov-Bohm en materiales semiconductores de carácter topológico analizado desde la ecuación de Dirac-Weyl

Juan Sebastian Cruz Hoyos

Tesis de maestría presentada como requisito parcial para optar al título de:

Magister en Ciencias-Física

Directora:

Ph.D. Lucero Álvarez Miño

Línea de Investigación:

Mecánica cuántica y materia condensada

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de física

Manizales, Colombia

2020

(Dedicatorias y lemas)

A mis padres: Andres Felipe Cruz y Sandra Patricia Hoyos por todo el apoyo incondicional desde mis inicios académicos, personales y laborales. Siempre serán los mejores padres y les debo todo lo que soy ahora y lo que seré en un futuro

A mis hermanos: Carlos Cruz y Valentina Cruz por siempre estar conmigo y darme ánimos; además de ser los mejores hermanos del mundo

A Gonzalo Cruz por ser siempre un ejemplo de perseverancia y esfuerzo hasta el último suspiro. Sé que estarías orgulloso de vernos ahora a los tres.

Que este sea el segundo de muchos logros académicos y personales

“Lo que sabemos es una gota de agua; lo que ignoramos es el océano “

Isaac Newton

Agradecimientos

- Agradezco a mis padres y hermanos por siempre estar conmigo, por apoyarme desde la distancia y soportarme en los momentos más complejos de mi formación académica, personal y profesional.
- A mi abuela y mi tío por darme la oportunidad de compartir con ellos, por estar presentes en todo este proceso de formación académica que he tenido en estos casi seis años.
- A mi directora de tesis la profe Lucero por todo el apoyo, paciencia y acompañamiento que ha tenido conmigo durante estos años y por brindarme una visión de la física y de la cuántica llena de pasión.
- A todos los profesores que han estado presentes en mi formación académica tanto en el colegio, como en el pregrado, la maestría y en mi primer semestre de doctorado, pues gracias a ellos he adquirido una visión más global de la física y la matemática, Además de la pasión y amor por la física y por su enseñanza.
- A la Universidad Nacional de Colombia sede Manizales por brindarme la oportunidad de ser egresado de esta grandiosa y enorme institución; siempre será la universidad de mis sueños y mi amada alma mater
- A los compañeros, amigos y personas que han compartido conmigo algún pasaje de tiempo en este proceso de formación académica; a muchos de ellos les guardo un gran cariño y aprecio sin importar las circunstancias y sucesos.
- A *P.A.C.R* por todo su apoyo incondicional en este último año y por siempre estar ahí para mí. Sé que puedes con todo y que saldrás adelante, CONFÍA Y CREE EN TI, como yo lo hago.
- A los estudiantes que he tenido durante este tiempo por siempre motivarme a aprender más, a leer, a prepararme para cada clase y a mejorar mis habilidades en la física experimental, campo que en lo personal no es el mío pero que he llegado a disfrutar gracias a ellos. Muchas gracias muchachos por formar parte de mi formación profesional y académica.
- Por último, y no menos importante a Dios por siempre brindarme su apoyo, su fortaleza, su compañía, determinación y consuelo en los momentos más difíciles de estos años.

¡Muchas gracias a todos!

El efecto Aharonov-Bohm en materiales semiconductores de carácter topológico analizado desde la ecuación de Dirac-Weyl

Resumen

El presente trabajo aborda dos tópicos centrales: el primero es el estudio de los potenciales en la física desde una perspectiva de revisión de literatura con el fin de intentar encontrar una relación entre el efecto Aharonov-Bohm, la topología del espacio y los potenciales físicos. El segundo es el análisis teórico del grafeno en una estructura semiconductor de punto cuántico, para su estudio se realiza el análisis del hamiltoniano de Dirac-Weyl en coordenadas cilíndricas; en primera instancia se considera el sistema sin presencia de potencial reproduciendo y ampliando los resultados obtenidos por los investigadores Serrano, Avalos y Cabrera en su artículo titulado “*Enhancing the energy spectrum of graphene quantum dot with external magnetic and Aharonov-Bohm flux fields*”, y posteriormente se propone el análisis de los niveles de energía del sistema al someterlo a una diferencia de potencial V_0 . La solución de los niveles de energía y la ecuación de onda se hallan empleando el método fórmula, un método de solución de ecuaciones diferenciales de segundo orden que consiste en determinar coeficientes por medio de la comparación con la ecuación patrón; la fiabilidad y precisión se corrobora al solucionar la función de onda y los niveles de energía con el método WKB y comparar los resultados. Por último, se observa que los niveles de energía en presencia de un potencial V_0 aumentan y disminuyen la separación entre cada nivel, además la presencia del flujo Aharonov-Bohm en el sistema influye en la diferencia de cada nivel de energía.

Palabras clave: Ecuación de Dirac-Weyl, Fermiones de Weyl, Método Fórmula, Spinor de Weyl, Gauges, Potenciales, Simetrías.

The Aharonov-Bohm effect in topological semiconductor materials analyzed from the Dirac-Weyl equation

Abstract

The present work addresses two central topics: the first is the study of potentials in physics from a literature review perspective in order to try to find a relationship between the Aharonov-Bohm effect, the topology of space and physical potentials. The second is the theoretical analysis of graphene in a semiconductor quantum dot structure. For its study, the Dirac-Weyl Hamiltonian analysis is carried out in cylindrical coordinates; In the first instance, the system without the presence of potential is considered, reproducing and expanding the results obtained by researchers Serrano, Avalos and Cabrera in their article entitled “Enhancing the energy spectrum of graphene quantum dot with external magnetic and Aharonov-Bohm flux fields”, and later, the analysis of the energy levels of the system is proposed by subjecting it to a potential difference V_0 . The solution of the energy levels and the wave function are found using the formula method, a method of solving second-order differential equations that consists in determining coefficients by means of comparison with the standard equation; Reliability and accuracy is confirmed by solving the wave function and energy levels with the WKB method and comparing the results. Finally, it is observed that the energy levels in the presence of a potential V_0 increase and the separation between each one decreases, in addition the presence of the Aharonov-Bohm flow in the system influences the difference of each energy level.

Keywords: Dirac-Weyl equation, Weyl's fermions, Formula Method, Weyl's spinor, Gauges, Potentials, Symmetries.

Contenido

	Pág.
Resumen	IX
Abstract	X
Lista de figuras, ilustraciones y gráficas	XIII
Lista de Símbolos	XIV
1. Preliminares	17
1.1 Introducción	17
1.2 Justificación e importancia de la investigación.....	18
1.3 Objetivos	18
1.3.1 Objetivo general	18
1.3.2 Objetivos específicos	18
2. Fundamentos teóricos	19
2.1 Momentum angular	19
2.1.1 Valores propios de Lz	19
2.2 Grupos $SU2$ y $SO2$	20
2.3 Ecuación de Dirac-Weyl	21
2.3.1 La ecuación de Dirac-Weyl para un punto cuántico de grafeno	23
2.3.2 Ecuación de Dirac-Weyl y niveles de energía de Landau.....	25
2.4 El método WKB: solución en serie de potencias para la ecuación diferencial del tipo $\epsilon y'' + ay' + by = 0$	26
2.5 El efecto Aharonov-Bohm	27
3. Los potenciales en la física	29
3.1 Introducción a los potenciales en la electrodinámica.....	29
3.1.1 Teoría gauge.....	30
3.1.2 Gauges de Coulomb y Landau	31
3.2 Potenciales desde la geometría y la simetría.....	32
3.3 Potencial vector magnético desde el principio de causalidad	34
4. El método fórmula (FM)	35
4.1 Introducción	35
4.2 Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo	35
4.2.1 Definición del método fórmula	36
4.3 Algunos problemas de la mecánica cuántica solucionados aplicando el método fórmula...	37
4.3.1 Partícula en un pozo de potencial infinito unidimensional	37

4.3.2	Oscilador armónico unidimensional	38
4.3.3	Oscilador armónico esférico	40
4.3.4	Potencial de Hylleraas.....	43
4.4	Análisis de resultados.....	45
5.	Análisis teórico de punto cuántico de grafeno en una región sin potencial eléctrico.....	47
5.1	Definición de las variables del problema de estudio.....	47
5.2	Desarrollo del hamiltoniano de Dirac-Weyl	48
5.2.1	Desarrollo del sistema de ecuaciones de Weyl acopladas por la componente radial Ψ	50
5.2.2	Solución de la componente radial de Ψ por el método fórmula: funciones χ_A y χ_B y niveles de energía.....	52
5.2.3	Función de onda solución	54
5.3	Punto cuántico sin presencia del flujo Aharonov-Bohm.....	54
5.4	Solución de la parte radial de Ψ por el método WKB: funciones χ_A y χ_B y los valores de energía.....	55
5.4.1	Función de onda y niveles de energía para la componente radial χ_A	56
5.4.2	Función de onda y niveles de energía para la componente radial χ_B	57
5.5	Gráficas de los valores de energía en función del número cuántico magnético m	58
5.5.1	Niveles de energía en función del campo magnético $E_m = f(B)$	58
5.5.2	Niveles de energía en función de la relación de flujo $E_m = f(\zeta)$	59
5.5.3	Niveles de energía sin presencia de flujo tipo Aharonov-Bohm.....	59
5.6	Análisis de los resultados	60
6.	Análisis teórico de un punto cuántico de grafeno sometido a una diferencia de potencial V_0	63
6.1	Definición de las variables	63
6.2	Desarrollo del hamiltoniano de Dirac-Weyl para un punto cuántico sometido a una diferencia de potencial V_0	64
6.2.1	Forma de las componentes radiales desacopladas	65
6.2.2	Solución de la componente radial de Ψ empleando el método fórmula: función de onda y niveles de energía.....	67
6.3	Función de onda solución para un punto cuántico sometido a una diferencia de potencial V_0	69
6.4	Gráficas y análisis de los niveles de energía en función del número cuántico magnético m	69
6.4.1	Niveles de energía en función del campo magnético: $E_m = f(B)$	69
6.4.2	Niveles de energía en función de la relación de flujo: $E_m = f(\zeta)$	71
6.4.3	Niveles de energía cuando la diferencia de potencial al que se somete el punto cuántico aumenta en el orden de voltios	72
6.5	Análisis de resultados.....	73
7.	Conclusiones	77
7.1	Trabajos a futuro	81
Anexo A: Función hipergeométrica, polinomios de Laguerre y ecuación de Laguerre.		83
Referencias.....		85

Lista de figuras, ilustraciones y gráficas

	Pág.
Ilustración 1. Estructura de bandas del grafeno en cercanía a los puntos k y k' ..	24
Figura 1 Montaje experimental realizado por Yakir Aharonov y David Bohm.....	27
Figura 2 Modelo del punto cuántico de grafeno. A) se presenta el modelo del punto cuántico de grafeno de radio R sin presencia de una diferencia de potencial externo constante, en la esquina inferior se observa la estructura de bandas del grafeno sin gap. B) se presenta el modelo del punto cuántico de grafeno al someterlo a una diferencia de potencial constante V_0 que origina un campo eléctrico radial, en la esquina inferior se observa la estructura de bandas del grafeno con el gap inducido por la diferencia de potencial..	63
Gráfica 1 Relación de la energía en función del campo magnético B Para valores del numero cuántico m entre 0 y 2 y una relación de flujo ζ de $\zeta = 0.5$ y $\zeta = 2$	58
Gráfica 2 Relación de la energía en función de ζ para valores del número cuántico m entre 0 y 2 y un campo magnético de $B = 0.5T$ y $B = 2T$	59
Gráfica 3 Niveles de energía en función del campo magnético para cuando el sistema no exhibe un flujo del tipo Aharonov-Bohm.	60
Gráfica 4 Relación de la energía en función del campo magnético para valores del número cuántico magnético m entre 0 y 2 , una relación de flujo Aharonov-Bohm y fluxón de $\zeta = 0.5$ a una diferencia de potencial de $V_0 = 0.2 mV$ y $V_0 = 45 mV$	70
Gráfica 5 Relación de la energía en función de ζ para valores del número cuántico magnético m entre 0 y 2, un campo magnético $B = 0.5 T$ a una diferencia de potencial de $V_0 = 0.2 mV$ y $V_0 = 45 mV$	71
Gráfica 6 Comportamiento de las graficas $E = f(B)$ y $E = f(\zeta)$ para un voltaje constante de $V_0 = 2 V$	72

Lista de Símbolos

Símbolo	Término	Unidad SI	Valor
h	Constante de Planck	$J s$	$6,626 * 10^{-34}$
		eVs	$4,136 * 10^{-15}$
\hbar	Constante de Planck dividida en 2π	$J s$	$1,054 * 10^{-34}$
		eVs	$6,582 * 10^{-16}$
e	Carga eléctrica del electrón	C	$1,602 * 10^{-19}$
ϵ_0	Permitividad eléctrica en el vacío	$\frac{C^2}{Nm^2}$	$8,85 * 10^{-12}$
μ_0	Permeabilidad magnética en el vacío	$\frac{NC^2}{s^2}$	$4\pi * 10^{-7}$
∇	Operador Nabla		
∇^2	Operador Laplaciano		
\hat{p}	Operador vector momentum lineal		
\hat{A}	Operador vector potencial magnético		
\hat{L}	Operador vector momentum angular		
\hat{V}	Operador potencial		
\hat{H}	Operador hamiltoniano		
$\hat{\sigma}$	Operador vector de las matrices de Pauli		
\hat{R}	Operador matriz de rotación		
m^*	Masa efectiva		

Símbolo	Término	Unidad SI	Valor
v_f	Velocidad de fermi	$\frac{m}{s}$	$\sim 1 * 10^6$
$\epsilon_{i,j,k}$	Tensor de Levi-Civita		
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker		
I_n	Matriz identidad de $n \times n$		
ω	Frecuencia angular	$\frac{Rad}{s}$	
c	Velocidad de la luz en el vacío	$\frac{m}{s}$	$3 * 10^8$
n	Numero cuántico principal		
l	Numero cuántico angular		
m	Numero cuántico magnético		
\mathbf{B}	Campo magnético	T	
l_B	Longitud magnética	m	
ϕ_{AB}	Flujo magnético tipo Aharonov-Bohm		
ϕ_0	Fluxón		
ζ	Relación entre el flujo tipo Aharonov-Bohm y fluxón		
τ	Característica intrínseca del material. Distingue entre los puntos k y k' de la primera zona de Brillouin		$-1 \text{ ó } 1$
φ	Ángulo azimutal		
${}_1F(a, c; z)$	Función hipergeométrica confluyente		

1. Preliminares

1.1 Introducción

En el presente trabajo se abordan dos ejes centrales para el desarrollo de la investigación y de cada uno de los resultados que se plasman en la tesis; el primero es el desarrollo de una revisión de literatura sobre los potenciales en la física, enfocado en su origen desde la electrodinámica clásica, la teoría gauges, y el cómo desde la mecánica cuántica la elección de un vector potencial magnético o un potencial eléctrico modifica las propiedades específicas del modelo que se estudia. Además se enlazan las ideas descritas por Yakir Aharonov y David Bohm sobre el efecto Aharonov-Bohm con los conceptos de topología, causalidad y el cómo la fase ϕ_{AB} es recurrente en materiales de baja dimensión y que presentan características topológicas como el grafeno.

El segundo eje central de la tesis es la profundización, conceptualización y desarrollo de la ecuación de Dirac-Weyl en materiales semiconductores; para tal fin, se inicia la tesis brindando al lector unos fundamentos teóricos básicos que dan sustento a lo que se desarrolla durante todo el documento. Posteriormente se limita el estudio a un solo material topológico que cumpla con algunas características específicas: 1) que se pueda modelar por medio de la ecuación de Dirac-Weyl, 2) que sea un material de interés científico actual y 3) que sea un material de baja dimensionalidad. Un material que cumple con las condiciones descritas es el grafeno en una nanoestructuras de punto cuántico.

Con la selección del material que se desea estudiar y el tipo de estructura semiconductor se plantea dos preguntas para seguir la investigación: 1) ¿Qué método matemático emplear para la solución del sistema? ¿Qué aporte se puede realizar al estudio del material?

El método que se plantea para el desarrollo teórico de la ecuación de Dirac-Weyl es el Método Formula, un método de solución de ecuaciones tipo Schrödinger basado en una transformación de las variables espaciales $\Psi(r) \rightarrow \Psi(s)$, tal que, sea posible comparar con la ecuación patrón propia del método y de esta forma se determinan constantes que involucran las variables de interés; para el análisis de los resultados se enfoca la tesis en hallar los niveles de energía y la función de onda del sistema. Luego del método sigue el aporte que brinda el documento, para tal fin se sigue el estudio realizado por [1] como punto de partida, con el fin de reproducir, ampliar y profundizar lo realizado en el artículo; se propone el estudio del hamiltoniano al someter el sistema a una diferencia de potencial constante V_0 . En ambos casos se determina la función de onda y los niveles de energía, y se hacen análisis de las variables que alteran de forma global la energía.

Por último, se expone las conclusiones de la tesis, se resaltan los aportes en cálculos teóricos y en revisión de literatura realizado y se enuncian algunos trabajos y consideraciones que se pueden tomar para futuros estudios.

1.2 Justificación e importancia de la investigación

La justificación de la investigación se centra en tres pilares fundamentales

- **Interés y motivación:** el interés y la motivación surge en ampliar los conocimientos de fenómenos cuánticos que se manifiestan en la materia condensada, para ello se busca hallar los niveles de energía y la función de onda de los sistemas que se plantean y se brinda una revisión para investigadores que comienzan en este campo de la física.
- **Novedad:** la novedad se centra en: 1) el estudio del hamiltoniano de Dirac-Weyl en presencia de una diferencia de potencial eléctrico V_0 constante, 2) la revisión de literatura en torno a los potenciales en la física y el efecto Aharonov-Bohm, 3) la comparación de los niveles de energía de los modelos con los niveles reportados de Landau y 4) el desarrollo de sistemas físicos por medio del Método Fórmula
- **Utilidad:** la investigación de tópicos que incluyen materiales topológicos es de interés científico actual, al igual que su comprensión, modelamiento y propiedades que se derivan de sus características propias. En este sentido, la tesis tiene como utilidad brindar un primer paso a estos estudios en la sede, siendo una guía para los que apenas inician en tópicos similares y que desean adentrarse en su estudio. Además lo descrito de forma teórica se puede implementar en la práctica en avances tecnológicos que se fundamenten en propiedades ópticas y eléctricas.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo general

Analizar teóricamente el comportamiento de los materiales semiconductores, específicamente los puntos cuánticos, por medio del desarrollo teórico de un hamiltoniano y su estudio al solucionarlo por el método fórmula (FM), que originan el flujo tipo Aharonov-Bohm.

1.3.2 Objetivos específicos

- Comparar los niveles de energía obtenidos al solucionar el hamiltoniano de estudio con los niveles de Landau.
- Revisar los resultados obtenidos al plantear un término de interacción
- Comparar la fase tipo Aharonov-Bohm registrada en artículos de investigación recientes con los resultados teóricos que se obtengan.
- Realizar una revisión en la literatura de los potenciales en la física y su relación con el efecto Aharonov-Bohm.

2. Fundamentos teóricos

En la presente sección se hará una contextualización de los conceptos básicos que se requieren para el desarrollo y comprensión de los tópicos que se abordaran en la tesis.

2.1 Momentum angular

La principal diferencia que surge entre el momento angular cuántico y clásico radica en su definición; en mecánica cuántica se define como un operador vector $\hat{\mathbf{L}}$ con componentes \hat{L}_x, \hat{L}_y y \hat{L}_z que no conmutan entre ellas, es decir, no comparten funciones propias ni son medibles con precisión al mismo tiempo [2] [3].

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (1)$$

$$\hat{L}_x = yp_z - zp_y; \quad \hat{L}_y = zp_x - xp_z; \quad \hat{L}_z = xp_y - yp_x \quad (2)$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad (3)$$

2.1.1 Valores propios de \hat{L}_z

Los valores propios del operador \hat{L}_z son

$$\hat{L}_z\Psi = \hbar m\Psi; \quad m: \text{número cuántico magnético} \quad (4)$$

En el presente trabajo se abordara la simetría cilíndrica para el desarrollo de los problemas, por lo que se define el operador \hat{L}_z en coordenadas cilíndricas; cabe resaltar que para hallar la transformación de coordenadas cartesianas a cilíndricas se emplean las relaciones entre coordenadas y la regla de la cadena para los diferenciales correspondientes a (r, φ, z)

$$x = r\cos\varphi; \quad y = r\sin\varphi; \quad z = z \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad \frac{\partial}{\partial y} = \sin\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \quad (6)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla \quad (7)$$

Empleando la definición de \hat{L}_z de la ecuación (2), reemplazando las ecuaciones (5) (6) y (7) y empleando la relación pitagórica $\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1$ se tiene

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (8)$$

Al hacer actuar el operador \hat{L}_z , en este caso en coordenadas cilíndricas, a la función de onda Ψ se halla la ecuación de valores propios del operador \hat{L}_z

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi = \hbar m \Psi \quad (9)$$

La ecuación diferencial anterior es una ecuación diferencial de primer orden cuyas soluciones son del tipo onda plana y corresponden a la componente azimutal de la función de onda Ψ

$$\Psi_\varphi = e^{im\varphi} \quad (10)$$

Por lo que la función de onda Ψ se escribe como el producto de la componente azimutal φ y la parte espacial r, z

$$\Psi = e^{im\varphi} \Psi_{r,z} \quad (11)$$

En el caso particular que la función de onda sea un spinor, se tiene que la componente azimutal para sus componentes será de la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi = im\Psi \rightarrow \Psi_{\varphi_1} &= e^{im\varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi = i(m+1)\Psi \rightarrow \Psi_{\varphi_2} &= e^{i(m+1)\varphi} \end{aligned} \quad (12)$$

Como se puede observar se suma un paso a la segunda componente azimutal para garantizar que las funciones de onda Ψ_φ no se encuentren en el mismo estado cuántico magnético. Esta representación es muy útil cuando se tienen fermiones que siguen el principio de exclusión de Pauli y que ya poseen una proyección del spin definida spin up o spin down [4]

2.2 Grupos SU_2 y SO_2

La teoría de grupos para SU_2 y SO_2 surge de forma natural al estudiar la teoría cuántica de spin no relativista, considerando el hamiltoniano o lagrangiano del sistema como invariante ante varias clases de transformadas de grupo. Para su estudio e ideas básicos se retomara el concepto del operador momentum angular \hat{L} en una nueva base generadora.

Es posible reescribir el operador momento angular \hat{L} de un sistema de partículas con spin 1/2 como una matriz de 2×2 que cumple con la propiedad de hermiticidad y de conmutación [4]

$$L_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad L_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad L_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Las matrices que cumplen con las relaciones de conmutación y hermiticidad son las matrices de Pauli para partículas de spin 1/2

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (14)$$

El grupo SU2 (espacio especial unitario de dimensión 2) se define por la multiplicación de operadores con matrices generales unitarias de dimensión 2×2 . De esta forma es posible verificar que las matrices de Pauli son un ejemplo del espacio SU2 [4] [5], dado que cumple con la condición de normalidad

$$\sigma_i^2 = I_{2 \times 2} \quad (15)$$

El grupo SO2 (espacio especial ortogonal de dimensión 2) se define por la invarianza rotacional de sus elementos. En dos dimensiones se tiene que es una matriz dimensión 2×2 que corresponde al operador rotacional \hat{R}

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \text{sen}\varphi \\ -\text{sen}\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \quad (16)$$

Es posible generar la matriz de rotación asociada al grupo SO2 empleando las matrices de Pauli y la relación de Euler

$$\begin{aligned} e^{i\sigma_y\varphi} &= I \cos\varphi + i\sigma_y \text{sen}\varphi = \\ &= \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 \\ 0 & \cos\varphi \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{sen}\varphi = \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 \\ 0 & \cos\varphi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \text{sen}\varphi \\ -\text{sen}\varphi & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\varphi & \text{sen}\varphi \\ -\text{sen}\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (17)$$

De esta forma se observa que la matriz σ_y es la matriz generador de la rotación en el espacio SO2, es decir, la matriz cumple con la invarianza rotacional.

Las propiedades de los grupos SU(n), SO(n), y en general toda la teoría de grupos, son una forma matemática de describir la simetría de los sistemas físicos; en el caso específicos de un sistema de partículas de spin 1/2 se tiene que estas han de ser invariantes ante rotaciones (transformada tipo SO2) y sus elementos deben de ser unitarios (SU2) [6]. Los espacios que cumplen la teoría de grupos de dimensión dos poseen su set completo de elementos generados por las matrices de Pauli para fermiones de spin 1/2.

2.3 Ecuación de Dirac-Weyl

Se puede deducir la ecuación de Weyl partiendo de la ecuación de Klein-Gordon [7] [8]

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \hbar^2 \nabla^2 + m^2 c^2 \right) \Psi &= 0 \\ \left(-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hbar^2 \nabla^2 \right) \Psi &= m^2 c^2 \Psi \end{aligned} \quad (18)$$

El objetivo transformar la ecuación (18) a una ecuación diferencial de primer orden, para ello se “factoriza” el operador diferencial del lado izquierdo de la siguiente forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hbar^2 \nabla^2 \right) = \left(i \frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \hbar \nabla \right) \left(i \frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\beta} \cdot \hbar \nabla \right) \quad (19)$$

Donde $\boldsymbol{\alpha}$ y $\boldsymbol{\beta}$ se consideran inicialmente como dos tri-vectores constantes e independientes de las coordenadas, el campo y las derivadas. Desarrollando el término de la derecha y reorganizando los términos

$$-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hbar^2 \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + i \frac{\hbar^2}{c} (\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}) \cdot \nabla \frac{\partial}{\partial t} + \hbar^2 (\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla) \quad (20)$$

Para que ambos lados coincidan se debe de cumplir que $\boldsymbol{\beta} = -\boldsymbol{\alpha}$ y $(\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla) = \nabla^2$, lo que implica que

$$\begin{aligned} \alpha_i^2 &= -I_2 \\ \boldsymbol{\alpha} &\equiv i\boldsymbol{\sigma} \end{aligned} \quad (21)$$

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2I_2 \delta_{ij}$$

No existe un conjunto de tres números reales o complejos que pueda cumplir la relación de anti conmutación pero un conjunto especial de matrices si puede. Las matrices canónicas que satisfacen la ecuación (21) son las matrices de Pauli. Ahora se puede reescribir la ecuación (18) de la siguiente forma

$$\left(i \frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hbar \nabla \right) \left(i \frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hbar \nabla \right) \Psi = m^2 c^2 \Psi \quad (22)$$

Al aplicar el operador $i \frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \pm i\vec{\sigma} \cdot \hbar \nabla$ sobre Ψ se obtiene un sistemas de ecuación [7]; dado que Ψ es un spinor de dos entradas (χ_A, χ_B) , denominado un spinor de Weyl, se puede expresar el sistema de ecuaciones de Weyl como sigue

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \chi_A &= i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hbar \nabla \chi_A + mc \chi_B \\ \left(i \frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \chi_B &= -i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hbar \nabla \chi_B + mc \chi_A; \end{aligned} \quad (23)$$

Las ecuaciones anteriores son las ecuaciones de Weyl acopladas por el término de la masa.

Un caso particular se presenta cuando la partícula que se describe posee una masa igual a cero, lo que corresponde a fermiones no masivos o fermiones de Weyl [9] [10] [1]. Cuando la masa de las partículas es cero la ecuación de Weyl (23) se desacopla, por lo que se tiene

$$\begin{aligned} \left(i\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right)\chi_A &= -\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi_A \\ \left(i\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right)\chi_B &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi_B \end{aligned} \quad (24)$$

Empleando el spinor de Weyl de dos entradas y la definición de la energía en cuántica $E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ se puede reescribir el sistema de dos ecuaciones en una forma más compacta

$$E\Psi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\Psi \quad (25)$$

En el caso que el modelo sea un medio material se requiere realizar el cambio en el valor de la velocidad, debido a que las cuasipartículas del sistema no pueden alcanzar velocidades cercanas o iguales a la de la luz c , por lo tanto se emplea la velocidad de los portadores de carga v . El sistema de ecuaciones se puede reescribir como [11]

$$E\Psi = v\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\Psi \quad (26)$$

Además para materiales de estudio que son sometidos a un campo magnético, se reemplaza desde el inicio el operador nabla ∇ ($\nabla \rightarrow \partial_\mu$) por el operador D_μ . Lo que genera un hamiltoniano con momentum canónico π , el sistema de ecuación es de la forma

$$\begin{aligned} E\Psi &= v\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}})\Psi \\ \hat{H} &= v\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}) \end{aligned} \quad (27)$$

El hamiltoniano de Dirac-Weyl ecuación (27) describe el comportamiento del grafeno en puntos específicos donde la topología del material permite que se presente una masa efectiva igual a cero, estos puntos reciben el nombre de puntos de silla o puntos de Dirac. Por lo que la principal utilidad de la ecuación de Dirac-Weyl es describir materiales semiconductores topológicos que presentan como cualidad puntos donde la masa efectiva se hace cero. [9] [10] [1]

2.3.1 La ecuación de Dirac-Weyl para un punto cuántico de grafeno

El grafeno es una forma alotrópica del carbono dos dimensional ($2D$) con estructura hexagonal o en forma de colmena, presenta una diversidad de propiedades ópticas, magnéticas y eléctricas [12] que lo convierten en un materialmente altamente estudiado en la última década, incluso por algunos autores se le ha dado el calificado del sucesor del silicio en la nueva era [13] en virtud de sus aplicaciones en transistores, transporte eléctrico y dispositivos electrónicos.

El espectro energético del grafeno presenta como particulita un comportamiento lineal en cercanía a los puntos no equivalentes k y k' en la zona de Brillouin [14], mientras que en su estructura de

bandas corresponden a superficies cónicas con puntos de inflexión que reflejan cambios abruptos en la concavidad.

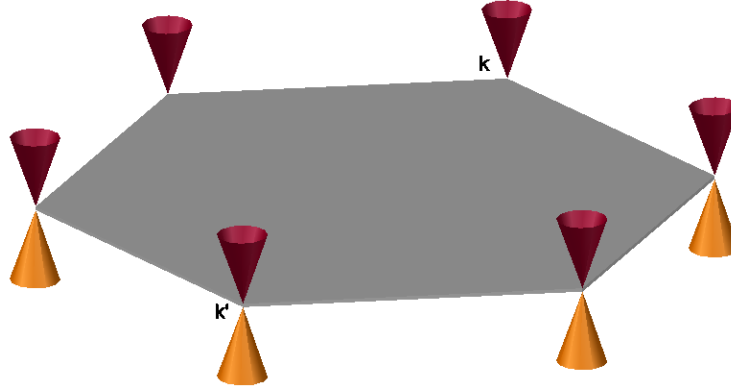


Ilustración 1. Estructura de bandas del grafeno en cercanía a los puntos k y k' .

Una de las propiedades que se ve modificada en los puntos k y k' es la masa efectiva de los electrones, dado por

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \quad (28)$$

En las regiones k y k' la masa efectiva de los electrones se hace cero, debido a los cambios abruptos en la concavidad de las superficies cónicas que se observan la Ilustración 1, lo que da origen a cuasipartículas no masivas denominadas fermiones de Weyl y los puntos donde ocurre que la masa efectiva se hace cero se denominan puntos de Dirac [12] [15].

La ecuación de Dirac-Weyl en coordenadas cilíndricas es usada para modelar y estudiar de forma teórica el grafeno dos dimensional en los puntos de Dirac y en una estructura de punto cuántico [1] [11] [16]

$$\hat{H} = v_f(\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{r,\varphi} + \tau\hat{V}(r)\sigma_z \quad (29)$$

A diferencia de la ecuación (27) se tiene que la ecuación de Dirac-Weyl para el grafeno en una estructura de punto cuántico presenta un acople entre la matriz σ_z y el potencial externo $V(r)$ lo que cambia significativamente las propiedades energéticas del grafeno. La presencia del acople $\sigma_z V(r)$ induce un gap al sistema que además puede ser controlado vía potencial externo suministrado al punto cuántico. El origen del segundo término es debido a las condiciones propias del sistema y del objetivo de confinar los portadores de carga en la superficie del grafeno evitando fenómenos de tunelamiento por parte de las cuasipartículas de Weyl, para tal fin se plantea un potencial infinito por fuera del punto cuántico, lo que favorece los estados electrónicos superficiales [17]. El término τ del acople $\sigma_z V(r)$ es una característica intrínseca del material, que permite diferenciar entre los valles k y k' de la zona de Brillouin, es decir, diferencia entre los puntos de Dirac del grafeno. La posición en el espacio de momentum de los puntos k y k' es

$$k = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right); \quad k' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right); \quad a = 1,42\text{\AA} \quad (30)$$

a: distancia carbono – carbono

El valor que toma τ es -1 para el punto k' y de 1 para el punto k , por lo que $\tau = -1$ ó 1 según el punto de Dirac que se estudia en el modelo.

El término v_f corresponde a la velocidad de los portadores de carga que participan en la conducción del grafeno, valor que es independiente del momentum del sistema y que está relacionado con la energía de fermi. Su valor es 300 veces menor que la velocidad de la luz, por lo que $v_f = 10^6$ m/s aproximadamente y se denomina la velocidad de fermi para el grafeno [18].

Por último, cabe destacar que el grafeno en los puntos de Dirac se comporta como un semiconductor topológico, por lo que las propiedades de conducción se realizan solo en la superficie del material, mientras que en su interior se comporta como un aislante topológico, características que potencian sus aplicaciones en el campo de la materia condensada enfocada a propiedades eléctricas y ópticas [19].

2.3.2 Ecuación de Dirac-Weyl y niveles de energía de Landau

Los sistemas cuánticos que presentan un momento canónico π y cuyo vector potencial magnético cumple con el gauge de Coulomb y de Landau se caracterizan por una densidad de estados n_B proporcionales a la intensidad del campo magnético externo [20]. En el caso que se considera un sistema con masa efectiva igual a cero, se tiene que el hamiltoniano que describe el comportamiento de las partículas en un campo magnético es de la forma

$$\hat{H} = c(\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}) \cdot \hat{\sigma} \quad (31)$$

El hamiltoniano corresponde a una de las posibles formas de expresar la ecuación de Dirac-Weyl, considerando que el vector potencial $\hat{\mathbf{A}}$ cumple con el gauge de Landau. El desarrollo de los niveles de energía asociados al hamiltoniano se realiza de forma detallada en [20]; la solución a los niveles de energía es

$$E_n = \pm c\sqrt{2neB\hbar} \quad (32)$$

Definiendo la longitud magnética l_B como

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad (33)$$

Multiplicando y dividiendo (32) por \hbar dentro de la raíz y empleando la definición de la longitud magnética l_B (33) se tiene que

$$E_n = \pm \frac{\hbar c}{l_B} \sqrt{2n} \quad (34)$$

La forma de la cuantización de los niveles de energía E_n es característicos de sistemas que exhiben el gauge de Landau y fueron descubiertos por primera vez de forma experimentalmente en el efecto Hall cuántico entero [21]. Los niveles de energía E_n reciben el nombre de niveles de Landau.

2.4 El método WKB: solución en serie de potencias para la ecuación diferencial del tipo $\epsilon y'' + ay' + by = 0$

El método WKB recibe su nombre en honor a los apellidos de sus promotores George Wentzel, Hendrik Kramers y Leon Brillouin, quienes desarrollaron el método de forma independiente. La aproximación recibe otros nombres como el método cuasi-clásico o método integral de fase, debido a sus soluciones del tipo exponencial elevadas a una fase $S(x)$ integrable.

El método WKB es una técnica para hallar soluciones aproximadas a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Es potencialmente útil para determinar los estados bases de la energía y la función de onda, además por sus cualidades de solución tipo exponencial decreciente se ajusta para problemas que involucran el fenómeno de tunelamiento cuántico [2].

Consideremos unas ecuaciones del tipo

$$\epsilon y'' + a(x)y' + b(x)y = 0 \quad (35)$$

Los coeficientes $a(x)$ y $b(x)$ son variables, distintas de cero y en general dependen de la variable independiente del sistema, en este caso x .

La forma de la solución empleando el método WKB es una expansión en series de potencias [22].

$$\frac{\epsilon}{\delta^2} S_0'^2 + \frac{2\epsilon}{\delta} S_0' S_1' + \frac{\epsilon}{\delta} S_0'' + \frac{1}{\delta} S_0' a + S_1' a + b \dots = 0 \quad (36)$$

Igualando los términos del mismo orden se tiene

$$S_0'^2 + S_0' a = 0 \quad (37)$$

$$2S_0' S_1' + S_0'' + S_1' a + b = 0$$

Por último, la solución a la ecuación diferencial del tipo (35) empleando el método WKB es [22]

$$y(x) \sim y_1 + y_2$$

$$y_1 \sim C_1 e^{-\int_0^x \frac{b(x')}{a(x')} dx'}$$

$$y_2 \sim \frac{C_2}{a(x)} e^{\int_0^x \frac{b(x')}{a(x')} dx' - \frac{1}{\epsilon} \int_0^x a(x') dx'}$$
(38)

Las constantes C_1 y C_2 son constantes de normalización que se hallan por medio de las condiciones de frontera de la ecuación diferencial.

Estas soluciones son aproximadas y están en el marco del método WKB fuera de los puntos de retorno o de puntos asintóticos, es por ello que para ciertos sistemas con singularidades la aproximación no es muy adecuada y no da un comportamiento real del sistema físico.

2.5 El efecto Aharonov-Bohm

Los físicos Yakir Aharonov y David Bohm en su artículo titulado “*Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*” [23] publicado en 1959, describen por primera vez sus resultados en relación a un efecto cuántico y electrodinámico que posteriormente recibiría el nombre de efecto Aharonov-Bohm en honor a ellos. El efecto consiste en una fuente de haz de electrones localizada a una distancia l de una doble rendija; es de conocer que si la longitud de onda λ de la fuente de electrones es aproximadamente igual en magnitud a la distancia “ a ” entre las rendijas se ha de generar un patrón de interferencia, ellos esperaban que al colocar un solenoide al otro lado de la doble rendija los electrones seguirían su camino descrito por la función de onda de ψ . Pero las mediciones de los patrones experimentales mostraban un desfase en la función de onda de los electrones que viajaban por la doble rendija al estar presente el solenoide, por lo que la trayectoria final no era la esperada.

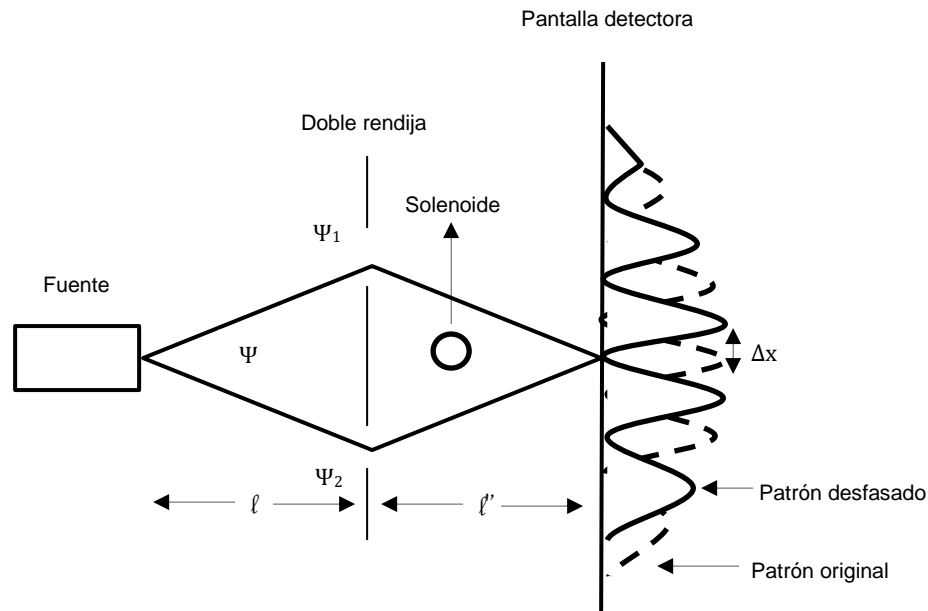


Figura 1 Montaje experimental realizado por Yakir Aharonov y David Bohm

En las regiones fuera del solenoide es preciso afirmar que el campo magnético \mathbf{B} es igual a cero, pero si esto ocurre existe un potencial vector magnético $\hat{\mathbf{A}}$ distinto de cero en dicha región, siendo $\hat{\mathbf{A}}$ responsable del desfase en el patrón de interferencia de los electrones.

Para poder darle una explicación al fenómeno desde la teoría es necesario recurrir al hamiltoniano cuántico de una partícula cargada sometida a un campo magnético [23] [24] [25] [26] [27]

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{P}} - e\hat{\mathbf{A}})^2 \quad (39)$$

Solucionando la ecuación de Schrödinger y proponiendo dicha solución como una superposición de dos funciones de onda, se tiene que

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (40)$$

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \quad (41)$$

Las soluciones Ψ_1 y Ψ_2 de las funciones de onda que describen los dos caminos posibles que toma el haz de electrones son del tipo onda plana

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \Psi_1^0 e^{\frac{ie}{\hbar} \left(\int_1^2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}_1 \right)} \\ \Psi_2 &= \Psi_2^0 e^{\frac{ie}{\hbar} \left(\int_1^2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}_2 \right)} \end{aligned} \quad (42)$$

Reemplazando la ecuación (42) en (41)

$$\Psi = \Psi_1^0 e^{\frac{ie}{\hbar} \left(\int_{\varphi}^{\varphi_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}_1 \right)} + \Psi_2^0 e^{\frac{ie}{\hbar} \left(\int_{\varphi}^{\varphi_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}_2 \right)} \quad (43)$$

Definiendo:

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{e}{\hbar} \int_{\varphi}^{\varphi_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}_1 \quad y \quad S_2 = \frac{e}{\hbar} \int_{\varphi}^{\varphi_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}_2 \\ \Delta S &= S_2 - S_1 = \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (44)$$

El ΔS representa el cambio de fase del haz de electrones; desde la mecánica cuántica es posible dar una explicación al cambio ΔS que aparece al restar las fases propias de cada una de las dos funciones de onda Ψ , la explicación se fundamenta en la interferencia cuántica. Además es posible observar que desde la mecánica clásica no existe un observable físico que interaccione en la región de estudio, es decir, que altere la trayectoria de los electrones [28]; el análisis se hace al contemplar los términos de interacción clásicos del movimiento de partículas cargadas desde el lagrangiano o hamiltoniano planteado en la región donde $\|\mathbf{B}\| = 0$.

3. Los potenciales en la física

En el presente capítulo se aborda la revisión de literatura realizada en torno a los potenciales en la física. Se inicia con el estudio desde la electrodinámica clásica y los diversos tipos de gauges a los que se pueden someter los potenciales, resaltando que clásicamente no existe una variación en las propiedades físicas de los sistemas de estudio. Esta percepción de invarianza al realizar modificaciones en los potenciales se ve alterada al considerar sistemas cuánticos donde el análisis se puede realizar desde perspectivas geométricas, topológicas y de causalidad, determinando que la variación de los potenciales genera una variación en la estructura geométrica del espacio del fenómeno. Por último, se enlazan las ideas con el efecto Aharonov-Bohm.

3.1 Introducción a los potenciales en la electrodinámica

En la teoría clásica del electromagnetismo, y en general en la física, es posible expresar todo campo conservativo en función de un potencial. Desde la mecánica se tienen que la fuerza es igual a menos un gradiente de potencial de forma análoga ocurre con los campos eléctricos, de forma que

$$\mathbf{F} = -\nabla U ; \mathbf{E} = -\nabla V \quad (45)$$

Mientras que en la electrodinámica se ha de considerar la forma clásica de las ecuaciones de Maxwell [29]

$$1) \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}; \quad 3) \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \quad 2) \nabla \cdot \mathbf{B} = 0; \quad 4) \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (46)$$

Cuando se tiene un sistema que se estudia desde la electrodinámica se hace necesario realizar correcciones al potencial eléctrico y se puede definir vector el potencial magnético relacionado con el campo magnético. Para su definición se realiza un análisis de la ley de Gauss para campo magnético, 2) de la ecuación (46), por lo que se puede expresar matemáticamente el cero como la divergencia de un rotacional de la forma

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0 \quad (47)$$

De esta forma se define que el campo magnético \mathbf{B} se puede expresar como el rotacional de un potencial vector

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (48)$$

En el caso del campo eléctrico se tiene que la tercera ecuación de Maxwell (46) impide que se pueda expresar el campo eléctrico como menos el gradiente de potencial, por lo que es necesario realizar unas correcciones a la forma de expresar el campo eléctrico en función de los potenciales. Empleando la tercera ecuación de Maxwell (46) y la definición del campo magnético (48) se tiene

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \nabla \times \mathbf{A}}{\partial t} \rightarrow \nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0 \quad (49)$$

Para que se cumpla la expresión matemática se tiene que el termino dentro del paréntesis ha de ser igual a menos el gradiente de potencial, por lo que se puede definir el campo eléctrico como

$$\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla V \rightarrow \mathbf{E} = -\left(\nabla V + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) \quad (50)$$

Cabe resaltar que la influencia de los potenciales en el estudio de los sistemas físicos no ha sido relevante desde la mecánica clásica; lo anterior tiene sustento en que las definiciones surgen desde la matemática y no desde la física, de esta forma la explicación se relacionan más con propiedades del cálculo vectorial que del sistema físico.

3.1.1 Teoría gauge

Las definiciones de los campos eléctricos y magnéticos permiten que se realice un gauge libre de los potenciales [29] [30], de forma que el campo no se vea afectado por la definición de su potencial. De esta forma es posible expresar, sin repercusiones en las cantidades de \mathbf{E} y \mathbf{B} , los potenciales como

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \boldsymbol{\alpha}; \quad V' = V + \beta \quad (51)$$

Tal que

$$\nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times (\mathbf{A} + \boldsymbol{\alpha}) = \nabla \times \mathbf{A} + \nabla \times \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{B} + \nabla \times \boldsymbol{\alpha} \quad (52)$$

Para que se cumpla que la definición de \mathbf{A} no altera al campo magnético del sistema se tiene que

$$\nabla \times \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{0} \quad (53)$$

De esta forma $\boldsymbol{\alpha}$ ha de ser el gradiente de un escalar λ

$$\boldsymbol{\alpha} = \nabla \lambda \quad (54)$$

Si se define $\boldsymbol{\alpha}$ como en la ecuación (54) se mantiene una invarianza de gauge

$$\nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times (\mathbf{A} + \nabla \lambda) = \nabla \times \mathbf{A} + \nabla \times (\nabla \lambda) = \mathbf{B} \quad (55)$$

Mientras que para el campo eléctrico se tiene que

$$\mathbf{E}' = -\left(\nabla V' + \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} \right) = -\nabla(V + \beta) + \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{A} + \nabla \lambda) = -\left(\nabla V + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) - \left(\nabla \beta + \frac{\partial \nabla \lambda}{\partial t} \right) \quad (56)$$

Para el campo eléctrico sea invariante ante la nueva definición de los potenciales se tiene que

$$\nabla\beta + \frac{\partial\nabla\lambda}{\partial t} = \mathbf{0} \rightarrow \nabla\left(\beta + \frac{\partial\lambda}{\partial t}\right) = \mathbf{0} \quad (57)$$

De lo que se obtiene

$$\beta + \frac{\partial\lambda}{\partial t} = 0 \rightarrow \beta = -\frac{\partial\lambda}{\partial t} \quad (58)$$

De esta forma el campo eléctrico ante el nuevo potencial V' es

$$\mathbf{E}' = \left(\nabla V + \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\right) - \left(-\frac{\partial\nabla\lambda}{\partial t} + \frac{\partial\nabla\lambda}{\partial t}\right) = \mathbf{E} \quad (59)$$

Como se puede observar la definición de los potenciales \mathbf{A} y V generan una invarianza en las propiedades físicas de los sistemas al conservar sus campos asociados [29]. Las transformadas

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\lambda ; V' = V + -\frac{\partial\lambda}{\partial t} \quad (60)$$

Reciben el nombre de transformadas de gauge libres debido que se puede definir λ como cualquier escalar y siempre se cumple que los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} conservaran sus propiedades físicas. En la siguiente sección se estudiaran tres gauges específicos

3.1.2 Gauges de Coulomb y Landau

a) **Gauge de Coulomb:** consiste en definir la divergencia de \mathbf{A} como cero [29]

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \rightarrow \textit{Gauge de Coulomb} \quad (61)$$

El gauge repercute en la forma de hallar V y \mathbf{A} desde las ecuaciones de Maxwell. En general se puede expresar las ecuaciones de Maxwell 1) y 4) ecuación (46) en función de los potenciales, tal que

$$\begin{aligned} \nabla^2 V + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}) &= -\frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \nabla^2 \mathbf{A} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial V}{\partial t} \right) &= -\mu_0 \mathbf{J} \end{aligned} \quad (62)$$

Para el gauge de Coulomb se simplifica hallar el potencial eléctrico

$$\nabla^2 V = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (63)$$

Que corresponde a una ecuación diferencial tipo Poisson que dependen de las condiciones de frontera de estudio del sistema, con las condiciones se puede determinar de forma completa el potencial eléctrico.

Mientras que el potencial vector magnético

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \varepsilon_0 \nabla \frac{\partial V}{\partial t} \quad (64)$$

La ecuación diferencial para el potencial vector magnético es más compleja de solucionar que la del potencial eléctrico.

b) Gauge de Landau

El gauge de Landau es un gauge del tipo axial que organiza el vector potencial magnético en una sola dirección del eje x o el eje y lo que produce un campo magnético en dirección z

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{A} &= B \hat{k} \rightarrow \text{Gauge de Landau} \\ \mathbf{A} &= yB \hat{i} \quad \text{ó} \quad \mathbf{A} = xB \hat{j} \end{aligned} \quad (65)$$

De esta forma el campo magnético \mathbf{B} es invariante ante transformadas de traslación (en el plano $x - y$) y de rotación; mientras que el vector potencial magnético rompe la simetría rotacional y la simetría de traslación se conserva solo en el eje que se orienta el potencial. En el caso que se seleccione un gauge combinado tal que

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(xB \hat{j} - yB \hat{i}) = -\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (66)$$

Esta elección del vector potencial magnético rompe la simetría de traslación en el plano $x - y$ pero conserva la simetría rotacional en el origen. Este tipo de gauge es útil en mecánica cuántica para demostrar que el momento angular es el número cuántico idóneo para describir el sistema cuántico [31].

Estos dos casos son dos opciones de seleccionar el gauge de Landau según el tipo de sistema físico que se requiere modelar y el tipo de simetría que se requiere en el análisis del problema.

3.2 Potenciales desde la geometría y la simetría

En el desarrollo de las secciones anteriores se ha dado a conocer los potenciales en la física como una variable que no altera el estudio de las propiedades físicas del sistema, al mantener las propiedades de los campos asociados invariantes ante su modificación y selección por medio de gauge. Solo en el gauge de Landau es donde se contempla la importancia de la selección del tipo de potencial al analizar que este si repercute en las propiedades topológicas del sistema, es decir, se rompen o conservan simetrías de traslación o rotación según cómo se elija el potencial y su orientación en el plano $x - y$. En la presente sección se discutirá sobre la relevancia de las propiedades geométricas y del espacio en lo que concierne al estudio de los potenciales; para ello se introducirán nuevos conceptos de espacios, geometrías y mecánicas. Los primeros conceptos que se introducirán serán los de geometría de Weyl y la mecánica Bohmiana

La geometría de Weyl propone una modificación al espacio de Riemann asociado al estudio de la geometría euclidiana del sistema, de esta forma puede ser comprendida la geometría de Riemann como un caso especial de la geometría de Weyl [32]. Una de las características particulares de la geometría de Weyl es que la longitud de un objeto extendido cambia punto a punto, la cantidad del cambio de la longitud esta medida de la forma

$$\delta l = l f_a dx^a \quad (67)$$

La mecánica Bohmiana es una teoría del movimiento de las partículas que se desarrolla en un concepto completamente determinístico pero difiere con respecto al análisis newtoniano clásico. En esta teoría se asume la función de onda como una guía del movimiento. Para el formalismo de toda la mecánica cuántica esta teoría puede ser considerada menos rigurosa en su desarrollo de los espacios, pero ha abordado la cuántica desde otra perspectiva geométrica y causal provocando una aproximación adecuada de los fenómenos cuánticos y del empirismo mismo [33]

Los trabajos realizados por David Bohm y Alhaca Hiley en 1984 fueron cruciales para establecer la teoría cuántica basada en la geometría y el principio causal. Las ideas permiten hablar de una información cuántica global no local del entorno en el que se desarrolla el experimento. Lo que significa que la información de los potenciales cuánticos puede estar definidos como una información geométrica del entramado del espacio tiempo [34].

Siguiendo estos lineamientos de las investigaciones se puede asumir los potenciales cuánticos como un canal de información que contiene la variación de las propiedades geométricas del espacio cuántico de estudio. La geometría de Weyl trae características interesantes para el análisis de los sistemas físicos según la teoría de Bohm, lo que permite que esta teoría cuántica no solo desarrolle sus bases en un espacio euclidiana sino que analice los procesos cuánticos desde una manifestación de estructuras no euclidianas y del principio geométrico variacional [34].

El desarrollo de las teorías matemáticas que demuestran la importancia de la geometría en los potenciales es específico y riguroso, por lo que en la presente sección solo se realizara una somera aproximación a las ideas planteadas por la teoría de potenciales cuántico de Bohm-Broglie según lo que se describe en el libro "*Quantum Potential: Physics, Geometry and Algebra.*" Su desarrollo servirá de sustento para comprobar la importancia de los potenciales en los sistemas físicos, especialmente en la cuántica según el espacio topológico que se tiene. Expresando el hamiltoniano en un punto particular de materia en función de la acción se tiene

$$H = \frac{1}{2m} \nabla S \cdot \nabla S + V \quad (68)$$

La variación del hamiltoniano con respecto a valores escalares λ y Ω relacionados con las características geométricas del espacio de dimensión tres en la curvatura de Ricci

$$\lambda^2 R = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \nabla S \cdot \nabla S + V \quad (69)$$

El término R es el tensor de curvatura del espacio de Ricci. Considerando las relaciones

$$\lambda^2 = \frac{\hbar^2}{16m} \quad y \quad R = \frac{8\nabla^2\Omega}{\Omega} \quad (70)$$

Lo que convierte la variación del hamiltoniano ecuación (68) a la forma

$$\frac{\hbar^2}{16m} \frac{8\nabla^2\Omega}{\Omega} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \nabla S \cdot \nabla S + V \rightarrow \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \nabla S \cdot \nabla S + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2\Omega}{\Omega} = 0 \quad (71)$$

La ecuación (71) conserva similitudes con la ecuación de Hamilton-Jacobi por lo que se puede realizar una analogía con la amplitud de onda y el escalar Ω , tal que, el potencial cuántico está relacionado con la curvatura de la caracterización de la estructura geométrica.

El contexto de estructuras geométricas establecido en la teoría de David Bohm se relaciona con la geometría del espacio tiempo y la materia que emerge del marco de referencia unificando las facetas de la relatividad y la cuántica en un estudio no local.

De esta forma se busca fomentar los estudios y las relaciones de la influencia de los potenciales en los sistemas físicos, dejando a un lado los sistemas clásicos en donde los potenciales no tienen una relevancia notoria en las propiedades físicas de los sistemas; en la cuántica estos si son relevantes y determinan las propiedades topológicas del fenómeno en las regiones de estudio según el tipo de potencial.

3.3 Potencial vector magnético desde el principio de causalidad

El efecto Aharonov-Bohm es un efecto cuántico experimental y teórico de dispersión electrones que comprueban que los potenciales, específicamente el vector potencial magnético \mathbf{A} , modifica las propiedades de los sistemas físicos. Se tiene que los electrones y partículas que se encuentran cercanas a una región donde no existe un campo magnético pero si un potencial magnético experimentan una fase de dispersión en su función de onda. En los inicios de la teoría no se esperaba que un fenómeno de tal magnitud se evidenciara en sistemas sencillos debido a que los sistemas clásicos no experimentan ninguna variación en sus observables al someterlos a potenciales, siempre y cuando el campo asociado a este potencial se mantuviera constante. En la cuántica esto no ocurren y las propiedades de la función de onda y los niveles de energía se ven influenciadas por la interacción geométrica y de materia con las partículas. [27] [35].

Los estudios y análisis realizados desde la geometría y topología de los espacios en la sección anterior y los potenciales cuánticos guardan estrecha relación con el efecto Aharonov-Bohm al considerar el sistema de partículas que se estudió como una generalización de la teoría de Bohm en el álgebra de Weyl y su propia cuántica. Fue el estudio y desarrollo de este fenómeno cuántico lo que fomento la teoría geométrica basada en propiedades de los espacios no euclidianos por parte de David Bohm.

4. El método fórmula (FM)

En la presente sección se realiza una conceptualización y definición del método formula; método desarrollado en el 2015 y que permite la solución de sistemas cuántico complejos por el tipo de potencial al que se somete la partícula. La fiabilidad y precisión del método se comprueba por medio del desarrollo y posterior análisis de cuatro problemas de la mecánica cuántica cada uno con una mayor complejidad. Los resultados y conclusiones más relevantes de los ejercicios y del capítulo se presentan al final.

4.1 Introducción

El método FM que proviene de sus siglas en ingles “Formula Method” (Método fórmula) es un método matemático desarrollado en el 2015 por los físicos Babatunde James Falaye, Sameer M. Ikhdaire y Majid Hamzavi [36]. El método consiste en una transformación de la ecuación de Schrödinger a una forma específica y conocida, que permite hallar de forma “sencilla y simple” los niveles de energía y la función de onda del sistema cuántico, expresando su solución en términos de la función hipergeométrica.

El método presenta facilidades a la hora de hallar los niveles de energía y la función de onda de sistemas altamente complejos, por lo que la transformada que se realiza a la ecuación de Schrödinger transforma el sistema a un problema algebraico y de fácil solución.

La fiabilidad y la precisión del método para hallar los niveles de energía y la función de onda de los estados base, se ira corroborando a lo largo del capítulo

4.2 Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Considerando el operador hamiltoniano \hat{H}

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(r) \quad (72)$$

Con \hat{p} el operador momentum lineal (7) y $\hat{V}(r)$ el operador energía potencial Al aplicar el operador hamiltoniano a la función de onda Ψ se obtienen los valores propios de la energía

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (40)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(r)\right)\Psi = E\Psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + (\hat{V}(r) - E)\Psi = 0 \quad (73)$$

La ecuación (73) corresponde a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que permite determinar los espectros energéticos y la función de onda del sistema según sea el potencial de interacción $\hat{V}(r)$.

4.2.1 Definición del método fórmula

Toda ecuación de Schrödinger que posea una forma similar a la descrita en la ecuación (73) y se pueda expresar por medio de una transformada adecuada de la función de onda Ψ como

$$\Psi''(s) + \frac{(k_1 - k_2s)}{s(1 - k_3s)}\Psi'(s) + \frac{(As^2 + Bs + C)}{s^2(1 - k_3s)^2}\Psi(s) = 0 \quad (74)$$

Con k_1, k_2, k_3, A, B y C constantes, que según sea el sistema de interés pueden contener información de la energía, frecuencia de oscilación, fase, el número cuántico principal, numero cuántico magnético, numero cuántico angular; en general se puede afirmar que estas constantes contienen la información específica del sistema. Para aplicar el método es necesario conocer el cambio adecuado de la variable r a una nueva variable s que cumpla

$$\Psi(r) = \Psi(s) \rightarrow s = s(r) \quad (75)$$

Siempre y cuando sea posible transformar la ecuación de Schrödinger en la ecuación (74), los valores de la energía y la función de onda solución [36] al sistema se hallan por medio de las siguientes formulas

$$\left[\frac{k_4^2 - k_5^2 - \left[\frac{1-2n}{2} - \frac{1}{2k_3} \left(k_2 - \sqrt{(k_3 - k_2)^2 - 4A} \right) \right]^2}{2 \left[\frac{1-2n}{2} - \frac{1}{2k_3} \left(k_2 - \sqrt{(k_3 - k_2)^2 - 4A} \right) \right]} \right]^2 - k_5^2 = 0 \rightarrow \text{Energía} \quad (76)$$

$$\Psi(s) = N_n s^{k_4} (1 - k_3s)^{k_5} {}_2F_1 \left(-n, n + 2(k_4 + k_5) + \frac{k_2}{k_3} - 1; 2k_4 + k_1, k_3s \right) \rightarrow \text{Función de onda} \quad (77)$$

Además

$$k_4 = \frac{(1 - k_1) + \sqrt{(1 - k_1)^2 - 4C}}{2} \quad (78)$$

$$k_5 = \frac{1}{2} + \frac{k_1}{2} - \frac{k_2}{2k_3} + \sqrt{\left[\frac{1}{2} + \frac{k_1}{2} - \frac{k_2}{2k_3} \right]^2 - \left[\frac{A}{k_3^2} + \frac{B}{k_3} + C \right]}$$

Cabe resultar que las formulas descritas anteriormente corresponden para valores de $k_3 \neq 0$, en el caso específico que la constante k_3 sea cero se tiene que

$$k_5 = -\frac{k_2}{2} + \sqrt{\left(\frac{k_2}{2}\right)^2 - A} \quad (79)$$

$$\left[\frac{B - k_4 k_2 - n k_2}{2k_4 + k_1 + 2n}\right]^2 - k_5^2 = 0 \rightarrow \text{Energía} \quad (80)$$

$$\Psi(s) = N_n s^{k_4} e^{-k_5 s} {}_1F_1(-n; 2k_4 + k_1; (2k_5 + k_2)s) \rightarrow \text{Función de onda} \quad (81)$$

Con N_n : una constante de normalización. La deducción matemática que involucra métodos asintóticos y soluciones que surgen de la función hipergeométrica se desarrollando de forma somera en los apéndices del artículo “*Formula Method for Bound State Problems*” [36]

4.3 Algunos problemas de la mecánica cuántica solucionados aplicando el método fórmula

En la presente sección se solucionan algunos problemas de la mecánica cuántica empleando el Método Fórmula

4.3.1 Partícula en un pozo de potencial infinito unidimensional

Consideremos el hamiltoniano de una partícula que se encuentra en un pozo de potencial infinito de longitud L

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V} \quad (82)$$

$$\hat{V} = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 < x < L \\ \infty & \text{otro caso} \end{cases}$$

Hallando los valores propios del hamiltoniano para la región $0 < x < L$

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi \rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0 \quad (83)$$

Comparando la ecuación de Schrödinger con la ecuación del método fórmula (74) Se tiene que

$$k_1 = k_2 = k_3 = B = C = 0; \quad A = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad (84)$$

$$k_4 = \frac{1+1}{2} = 1; \quad k_5 = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \pm \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}i \rightarrow \text{si } E > 0$$

Así la función de onda solución es

$$\Psi(x) = N_n x e^{\mp \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} ix} {}_1F_1\left(-n; 2; \pm \frac{\sqrt{8mE}}{\hbar} ix\right) \quad (85)$$

Los valores de la energía se hallan con la ecuación (80)

$$\left[\frac{0}{2+2n}\right]^2 - \left(\frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} i\right)^2 = 0 \rightarrow E = 0 \quad (86)$$

La solución a los valores de la energía empleando la ecuación (80) no corresponden a lo reportado para el modelo, similar ocurre con la función de onda que difiere de la solución tipo onda viajera características de la partícula dentro de un pozo de potencial infinito.

Dado que las soluciones halladas por el método fórmula para las funciones de onda y niveles de energía al seguir paso a paso el método no coinciden con los reportados, se propone como aporte de la tesis considerar k_4 como

$$k_{4\pm} = \frac{(1 - k_1) \pm \sqrt{(1 - k_1)^2 - 4C}}{2} \quad (87)$$

Al incluir el signo \pm antes de la raíz cuadra se amplían las posibles soluciones del modelo de interés al aplicar el método fórmula e incluso puede dar resultados más cercanos a los que se reportan en la literatura según el problema. Con el fin de verificar la premisa anterior, se emplea la segunda raíz de k_4 para determinar la función de onda del modelo

$$k_{4-} = \frac{1 - 1}{2} = 0 \quad (88)$$

$$\Psi_{(x)} = N_n e^{\mp \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} ix}; \text{ con } F_1\left(0; 0; \pm \frac{\sqrt{8mE}}{\hbar} ix\right) = 1 \quad (89)$$

La función de onda para $n = 0$ coincide exactamente con la reportada para una partícula en un pozo de potencial infinito, mientras que los niveles de energía al aplicar únicamente el método fórmula siguen siendo cero. Se puede complementar el estudio del sistema al aplicar condiciones de frontera a la función de onda, similar a lo que se realiza por el método convencional, y de esta forma reproducir los niveles de energía reportados en la literatura [3] [2]

4.3.2 Oscilador armónico unidimensional

Consideremos el hamiltoniano para un oscilador armónico unidimensional

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2} \quad (90)$$

Hallando los valores propios para la energía

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2} \right) \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{kx^2}{2} \right) \Psi = E\Psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \left(\frac{kx^2}{2} - E \right) \Psi = 0 \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{x^2} \left(-\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^4 + \frac{2mE}{\hbar^2} x^2 \right) \Psi &= 0; \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \end{aligned} \quad (91)$$

Empleando el cambio de variable

$$\begin{aligned} \Psi(s) &= \Psi(x) \\ s &= x^2 \end{aligned} \quad (92)$$

Usando la regla de la cadena para hallar las derivadas de $\Psi(x)$, se tiene

$$\frac{\partial}{\partial s} = \frac{\partial x}{\partial s} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial s} (\sqrt{s}) \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2\sqrt{s}} \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = 2\sqrt{s} \frac{\partial}{\partial s} \quad (93)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} = 2\sqrt{s} \frac{\partial}{\partial s} \left(2\sqrt{s} \frac{\partial}{\partial s} \right) = 4\sqrt{s} \left(\sqrt{s} \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{1}{2\sqrt{s}} \frac{\partial}{\partial s} \right) = 4s \frac{\partial^2}{\partial s^2} + 2 \frac{\partial}{\partial s} \quad (94)$$

Reemplazando en la ecuación de Schrödinger (91) y dividiendo entre $4s$

$$\frac{\partial^2 \Psi(s)}{\partial s^2} + \frac{1}{2s} \frac{\partial \Psi(s)}{\partial s} + \frac{1}{s^2} \left(-\frac{m^2 \omega^2}{4\hbar^2} s^2 + \frac{mE}{2\hbar^2} s \right) \Psi(s) = 0 \quad (95)$$

Comparando con la ecuación del método fórmula (74)

$$k_1 = \frac{1}{2}; k_2 = k_3 = C = 0; A = -\frac{m^2 \omega^2}{4\hbar^2}; B = \frac{mE}{2\hbar^2} \quad (96)$$

Hallando las constantes k_4 y k_5 para determinar la función de onda y los niveles de energía del oscilador armónico se tiene

$$\begin{aligned} k_{4+} &= \frac{\left(1 - \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{1}{2}\right)^2}}{2} = \frac{\left(1 - \frac{1}{2}\right) + 1 - \frac{1}{2}}{2} = \frac{2 - 1}{2} = \frac{1}{2} \\ k_5 &= \sqrt{-\left(-\frac{m^2 \omega^2}{4\hbar^2}\right)} = \pm \frac{m\omega}{2\hbar} \end{aligned} \quad (97)$$

La función de onda del oscilador armónico es

$$\Psi(s) = N_n s^{\frac{1}{2} \mp \frac{m\omega}{2\hbar} s} {}_1F_1 \left(-n, \frac{3}{2}; \pm \frac{m\omega}{\hbar} s \right) \quad (98)$$

Volviendo a la variable original

$$\Psi(x) = N_n x e^{\mp \frac{m\omega}{2\hbar} x^2} {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; \pm \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \quad (99)$$

Las energías se hallan reemplazando en la ecuación (80) del Método Fórmula y despejando de la ecuación el valor de la energía

$$\left[\frac{\frac{mE}{2\hbar^2}}{2\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2} + 2n} \right]^2 - \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^2 = 0 \rightarrow E = \hbar\omega \left(\frac{3}{2} + 2n\right) \rightarrow E_n = 2\hbar\omega \left(n + \frac{3}{4}\right) \quad (100)$$

Considerando la segunda raíz de k_4

$$k_{4-} = \frac{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}}{2} = 0 \quad (101)$$

La función de onda del oscilador armónico cuando $k_{4-} = 0$ es

$$\Psi(s) = N_n e^{\pm \frac{m\omega}{2\hbar} s} {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \mp \frac{m\omega}{\hbar} s\right) \quad (102)$$

Retomando la variable original

$$\Psi(x) = N_n e^{\pm \frac{m\omega}{2\hbar} x^2} {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \mp \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \quad (103)$$

La energía se halla empleado la ecuación (80)

$$\left[\frac{\frac{mE}{2\hbar^2}}{\frac{1}{2} + 2n} \right]^2 - \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^2 = 0 \rightarrow E_n = \hbar\omega \left(2n + \frac{1}{2}\right) \quad (104)$$

La función de onda solución es similar a la reportada en la literatura para el oscilador armónico cuántico unidimensional, mientras que los niveles de energía se encuentran modificados en $2n$.

4.3.3 Oscilador armónico esférico

La ecuación de Schrödinger para un potencial de simetría esférica [36] estado dado por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right] R(r) = ER(r) \quad (105)$$

Operando la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left(r^2 \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - E \right] R(r) \quad (106)$$

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \left[\frac{m^2 \omega^2 r^4}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2} r^2 + l(l+1) \right] R(r) = 0$$

Realizando el cambio de variable

$$\begin{aligned} R(r) &= R(s) \\ s &= r^2 \end{aligned} \tag{107}$$

Empleado las relaciones para primera y segunda derivada con cambios de variable del tipo (107) descritas en la ecuación (93) y (94) y reemplazando las derivadas parciales con respecto a s en (106) se tiene que

$$\begin{aligned} 4s \frac{\partial^2 R(s)}{\partial s^2} + 2 \frac{\partial R(s)}{\partial s} + \frac{2}{\sqrt{s}} 2\sqrt{s} \frac{\partial R(s)}{\partial s} - \frac{1}{s} \left[\frac{m^2 \omega^2 s^2}{\hbar^2} + l(l+1) \right] R(s) &= 0 \\ \frac{\partial^2 R(s)}{\partial s^2} + \frac{3}{2s} \frac{\partial R(s)}{\partial s} + \frac{1}{s^2} \left[s^2 \left(-\frac{m^2 \omega^2}{4\hbar^2} \right) + \left(\frac{mE}{2\hbar^2} \right) s - \frac{l(l+1)}{4} \right] R(s) &= 0 \end{aligned} \tag{108}$$

Comparando con la ecuación del método fórmula (74) se determinan las constantes

$$k_1 = \frac{3}{2}; \quad k_2 = k_3 = 0; \quad A = -\frac{m^2 \omega^2}{4\hbar^2}; \quad B = \frac{mE}{2\hbar^2}; \quad C = -\frac{l(l+1)}{4} \tag{109}$$

$$k_{4+} = \frac{\left(1 - \frac{3}{2}\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{3}{2}\right)^2 + l(l+1)}}{2} = \frac{\left(-\frac{1}{2}\right) + \sqrt{\frac{1}{4} + l^2 + l}}{2} \tag{110}$$

Factorizando el término dentro de la raíz

$$\begin{aligned} l^2 + l + \frac{1}{4} \rightarrow l_{\pm} &= \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{-1 \pm \sqrt{1^2 - 1}}{2(1)} = -\frac{1}{2} \\ l^2 + l + \frac{1}{4} &= \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \end{aligned} \tag{111}$$

Retomando

$$\begin{aligned} k_{4+} &= \frac{\left(-\frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}}{2} = \frac{l - \frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{2} = \frac{l}{2} \\ k_5 &= \sqrt{\frac{m^2 \omega^2}{4\hbar^2}} = \pm \frac{m\omega}{2\hbar} \end{aligned} \tag{112}$$

La función de onda para el oscilador armónico esférico es

$$\Psi(s) = N_n s^{\frac{l}{2}} e^{\mp \frac{m\omega}{2\hbar} s} {}_1F_1\left(-n; l + \frac{3}{2}; \frac{m\omega}{\hbar} s\right) \quad (113)$$

Volviendo a la variable original r usando el cambio de variable $s = r^2$ se tiene

$$\Psi(r) = N_n r^l e^{\mp \frac{m\omega}{2\hbar} r^2} {}_1F_1\left(-n; l + \frac{3}{2}; \pm \frac{m\omega}{\hbar} r^2\right) \quad (114)$$

Los valores de la energía se hallan con la ecuación (80) del Método Fórmula despejando de la ecuación el valor de la energía

$$\left[\frac{\frac{mE}{2\hbar^2}}{l + \frac{3}{2} + 2n} \right]^2 - \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^2 = 0 \rightarrow E_{n,l} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) \quad (115)$$

Los valores de energía determinados para k_{4+} coinciden con los reportados en [36] empleando el método fórmula, pero al comparar con la solución exacta se tiene como diferencia el término $2n$, aunque se resalta que la solución por el método fórmula reproduce de forma correcta el estado base del oscilador armónico esférico.

Considerando la segunda raíz de k_{4-}

$$k_{4-} = \frac{\left(-\frac{1}{2}\right) - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}}{2} = \frac{-l - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}}{2} = -\frac{l+1}{2} \quad (116)$$

$$k_5 = \sqrt{\frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2}} = \pm \frac{m\omega}{2\hbar}$$

La función de onda del oscilador armónico esférico para la segunda raíz de k_{4-} es

$$\Psi(s) = N_n s^{-\frac{l+1}{2}} e^{\mp \frac{m\omega}{2\hbar} s} {}_1F_1\left(-n; -l + \frac{1}{2}; \pm \frac{m\omega}{\hbar} s\right) \quad (117)$$

Volviendo a la variable original r usando el cambio de variable $s = r^2$

$$\Psi(r) = N_n r^{-(l+1)} e^{\mp \frac{m\omega}{2\hbar} r^2} {}_1F_1\left(-n; -l + \frac{1}{2}; \pm \frac{m\omega}{\hbar} r^2\right) \quad (118)$$

Los valores de la energía se hallan con la ecuación (80) del Método Fórmula despejando de la ecuación el valor de la energía

$$\left[\frac{\frac{mE}{2\hbar^2}}{-l - 1 + \frac{3}{2} + 2n} \right]^2 - \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^2 = 0 \rightarrow E_{n,l} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{1}{2} \right) \quad (119)$$

Los valores de energía para la raíz k_{4-} difieren con los reportados en la literatura aunque reproduce de forma correcta el primer estado excitado del oscilador armónico esférico.

4.3.4 Potencial de Hylleraas

Consideremos el hamiltoniano de una partícula que está sometida a un potencial de Hylleraas

$$\hat{V}(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2(\alpha x)} ; \quad \alpha: \text{un escalar con unidades de inverso de longitud} ; V_0 > 0 \quad (120)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{V_0}{\cosh^2(\alpha x)} \quad (121)$$

Hallando los valores propios del hamiltoniano

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{V_0}{\cosh^2(\alpha x)} \Psi = E\Psi \rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2 \cosh^2 \alpha(x)} \right) \Psi = 0 \\ &\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{\cosh^2(\alpha x)} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \cosh^2(\alpha x) + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) \Psi = 0 \end{aligned} \quad (122)$$

Realizando el cambio de variable

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \Psi(s) \\ s = \cosh^2(\alpha x) &\rightarrow x = \frac{1}{\alpha} \cosh^{-1}(\sqrt{s}) \end{aligned} \quad (123)$$

Empleando regla de la cadena para hallar las derivadas

$$\frac{\partial}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{\alpha} \cosh^{-1}(\sqrt{s}) \right) \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2\alpha\sqrt{s^2-s}} \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = 2\alpha\sqrt{s^2-s} \frac{\partial}{\partial s} \quad (124)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} = 2\alpha\sqrt{s^2-s} \frac{\partial}{\partial s} \left(2\alpha\sqrt{s^2-s} \frac{\partial}{\partial s} \right) \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} = 4\alpha^2(s^2-s) \frac{\partial^2}{\partial s^2} + 2\alpha^2(2s-1) \frac{\partial}{\partial s} \quad (125)$$

Reemplazando en la ecuación de los valores propios del hamiltoniano (122)

$$\begin{aligned} 4\alpha^2(s^2-s) \frac{\partial^2 \Psi(s)}{\partial s^2} + 2\alpha^2(2s-1) \frac{\partial \Psi(s)}{\partial s} + \frac{1}{s} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} s + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) \Psi(s) &= 0 \\ \frac{\partial^2 \Psi(s)}{\partial s^2} + \frac{(2s-1)}{2s(s-1)} \frac{\partial \Psi(s)}{\partial s} + \frac{1}{s^2(s-1)} \left(\frac{2mE}{4\alpha^2 \hbar^2} s + \frac{2mV_0}{4\alpha^2 \hbar^2} \right) \Psi(s) &= 0 \end{aligned} \quad (126)$$

Factorizando un menos en el numerador y el denominador de los coeficientes de la primera derivada, multiplicando y dividiendo por $(s-1)$ en el término de Ψ y agrupando se tiene

$$\frac{\partial^2 \Psi(s)}{\partial s^2} + \frac{(1/2 - s)}{s(1-s)} \frac{\partial \Psi(s)}{\partial s} + \frac{1}{s^2(1-s)^2} \left(\frac{mE}{2\alpha^2 \hbar^2} s^2 + \left(\frac{mV_0}{2\alpha^2 \hbar^2} - \frac{mE}{2\alpha^2 \hbar^2} \right) s - \frac{mV_0}{2\alpha^2 \hbar^2} \right) \Psi(s) = 0 \quad (127)$$

Comparando con la ecuación del método fórmula (74)

$$k_1 = \frac{1}{2}; \quad k_2 = 1; \quad k_3 = 1; \quad A = \frac{mE}{2\alpha^2 \hbar^2}; \quad B = \frac{mV_0}{2\alpha^2 \hbar^2} - \frac{mE}{2\alpha^2 \hbar^2}; \quad C = -\frac{mV_0}{2\alpha^2 \hbar^2} \quad (128)$$

Empleando la ecuación (78) y (79) para hallar k_4 y k_5

$$k_{4\pm} = \frac{\left(1 - \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2mV_0}{\alpha^2 \hbar^2}}}{2} = \frac{1}{4} \pm \frac{1}{4\alpha\hbar} \sqrt{8mV_0 + \alpha^2 \hbar^2} \quad (129)$$

$$k_5 = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} - \frac{1}{2} + \sqrt{\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4} - \frac{1}{2}\right]^2 - \left[\frac{mE}{2\hbar^2} - \frac{mE}{2\hbar^2} - \frac{mV_0}{2\hbar^2} + \frac{mV_0}{2\hbar^2}\right]} = \frac{1}{4} \pm \frac{1}{4} = \frac{1}{2}$$

La función de onda para la partícula es

$$\Psi(s) = N_n s^{\frac{1}{4} + \frac{1}{4\alpha\hbar} \sqrt{\hbar^2 + 8mV_0}} (1-s)^{\frac{1}{2}} {}_2F_1\left(-n, n + \frac{1}{2\alpha\hbar} \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0} + \frac{3}{2}; \frac{1}{2} + \frac{1}{2\alpha\hbar} \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0} + \frac{1}{2}, 1s\right) \quad (130)$$

Volviendo a la variable original

$$\Psi(x) = N_n \cosh^{\frac{1}{4} + \frac{1}{4\alpha\hbar} \sqrt{\hbar^2 + 8mV_0}}(\alpha x) (1 - \cosh^2(\alpha x))^{\frac{1}{2}} {}_2F_1\left(-n, n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2\alpha\hbar} \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0} + 1; \frac{1}{2} + \frac{1}{2\alpha\hbar} \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0} + \frac{1}{2}, \cosh^2(\alpha x)\right) \quad (131)$$

Los valores de la energía se hallan empleando la ecuación (80) para cuando $k_3 \neq 0$, y despejando la energía

$$\left[\frac{\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4\alpha\hbar} \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0} \right)^2 - \frac{1}{4} - \left[\frac{1-2n}{2} - \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{-4 \left(\frac{mE}{2\alpha^2 \hbar^2} \right)} \right) \right]^2}{2 \left[\frac{1-2n}{2} - \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{-4 \left(\frac{mE}{2\alpha^2 \hbar^2} \right)} \right) \right]} \right]^2 - \left(\frac{1}{2} \right)^2 = 0 \quad (132)$$

$$\left[-n + \frac{1}{4\alpha\hbar} \sqrt{-8mE} \right]^2 - n + \frac{1}{4\alpha\hbar} \sqrt{-8mE} - \frac{1}{16\alpha^2 \hbar^2} \left(\alpha\hbar + \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0} \right)^2 + \frac{1}{4} = 0$$

Definiendo $\lambda = -n + \frac{1}{4\alpha\hbar} \sqrt{-8mE}$, reemplazando y agrupando términos

$$\lambda^2 + \lambda - \frac{1}{16\alpha^2 \hbar^2} \left(\alpha\hbar + \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0} \right)^2 + \frac{1}{4} = 0 \quad (133)$$

Aplicando la formula cuadrática $\lambda_{\pm} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$ para hallar las raíces de λ

$$\lambda_{\pm} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4 \left(-\frac{1}{16\alpha^2 \hbar^2} (\alpha \hbar + \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0})^2 + \frac{1}{4} \right)}}{2} \rightarrow \lambda_{\pm} = \frac{-1 \pm \frac{1}{2\alpha \hbar} (\alpha \hbar + \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0})}{2} \quad (134)$$

Volviendo a la variable inicial

$$-n + \frac{1}{4\alpha^2 \hbar} \sqrt{-8mE} = \frac{-1 \pm \frac{1}{2\hbar\alpha} (\alpha \hbar + \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0})}{2} \quad (135)$$

Los valores de la energía para una partícula sometida a un potencial de Hylleraas son

$$E_{n_{\pm}} = -\frac{2\alpha^2 \hbar^2}{m} \left(n - \frac{1}{2} \pm \frac{1}{4\alpha \hbar} (\alpha \hbar + \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0}) \right)^2 \quad (136)$$

$$E_{n_{\pm}} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \left(2n - 1 \pm \frac{1}{2\alpha \hbar} (\alpha \hbar + \sqrt{\alpha^2 \hbar^2 + 8mV_0}) \right)^2$$

4.4 Análisis de resultados

Por medio del desarrollo de los cuatro ejemplos de la sección anterior se dio a conocer algunos de los escenarios en los que se puede ver involucrado el investigador, docente o estudiante que asuma un ejercicio de la mecánica cuántica por medio del Método Fórmula (FM). Se halló la función de onda y los valores de la energía para cada uno de los ejercicios; a continuación se mencionan los principales análisis de los resultados de cada uno de los ejercicios

- En el caso de una partícula en un pozo de potencial infinito unidimensional se tiene que la función de onda del sistema coincide con la reportada en la literatura para cuando $k_4 \rightarrow k_{4-} = 0$, obteniendo una solución del tipo onda plana tan característica de este ejercicio. Los niveles de energía por el método fórmula no se pueden determinar, dado que la ecuación para las energías del método dan como solución $E = 0$, lo que corrobora que para aplicar el método se requiere llevar la ecuación de Schrödinger a la forma canónica (74) y además que los coeficientes de los términos sean distintos de cero. Se propone que para el estado base $n = 0$, donde la función hipergeométrica confluyente es 1, aplicar sobre la función de onda condiciones de frontera para determinar la cuantización de la energía, con el fin de complementar el método fórmula y mejorar su exactitud.
- En el caso de un oscilador armónico cuántica unidimensional los niveles de energía hallados para cada valor de $k_{4\pm}$ difieren a los reportados en la literatura, aunque se complementan mutuamente para obtener todo el espectro energético del sistema, es decir, es posible expresar las ecuaciones (100) y (104) como

$$E_{n_+} = \hbar\omega \left((2n + 1) + \frac{1}{2} \right) \text{ y } E_{n_-} = \hbar\omega \left((2n) + \frac{1}{2} \right) \quad (137)$$

Por lo que los valores de energía $E_{n,+}$, correspondientes a $k_{4,+}$, reproducen de forma exacta los niveles de energía impares del oscilador armónico cuántico mientras que $E_{n,-}$, correspondientes a $k_{4,-}$, reproduce de forma exacta los niveles de energía pares del modelo. Al analizar y emplear ambas ecuaciones es posible obtener todo el espectro energético del oscilador armónico cuántico unidimensional. La función de onda hallada por el método fórmula coincide con la reportada en la literatura empleando los polinomios de Hermit, por lo que se concluye que el método es adecuado para este modelo.

- En el caso del oscilador armónico esférico se tiene que los niveles de energía por separados difieren de los reportados en la literatura, aunque al analizarlos en conjunto se observa que se puede reescribir (115) y (119) como

$$E_{n,l_+} = \hbar\omega \left((2n) + l + \frac{3}{2} \right) \text{ y } E_{n,l_-} = \hbar\omega \left((2n - 1) + l + \frac{3}{2} \right) \quad (138)$$

De forma que E_{n,l_+} , correspondiente a $k_{4,+}$, reproduce los estados energéticos pares del oscilador armónico esférico y E_{n,l_-} , correspondiente a $k_{4,-}$, los niveles impares menos el $n = 0$ que no es un estado permitido. De esta forma se obtiene todo el espectro energético del oscilador armónico esférico al contemplar las dos raíces de $k_{4\pm}$. La función de onda es similar a la reportada en la literatura como una solución en series de potencia.

- En el caso de una partícula sometida a un potencial tipo Hylleras, se evidencia la versatilidad del método fórmula para solucionar problemas matemáticos que involucran ecuaciones tipo Schrödinger con potenciales complejos de solucionar empleando métodos matemáticos convencionales. Se encuentra la función de onda de la partícula y los niveles de energía; al analizar los niveles de energía se observa una relación entre los valores de la energía y el momentum de la partícula, lo que corrobora lo reportado por [37]. El caso $V_0 = 0$ se retoma el modelo de una partícula sin potencial y el método fórmula no es aplicable dado que los coeficiente de la primera derivada son cero, aspecto que se corrobora al hallar los niveles de energía que dan cero, por lo que se impone la condición $V_0 > 0$.

Al realizar el análisis de los ejercicios desarrollados por el método fórmula y el aporte que se propone en la tesis al considerar k_4 como dos raíces $k_{4\pm}$, se concluye que el método es una excelente herramienta para el desarrollo de sistemas cuánticos que presentan complejidad en el tipo de potencial de interés, es un método aritmético simple de aplicar, solo se requiere identificar de forma idónea el cambio de variable a realizar en cada ejercicio, hallar los cambios de derivadas parciales correspondientes y comparar con la ecuación patrón del Método Formula. Por último, se emplean las constantes para encontrar la función de onda solución y los niveles de energía.

5. Análisis teórico de punto cuántico de grafeno en una región sin potencial eléctrico.

5.1 Definición de las variables del problema de estudio

En la presente sección se realiza la reproducción paso a paso del artículo “Enhancing the energy spectrum of graphene quantum dot with external magnetic and Aharonov-Bohm flux fields.” [1] y se complementara su estudio al considerar: 1) un vector potencial magnético sin presencia del flujo Aharonov-Bohm y 2) comparando los niveles de energía hallados con el Método Fórmula y el método WKB. El procedimiento comienza con la ecuación de Dirac-Weyl en coordenadas cilíndricas (29)

$$\hat{H} = v_f(\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{r,\varphi} + \tau\hat{V}(r)\sigma_z \quad (29)$$

Se asume un potencial vector magnético $\hat{\mathbf{A}}$ de la forma

$$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}_1 + \hat{\mathbf{A}}_2 \quad (139)$$

Con $\hat{\mathbf{A}}_1 = \frac{Br}{2}\hat{\boldsymbol{\varphi}}$; $\hat{\mathbf{A}}_2 = \frac{\phi_{AB}}{2\pi r}\hat{\boldsymbol{\varphi}}$ y el término ϕ_{AB} es el flujo tipo Aharonov-Bohm. Además $\hat{\mathbf{A}}$ cumple con

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{B} &= B\hat{\mathbf{z}} \\ \nabla \times \hat{\mathbf{A}} &= \mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}} \\ \nabla \cdot \hat{\mathbf{A}} &= 0 \end{aligned} \right\} \text{Transformadas gauge} \quad (140)$$

De esta forma el operador $\hat{\mathbf{A}}$ es de la forma

$$\hat{\mathbf{A}} = \left(\frac{Br}{2} + \frac{\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \hat{\boldsymbol{\varphi}} \quad (141)$$

El operador momentum $\hat{\mathbf{p}}$ que en coordenadas cilíndricas transforma como

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\boldsymbol{\varphi}} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{\mathbf{z}} \right) \quad (142)$$

Las matrices de Pauli en coordenadas cilíndricas descritas en el artículo de Serrano [1] tiene la siguiente forma [38]

$$\sigma_r = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_\varphi = i \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (143)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_r \hat{\mathbf{r}} + \sigma_\varphi \hat{\boldsymbol{\varphi}} + \sigma_z \hat{\mathbf{z}}$$

Por último, el potencial $\hat{V}(x, y)$ realiza un confinamiento de los portadores de carga del grafeno en el plano $x - y$ y por lo que se asume un potencial tipo pozo cuántico

$$\hat{V}(r) = \begin{cases} 0 & \text{para } r \leq R \\ \infty & \text{para } r \geq R \end{cases} \quad R: \text{radio del punto cuántico} \quad (144)$$

En el presente trabajo se modelan los fermiones de Weyl, cuasi partículas de spin 1/2 que poseen como característica particular una masa efectiva igual a cero.

5.2 Desarrollo del hamiltoniano de Dirac-Weyl

Para el análisis teórico se desarrolla el hamiltoniano (29) en la región $0 \leq r \leq R$ donde la ecuación se reduce a

$$\hat{H} = v_f (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}) \cdot \sigma_{r,\varphi}$$

$$v_f \left(-i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\boldsymbol{\varphi}} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{\mathbf{z}} \right) + e \left(\frac{Br}{2} + \frac{\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \hat{\boldsymbol{\varphi}} \right) \cdot (\sigma_r \hat{\mathbf{r}} + \sigma_\varphi \hat{\boldsymbol{\varphi}}) \quad (145)$$

$$\hat{H} = v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \sigma_r + \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \sigma_\varphi \right)$$

Se procede a determinar los valores propios del operador \hat{H}

$$v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \sigma_r + \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \sigma_\varphi \right) \Psi = E\Psi \quad (146)$$

Por separación de variables se asume una solución para la función de onda Ψ de la forma

$$\Psi = \Phi(\varphi)R(r) \quad (147)$$

Además dado que las soluciones corresponden a la ecuación de Dirac-Weyl, las soluciones para Ψ son del tipo spinor de Weyl

$$\Psi = (\Psi_1, \Psi_2) = (\Phi_1(\varphi)\chi_A(r), \Phi_2(\varphi)\chi_B(r)) \quad (148)$$

Se conoce que la solución azimutal está ligada al número cuántico magnético m . Su forma será la de una onda plana

$$\Phi_1(\varphi) = e^{im\varphi}$$

$$\Phi_2(\varphi) = ie^{i(m+1)\varphi} \quad (149)$$

La componente $\Phi_2(\varphi)$ esta rotada en noventa grados con respecto a la de $\Phi_1(\varphi)$, esto se justifica en la teoría de grupos SU2 y SO3 para conserva la invariancia ante rotaciones en las soluciones de la función de onda. Lo anterior garantiza las leyes de conservación asociadas a las propiedades rotacionales del sistema, en este caso, el momento angular m y la conservación del spin.

Por lo tanto función de onda Ψ del sistema tiene la siguiente forma

$$\Psi = \left(e^{im\varphi} \chi_A(r), ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \right) \quad (150)$$

Dado que la función de onda Ψ se operara con las matrices de Pauli es necesario transformarla de un vector fila a un vector columna para ello se procede a

$$\Psi^T = \left(e^{im\varphi} \chi_A(r), ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \right)^T = \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \chi_A(r) \\ ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \end{pmatrix} \quad (151)$$

Ahora el problema se reduce a hallar las componentes radiales solución a la función de onda $\chi_A(r)$ y $\chi_B(r)$. Para ello se resuelve las ecuaciones que surgen de los valores propios de \hat{H} (146)

$$v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \sigma_r + \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \sigma_\varphi \right) \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \chi_A(r) \\ ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \chi_A(r) \\ ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \end{pmatrix} \quad (152)$$

Desarrollando el lado izquierdo de la ecuación

$$v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} + i \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \chi_A(r) \\ ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \end{pmatrix} \quad (153)$$

$$v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \begin{pmatrix} ie^{m\varphi} \chi_B(r) \\ e^{i(m+1)\varphi} \chi_A(r) \end{pmatrix} + i \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \begin{pmatrix} -ie^{im\varphi} \chi_B(r) \\ e^{i(m+1)\varphi} \chi_A(r) \end{pmatrix} \right)$$

Igualando a la energía por la función de onda

$$v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \begin{pmatrix} ie^{m\varphi} \chi_B(r) \\ e^{i(m+1)\varphi} \chi_A(r) \end{pmatrix} + i \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \begin{pmatrix} -ie^{im\varphi} \chi_B(r) \\ e^{i(m+1)\varphi} \chi_A(r) \end{pmatrix} \right) = E \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \chi_A(r) \\ ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \end{pmatrix} \quad (154)$$

Así se generan un sistema de dos ecuaciones

$$1) \quad v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} (ie^{m\varphi} \chi_B(r)) + i \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) (-ie^{im\varphi} \chi_B(r)) \right) = E e^{im\varphi} \chi_A(r) \quad (155)$$

$$2) \quad v_f \left(-i\hbar e^{i(m+1)\varphi} \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} + ie^{i(m+1)\varphi} \left(\frac{\hbar(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_A(r) \right) = ie^{i(m+1)\varphi} E \chi_B(r)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones 1) (155)

$$v_f \left(\hbar e^{im\varphi} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + e^{im\varphi} \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) = e^{im\varphi} E \chi_A(r) \quad (156)$$

Factorizando $e^{im\varphi}$ y simplificando la expresión

$$v_f \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) = E \chi_A(r) \quad (157)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones 2) (155) factorizando el término $i e^{i(m+1)\varphi}$ para simplificar la expresión y eliminar la dependencia azimutal se llega a:

$$v_f \left(-\hbar \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_A(r) \right) = E \chi_B(r) \quad (158)$$

De esta forma se genera el sistema de dos ecuaciones de Weyl acopladas por las componentes radiales del spinor $\chi_A(r)$ y $\chi_B(r)$

$$\begin{aligned} 1) \quad & \hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) = \frac{E}{v_f} \chi_A(r) \\ 2) \quad & -\hbar \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_A(r) = \frac{E \chi_B}{v_f}(r) \end{aligned} \quad (159)$$

5.2.1 Desarrollo del sistema de ecuaciones de Weyl acopladas por la componente radial Ψ

Para solucionar el sistema de ecuación de dos incógnitas se procede a despejar de la primera ecuación de Weyl $\chi_A(r)$ (159)

$$\frac{v_f}{E} \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) = \chi_A(r) \quad (160)$$

Se reemplaza $\chi_A(r)$ en la segunda ecuación de Weyl (159). El objetivo es llegar a una ecuación diferencial tipo Schrödinger

$$\begin{aligned} & -\hbar \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_f}{E} \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) \right) \\ & + \left(\frac{\hbar(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \left(\frac{v_f}{E} \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) \right) = \frac{E \chi_B}{v_f}(r) \end{aligned} \quad (161)$$

$$\begin{aligned} & -\hbar \frac{\partial}{\partial r} \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) \\ & + \left(\frac{\hbar(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) = \frac{E^2}{v_f^2} \chi_B(r) \end{aligned}$$

Analizando los términos por serado

i) **Primer término de la izquierda** (161)

Se tiene la derivada de un producto, operando y agrupando términos

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \hbar \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \hbar \chi_B(r) \left(-\frac{\hbar m}{r^2} + \frac{eB}{2} - \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r^2} \right) \quad (162)$$

ii) **Segundo término de la izquierda** (161)

Realizando las operaciones y reorganizando los términos se tienen

$$\begin{aligned} & \hbar \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} \\ & + \left(\frac{\hbar^2 m(m+1)}{r^2} + \frac{\hbar(m+1)eB}{2} + \frac{\hbar(m+1)e\phi_{AB}}{2\pi r^2} + \frac{eB\hbar m}{2} + \frac{e^2 B^2 r^2}{4} \right. \\ & \left. + \frac{e^2 B \phi_{AB}}{4\pi} + \frac{e\phi_{AB}\hbar m}{2\pi r^2} + \frac{e^2 \phi_{AB} B}{4\pi} + \frac{e^2 \phi_{AB}^2}{4\pi^2 r^2} \right) \chi_B(r) \end{aligned} \quad (163)$$

Sumando ambos términos ecuación (162) y (163), cancelando los términos de primera derivada iguales y simplificando la expresión resultante

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 \frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} \\ & + \left(\frac{\hbar^2 m(m+2)}{r^2} + \hbar m e B + \frac{\hbar(m+1)e\phi_{AB}}{\pi r^2} + \frac{e^2 B^2 r^2}{4} + \frac{e^2 B \phi_{AB}}{2\pi} + \frac{e^2 \phi_{AB}^2}{4\pi^2 r^2} \right) \chi_B(r) \end{aligned} \quad (164)$$

Igualando a la energía por el spinor $\chi_B(r)$ y dividiendo a ambos lados por $-\hbar^2$ se llega a

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2 m(m+2)}{r^2} + \hbar m e B + \frac{\hbar(m+1)e\phi_{AB}}{\pi r^2} + \frac{e^2 B^2 r^2}{4} + \frac{e^2 B \phi_{AB}}{2\pi} + \frac{e^2 \phi_{AB}^2}{4\pi^2 r^2} \right) \chi_B(r) \\ & = -\frac{E^2}{\hbar^2 v_f^2} \chi_B(r) \end{aligned} \quad (165)$$

Empleando la definición de longitud magnética $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$, definiendo: el fluxón como $\phi_o = \frac{h}{e}$ y una variable auxiliar como $\alpha = \frac{E}{v_f \hbar}$, se tiene

$$\frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \left(\frac{m(m+2)}{r^2} + \frac{m}{l_B^2} + \frac{2(m+1)\phi_{AB}}{r^2 \phi_o} + \frac{r^2}{4l_B^4} + \frac{\phi_{AB}}{l_B^2 \phi_o} + \frac{\phi_{AB}^2}{r^2 \phi_o^2} \right) \chi_B(r) = -\alpha^2 \chi_B(r) \quad (166)$$

Definiendo ζ como la relación entre el flujo magnético tipo Aharonov-Bohm y el fluxón

$$\zeta = \frac{\phi_{AB}}{\phi_o} \quad (167)$$

$$\frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \left(\frac{m(m+2)}{r^2} + \frac{m}{l_B^2} + \frac{2(m+1)\zeta}{r^2} + \frac{r^2}{4l_B^4} + \frac{\zeta}{l_B^2} + \frac{\zeta^2}{r^2} \right) \chi_B(r) = -\alpha^2 \chi_B(r) \quad (168)$$

Analizando los factores con el inverso del cuadro del radio

$$\frac{m(m+2)}{r^2} + \frac{2(m+1)\zeta}{r^2} + \frac{\zeta^2}{r^2} = \frac{1}{r^2} (m^2 + 2m + 2m\zeta + 2\zeta + \zeta^2) = \frac{1}{r^2} ((m + \zeta + 1)^2 - 1) \quad (169)$$

Reemplazando e igualando a cero

$$\frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \left(\frac{(m + \zeta + 1)^2 - 1}{r^2} + \frac{r^2}{4l_B^4} + \frac{m + \zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \chi_B(r) = 0 \quad (170)$$

De forma análoga se llega a la ecuación para $\chi_A(r)$

$$\frac{\partial^2 \chi_A(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} - \left(\frac{(m + \zeta)^2 - 1}{r^2} + \frac{r^2}{4l_B^4} + \frac{m + \zeta + 1}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \chi_A(r) = 0 \quad (171)$$

5.2.2 Solución de la componente radial de Ψ por el método fórmula: funciones χ_A y χ_B y niveles de energía

Antes de aplicar el método fórmula es necesario transformar la ecuación tipo Schrödinger de $\chi_A(r)$ y $\chi_B(r)$ a una forma específica por medio de un cambio adecuado del tipo $r \rightarrow s$. En este caso el cambio $\chi_B(r) = \chi_B(s)$ es el mismo descrito por la ecuación (107) con $s = r^2$. Empleando las relaciones para primera y segunda derivada con cambio de variable del tipo (107) descritas en (93) y (94), reemplazando en la ecuación tipo Schrödinger $\chi_B(r)$ (170) y reorganizando los términos

$$2 \frac{\partial \chi_B(s)}{\partial s} + 4s \frac{\partial^2 \chi_B(s)}{\partial s^2} - \frac{2\sqrt{s}}{\sqrt{s}} \frac{\partial \chi_B(s)}{\partial s} - \left(\frac{(m + \zeta + 1)^2 - 1}{s} + \frac{s}{4l_B^4} + \frac{m + \zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \chi_B(s) = 0 \quad (172)$$

$$\frac{\partial^2 \chi_B(s)}{\partial s^2} + \frac{1}{s^2} \left(s^2 \left(-\frac{1}{16l_B^4} \right) + s \left(\frac{\alpha^2}{4} - \frac{m + \zeta}{4l_B^2} \right) - \frac{(m + \zeta + 1)^2 - 1}{4} \right) \chi_B(s) = 0$$

De forma análoga se halla la ecuación para $\chi_A(s)$ (171)

$$\frac{\partial^2 \chi_A(s)}{\partial s^2} + \frac{1}{s^2} \left(s^2 \left(-\frac{1}{16l_B^4} \right) + s \left(\frac{\alpha^2}{4} - \frac{m + \zeta + 1}{4l_B^2} \right) - \frac{(m + \zeta)^2 - 1}{4} \right) \chi_A(s) = 0 \quad (173)$$

Comparando con la ecuación del método fórmula (74). Debido a que se busca que ambas ecuaciones diferenciales sean iguales se ha de cumplir que sus coeficientes sean exactamente los mismos, de esta forma se tiene para $\chi_B(s)$

$$k_1 = 0; \quad k_2 = 0; \quad k_3 = 0$$

$$A = -\frac{1}{16l_B^4}; \quad B = \frac{\alpha^2}{4} - \frac{m + \zeta}{4l_B^2}; \quad C = -\frac{(m + \zeta + 1)^2 - 1}{4} \quad (174)$$

Determinando las constantes k_4 y k_5 con la ecuación (78) y (79)

$$k_{4+} = \frac{(1) + \sqrt{(1)^2 - 4 \left(-\frac{(m + \zeta + 1)^2 - 1}{4} \right)}}{2} \rightarrow k_{4+} = \frac{m + \zeta + 2}{2} \quad (175)$$

$$k_{5\pm} = \sqrt{\frac{1}{16l_B^4}} \rightarrow k_5 = \pm \frac{1}{4l_B^2}$$

La solución para $\chi_B(s)$ (172) es

$$\chi_B(s) = N_n s^{\frac{m+\zeta+2}{2}} e^{\mp \frac{1}{4l_B^2} s} F_1 \left(-n; m + \zeta + 2; \pm \frac{1}{2l_B^2} s \right) \quad (176)$$

Los valores de la energía se hallan con la ecuación (80)

$$\left[\frac{\frac{\alpha^2}{4} - \frac{m+\zeta}{4l_B^2}}{m+\zeta+2+2n} \right]^2 - \left(\frac{1}{4l_B^2} \right)^2 = 0 \rightarrow l_B^2 \alpha^2 = 2(m + \zeta + 1 + n); \text{ con } \alpha = \frac{E}{\hbar v_f} \quad (177)$$

$$E_{m,n} = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(m + \zeta + 1 + n)}$$

De forma análoga se halla la función de onda y los niveles de energía para la ecuación $\chi_A(s)$ (173), comparando la ecuación $\chi_A(s)$ (173) con la ecuación del Método Fórmula (74) se determinan las constantes

$$k_1 = 0; \quad k_2 = 0; \quad k_3 = 0$$

$$A = -\frac{1}{16l_B^4}; \quad B = \frac{\alpha^2}{4} - \frac{m + \zeta + 1}{4l_B^2}; \quad C = -\frac{(m + \zeta)^2 - 1}{4} \quad (178)$$

Determinando las constantes k_4 y k_5 con la ecuación (78) y (79)

$$k_{4+} = \frac{m + \zeta + 1}{2}$$

$$k_{5\pm} = \pm \frac{1}{4l_B^2} \quad (179)$$

Así la solución de $\chi_A(s)$ (173) es

$$\chi_A(s) = N_n s^{\frac{m+\zeta+1}{2}} e^{\mp \frac{1}{4l_B^2} s} F_1 \left(-n; m + \zeta + 1; \pm \frac{1}{2l_B^2} s \right) \quad (180)$$

Los valores de la energía se hallan con la ecuación (80)

$$\left[\frac{\frac{\alpha^2}{4} - \frac{m + \zeta + 1}{4l_B^2}}{m + \zeta + 1 + 2n} \right]^2 - \left(\frac{1}{4l_B^2} \right)^2 = 0 \quad (181)$$

$$E_{m,n} = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(m + \zeta + 1 + n)}$$

Como se puede corroborar con el procedimiento desarrollado, los valores para la energía de $\chi_A(s)$ y $\chi_B(s)$ son los mismos; este suceso tiene sustento en el acoplamiento de los componentes del spinor de Weyl $\chi_A(s)$ y $\chi_B(s)$ que producen una descripción completa y enlazada de las propiedades físicas del grafeno, en este caso, los valores de la energía.

5.2.3 Función de onda solución

Las soluciones para $\chi_A(s)$ y $\chi_B(s)$

$$\chi_A(s) = N_n s^{\frac{m+\zeta+1}{2}} e^{\mp \frac{1}{4l_B^2} s} F_1 \left(-n; m + \zeta + 1 \pm; \frac{1}{2l_B^2} s \right) \quad (180)$$

$$\chi_B(s) = N_n s^{\frac{m+\zeta+2}{2}} e^{\mp \frac{1}{4l_B^2} s} F_1 \left(-n; m + \zeta + 2; \pm \frac{1}{2l_B^2} s \right) \quad (176)$$

Retomando la variable original r se tiene $s = r^2$

$$\chi_A(r) = N_n r^{m+\zeta+1} e^{\mp \frac{r^2}{4l_B^2}} F_1 \left(-n; m + \zeta + 1; \pm \frac{1}{2l_B^2} r^2 \right) \quad (182)$$

$$\chi_B(r) = N_n r^{m+\zeta+2} e^{\mp \frac{r^2}{4l_B^2}} F_1 \left(-n; m + \zeta + 2; \pm \frac{1}{2l_B^2} r^2 \right)$$

De esta forma la función de onda Ψ es

$$\Psi = \begin{pmatrix} N_n r^{m+\zeta+1} e^{im\varphi \mp \frac{r^2}{4l_B^2}} F_1 \left(-n; m + \zeta + 1; \pm \frac{1}{2l_B^2} r^2 \right) \\ N_n i r^{m+\zeta+2} e^{i(m+1)\varphi \mp \frac{r^2}{4l_B^2}} F_1 \left(-n; m + \zeta + 2; \pm \frac{1}{2l_B^2} r^2 \right) \end{pmatrix} \quad (183)$$

Los valores teóricos de la energía para el grafeno en presencia de un flujo magnético tipo Aharonov-Bohm son

$$E_{m,n} = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(m + \zeta + 1 + n)}; \quad \zeta = \frac{\phi_{AB}}{\phi_0} \quad (184)$$

5.3 Punto cuántico sin presencia del flujo Aharonov-Bohm

Ahora consideremos un sistema similar al estudiado en la sección anterior pero sin la influencia del flujo Aharonov-Bohm. El hamiltoniano está descrito por la ecuación (29), se conserva el tipo de potencial de confinamiento (144) pero se redefine el vector potencial magnético como $\hat{A} = \frac{Br}{2} \hat{\varphi}$.

En la región $0 \leq r \leq R$ el hamiltoniano se reduce a

$$\hat{H} = v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \sigma_r + \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} \right) \sigma_\varphi \right) \quad (185)$$

Las soluciones son similares a las descritas en la sección anterior, se asume una solución del tipo exponencial para la componente azimutal y se busca determinar la componente radial del spinor. El sistema de ecuaciones que se genera para los valores propios de \hat{H} es

$$v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \sigma_r + \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \right) \sigma_\varphi \right) \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \chi_A(r) \\ ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \chi_A(r) \\ ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \end{pmatrix} \quad (186)$$

El sistema (186) se puede reducir a un sistema de ecuaciones acopladas por la componente radial de la forma

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\frac{m}{r} + \frac{eBr}{2\hbar c} \right) \chi_B(r) = \alpha \chi_A(r) \\ 2) \quad & \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} - \left(\frac{(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2\hbar c} \right) \chi_A(r) = -\alpha \chi_B(r) \end{aligned} \quad (187)$$

El procedimiento para solucionar el sistema de ecuaciones es similar al descrito anteriormente, por lo que solo se muestran los pasos más relevantes.

El sistema de ecuaciones tipo Schrödinger para $\chi_A(r)$ y $\chi_B(r)$ (187) es

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial^2 \chi_A(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} + \left(-\frac{(m^2-1)}{r^2} - \frac{(m+1)}{l_B^2} - \frac{r^2}{4l_B^4} + \alpha^2 \right) \chi_A(r) = 0 \\ 2) \quad & \frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(-\frac{m(m+2)}{r^2} - \frac{m}{cl_B^2} - \frac{r^2}{4l_B^4} + \alpha^2 \right) \chi_B(r) = 0 \end{aligned} \quad (188)$$

Al solucionar por el método fórmula se hallan la función de onda para la componente radial y los niveles de energía

$$\begin{aligned} \chi_A(r) &= N_n r^{m+1} e^{-\frac{r^2}{4l_B^2}} F_1 \left(-n; m+1; \frac{r^2}{2l_B^2} \right) \\ \chi_B(r) &= N_n r^{m+2} e^{-\frac{r^2}{4l_B^2}} F_1 \left(-n; m+2; \frac{r^2}{2l_B^2} \right) \\ E_{m,n} &= \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(m+n+1)} \end{aligned} \quad (189)$$

Se destaca que los niveles de energía para $\chi_A(r)$ y $\chi_B(r)$ coinciden, por lo que se corrobora que el sistema cuántico se encuentra acoplado, lo que produce una descripción completa del sistema por medio de los niveles de energía.

5.4 Solución de la parte radial de Ψ por el método WKB: funciones χ_A y χ_B y los valores de energía

En la presente sección se empleara el método WKB para determinar la función de onda Ψ para cada una de las componentes del spinor de Weyl $\chi_A(r)$ y $\chi_B(r)$ y los niveles de energía correspondientes.

5.4.1 Función de onda y niveles de energía para la componente radial χ_A

Para aplicar el método es necesario calcular las fases de las funciones solución, por lo cual se comparan las ecuaciones (170) y (171) con la ecuación del método WKB de la forma (35) con el fin de identificar constantes.

$$\int \frac{b(x')}{a(x')} dx' = \int \frac{-\left(\frac{(m+\zeta)^2-1}{r'^2} + \frac{r'^2}{4l_B^4} + \frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right)}{-\frac{1}{r'}} dr' \quad (190)$$

$$\int \frac{b(x')}{a(x')} dx' = [(m+\zeta)^2-1] \ln(r) + \frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right) \frac{r^2}{2}$$

$$-\frac{1}{\varepsilon} \int a(x') dx' = -\frac{1}{1} \int -\frac{1}{r'} dr' = \ln(r)$$

Así las soluciones para el spinor χ_A es de la forma (38)

$$\chi_A(r) \sim \frac{C_1}{r^{(m+\zeta)^2-1}} e^{-\left(\frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right) \frac{r^2}{2}\right)} - C_2 r^{(m+\zeta)^2+1} e^{\left(\frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right) \frac{r^2}{2}\right)} \quad (191)$$

Las constantes C_1 y C_2 se hallan en la condición límite $r = R$ donde el spinor $\chi_A(r)$ se anula, por lo que

$$\chi_A(R) \sim \frac{C_1}{R^{(m+\zeta)^2-1}} e^{-\left(\frac{R^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right) \frac{R^2}{2}\right)} - C_2 R^{(m+\zeta)^2+1} e^{\left(\frac{R^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right) \frac{R^2}{2}\right)} = 0 \quad (192)$$

Despejando para hallar las constantes

$$\frac{C_1}{R^{(m+\zeta)^2-1}} e^{-\left(\frac{R^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right) \frac{R^2}{2}\right)} = C_2 R^{(m+\zeta)^2+1} e^{\left(\frac{R^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right) \frac{R^2}{2}\right)} \quad (193)$$

Considerando que las fases se anulan en la condición límite y expresando la constante C_1 en función de C_2 se tiene que

$$C_1 = C_2 R^{2(m+\zeta)^2} \quad (194)$$

Remplazando en $\chi_A(r)$ (192) y redefiniendo $C_2 = N$ se tiene

$$\chi_A(r) \sim \frac{NR^{2(m+\zeta)^2}}{r^{(m+\zeta)^2-1}} e^{-\left(\frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right) \frac{r^2}{2}\right)} - Nr^{(m+\zeta)^2+1} e^{\left(\frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta+1}{l_B^2} - \alpha^2\right) \frac{r^2}{2}\right)} \quad (195)$$

Mientras que para los niveles de energía se tiene que las fases de los exponenciales tienen que coincidir en la condición límite $r = R$ por lo que

$$\frac{R^2}{8l_B^4} + \left(\frac{m + \zeta + 1}{l_B^2} - \alpha^2 \right) = 0 \rightarrow E_{\chi_A} = \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{\left(\frac{R^2}{8l_B^2} + m + \zeta + 1 \right)} \quad (196)$$

Que corresponde a los niveles de energía que presenta el spinor $\chi_A(r)$

5.4.2 Función de onda y niveles de energía para la componente radial χ_B

El procedimiento para la componente del spinor $\chi_B(r)$ es similar al descrito anteriormente, primero se procede a calcular las fases del método WKB

$$\begin{aligned} \int \frac{b(x')}{a(x')} dx' &= \int \left[\frac{(m + \zeta + 1)^2 - 1}{r'} + \frac{r'^3}{4l_B^4} + \left(\frac{m + \zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) r' \right] dr' \\ \int \frac{b(x')}{a(x')} dx' &= [(m + \zeta + 1)^2 - 1] \ln(r) + \frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m + \zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \frac{r^2}{2} \\ -\frac{1}{\varepsilon} \int_0^x a(x') dx' &= -\frac{1}{1} \int -\frac{1}{r'} dr' = \ln(r) \end{aligned} \quad (197)$$

Así las soluciones para el spinor χ_B

$$\chi_B(r) \sim \frac{C_1}{r^{(m+\zeta+1)^2-1}} e^{-\left(\frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \frac{r^2}{2} \right)} - C_2 r^{(m+\zeta+1)^2+1} e^{\left(\frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \frac{r^2}{2} \right)} \quad (198)$$

De forma análoga se calculan las constantes C_1 y C_2 en la condición límite $r = R$ donde el spinor $\chi_B(r)$ se anula, por lo que

$$\chi_B(R) \sim \frac{C_1}{R^{(m+\zeta+1)^2-1}} e^{-\left(\frac{R^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \frac{R^2}{2} \right)} - C_2 R^{(m+\zeta+1)^2+1} e^{\left(\frac{R^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \frac{R^2}{2} \right)} = 0 \quad (199)$$

Despejando para hallar la constante C_1 en función de C_2 y considerando que las fases se anulan en la condición límite, se llega a que $C_1 = C_2 R^{2(m+\zeta+1)^2}$. Por último, redefiniendo $C_2 = N$ y reemplazando se tiene que

$$\chi_B(r) \sim \frac{NR^{2(m+\zeta+1)^2}}{r^{(m+\zeta+1)^2-1}} e^{-\left(\frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \frac{r^2}{2} \right)} - Nr^{(m+\zeta+1)^2+1} e^{\left(\frac{r^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m+\zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \frac{r^2}{2} \right)} \quad (200)$$

Mientras que para los niveles de energía se tiene que las fases de los exponenciales deben de coincidir en la condición límite $r = R$, procedimiento análogo al desarrollado para $\chi_A(r)$, por lo que

$$\frac{R^4}{16l_B^4} + \left(\frac{m + \zeta}{l_B^2} - \alpha^2 \right) \frac{R^2}{2} = 0 \rightarrow E_{\chi_B} = \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{\frac{R^2}{8l_B^2} + m + \zeta} \quad (201)$$

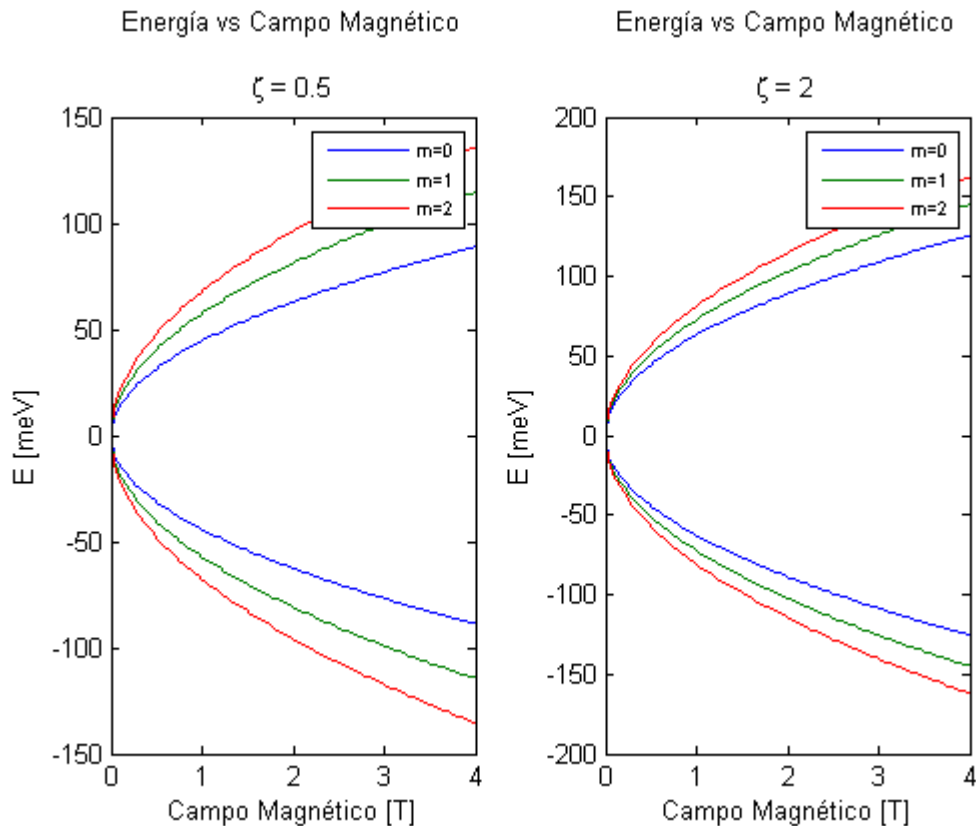
Al comparar las energías de componte del spinor χ_A y χ_B se observa que en forma son similares y ambas presentan dependencia del tamaño del punto cuántico (R), pero sus energías no coinciden

exactamente. Las dificultades con la igualdad de las energías probablemente se deba a que el método WKB es un método aproximado y que depende del tipo de ecuación tipo Schrödinger que se modela.

5.5 Gráficas de los valores de energía en función del número cuántico magnético m

5.5.1 Niveles de energía en función del campo magnético $E_m = f(B)$

Para realizar el análisis del comportamiento de los niveles de energía se asumen dos valores arbitrarios de la relación de flujo Aharonov-Bohm y fluxón $\zeta = 0.5$ y $\zeta = 2$. Los resultados se presentan a continuación

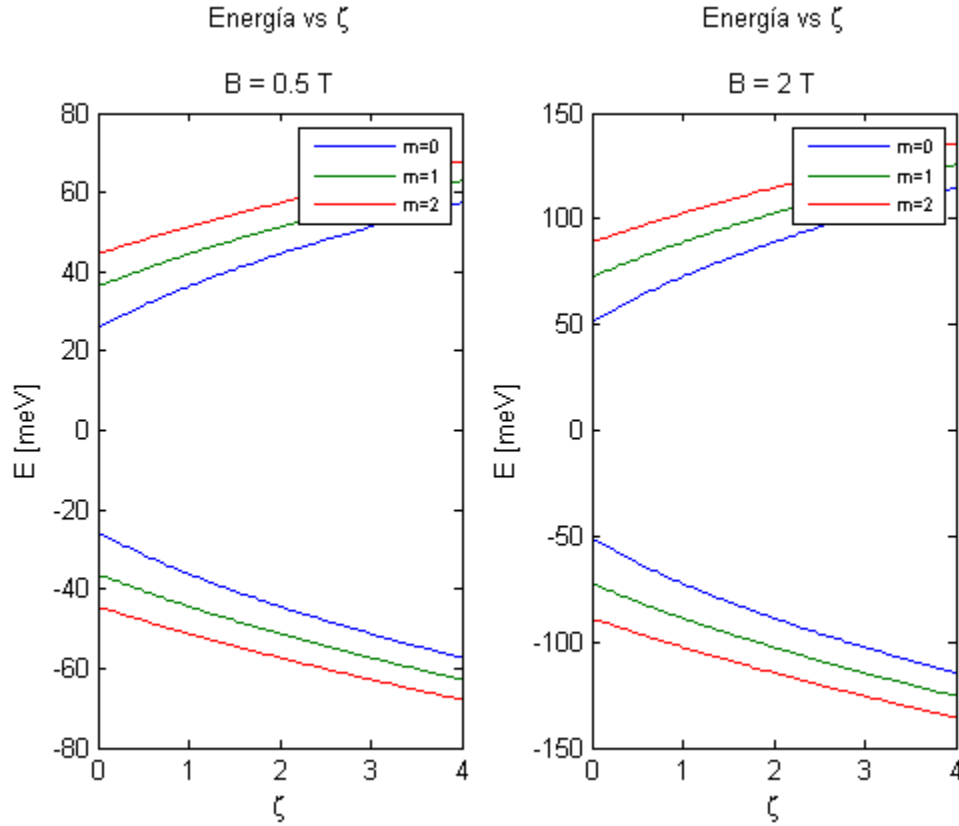


Gráfica 1 Relación de la energía en función del campo magnético B Para valores del numero cuántico m entre 0 y 2 y una relación de flujo ζ de $\zeta = 0.5$ y $\zeta = 2$.

Al realizar el análisis grafico se corrobora el tipo de relación existente entre las variables E y B , que es acorde al modelo matemático y a lo registrado en la literatura [1]. Se observa además, que al incrementar la relación flujo Aharonov-Bohm y fluxón se obtiene un incremento leve en el valor de los niveles de energía base y excitados, lo que corrobora que el termino ζ , relacionando con aspectos topológicos del sistema, es significativo en el estudio de sistemas cuánticos de baja dimensión.

5.5.2 Niveles de energía en función de la relación de flujo $E_m = f(\zeta)$

Para realizar los análisis de las gráficas se asume un valor arbitrario de campo magnético $B = 1 T$ y $B = 5 T$. Los resultados se presentan a continuación

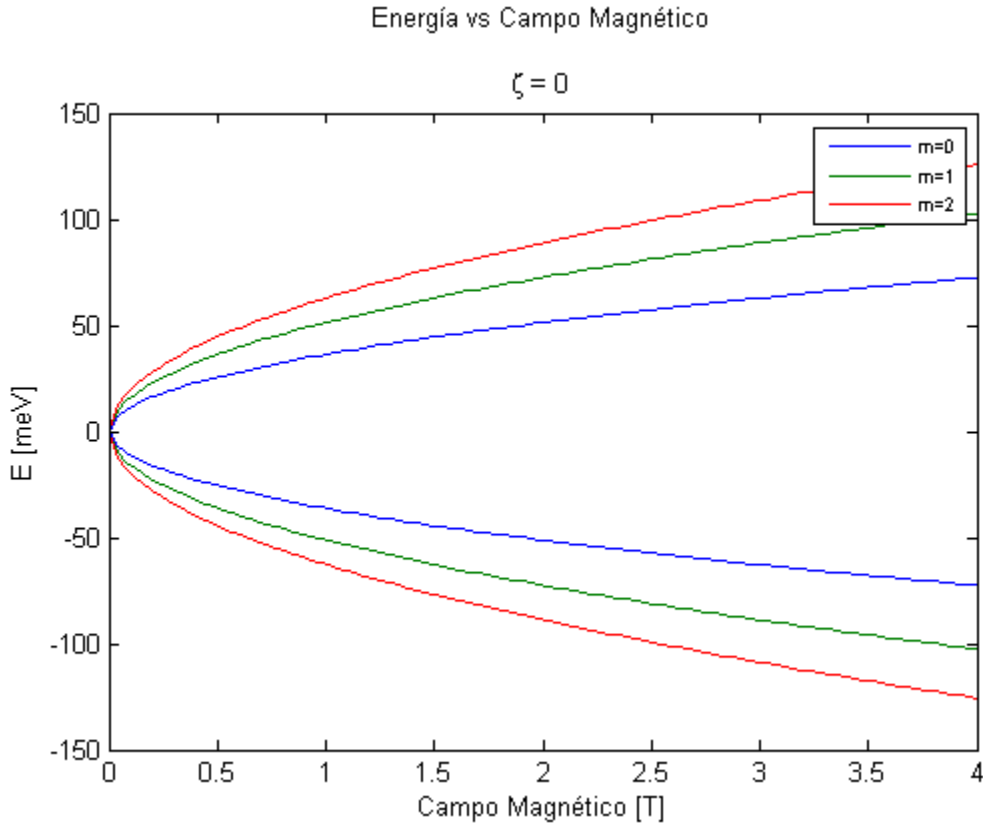


Gráfica 2 Relación de la energía en función de ζ para valores del número cuántico m entre 0 y 2 y un campo magnético de $B = 0.5T$ y $B = 2T$.

Al realizar el análisis de las gráficas se observa como los niveles de energía del sistema se ven alterados significativamente al someterlos a campos magnéticos “altos”, por lo que se concluye que el estado base y los estados excitados al pasar de un campo magnético de $0.5T$ a $2T$ doblan su valor energético, mientras la relación funcional se mantiene.

5.5.3 Niveles de energía sin presencia de flujo tipo Aharonov-Bohm

En el caso particular que el sistema no presente un flujo tipo Aharonov-Bohm se tiene que el comportamiento de los niveles de energía en función del campo magnético es de la forma



Gráfica 3 Niveles de energía en función del campo magnético para cuando el sistema no exhibe un flujo del tipo Aharonov-Bohm.

Se resalta que los niveles de energía del sistema sin presencia del flujo Aharonov-Bohm son ligeramente inferiores a los que se presentan en la sección anterior con $\zeta = 0.5$ y $\zeta = 2$, por lo que el término es significativo en los valores del espectro energético del punto cuántico de grafeno y altera tanto el estado base como los estados excitados.

5.6 Análisis de los resultados

A continuación se presentan los análisis de los resultados desarrollados en la reproducción del artículo *“Enhancing the energy spectrum of graphene quantum dot with external magnetic and Aharonov-Bohm flux fields”* [1] y las variaciones que se plantean en cada sección con el fin de complementar el estudio

- Los niveles de energía determinados para las componentes del spinor χ_A y χ_B en la sección 5.2.3 coinciden exactamente con los reportados en el artículo [1] cuando $n = 0$ y $\hbar = 1$

$$E_m = \frac{v_f}{l_B} \sqrt{2(m + \zeta + 1)} \quad (202)$$

- Cuando n es distinto de cero ($n \neq 0$) se tiene que los niveles de energía determinados finalizando la sección 5.2.3 incluyen la dependencia con el número cuántico magnético m y el número cuántico principal n , que en este caso se asocia con el orden de la serie solución para la función de onda.

$$E_{mn} = \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(m + n + \zeta + 1)} \quad (184)$$

Al analizar la ecuación (184) se observa una restricción en el número cuántico magnético m dado que los términos dentro de la raíz no pueden ser negativos, de forma que

$$m + n + \zeta + 1 > 0 \rightarrow m > -(n + \zeta + 1); \text{ con } n > 0 \text{ y } \zeta > 0 \quad (203)$$

Por lo que m no puede tomar todos los números enteros \mathbb{Z} sino ciertos valores enteros que cumplan la condición (203). En el caso que $n = 0$ los valores permitidos del número cuántico magnético dependen del valor de la relación flujo Aharonov-Bohm – Fluxón

- Si se considera un sistema de punto cuántico en presencia de flujo Aharonov-Bohm $E_{m\zeta}$ y otro sin presencia de esta contribución E_m se encuentra que la relación entre los niveles de energía es

$$\frac{E_{m\zeta}}{E_m} = \frac{\frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(m + \zeta + 1)}}{\frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(m + 1 + n)}} \quad (204)$$

Simplificando la expresión y expresando la energía $E_{m\zeta}$ en función de E_m se tiene que

$$E_{m\zeta} = \sqrt{1 + \frac{\zeta}{m + 1}} E_m \quad (205)$$

Lo que corrobora que los niveles de energía de sistemas en presencia del flujo Aharonov-Bohm son ligeramente mayores a los que no poseen esta contribución, aspecto que se evidencio de forma gráfica en la sección anterior.

- La variación entre los niveles de energía que se genera al incluir el término de flujo Aharonov-Bohm demuestra su importancia en materiales semiconductores al favorecer espectros energéticos con un aumento global en su valor.
- Los niveles de energía hallados en presencia del flujo Aharonov-Bohm y sin considerar su aporte en el vector potencial magnético, presentan similitudes y diferencias a los que se reporta en la literatura como los niveles de energía de Landau, niveles que presentan la siguiente forma

$$E_n = \pm \frac{\hbar c}{l_B} \sqrt{2n} \quad (34)$$

- En el caso de un punto cuántico de grafeno se tiene que las partículas en un medio material no pueden adquirir velocidades cercanas o iguales a la de la

luz, por lo que se encuentra la primera diferencia entre los niveles de Landau reportados en la literatura y los determinados para el sistema de estudio. El cambio que se realiza es la velocidad de la luz c que se sustituye por la velocidad de Fermi v_f del grafeno, que tiene un orden de $10^6 m/s$ [1] [39].

- Cuando el sistema se encuentra bajo la influencia del flujo Aharonov-Bohm: se tiene que los niveles de energía comparados con los de Landau están alterados en un factor $n' = (n + m + \zeta + 1)$ y en el caso que $n \rightarrow 0$ el factor se altera en $n' = (m + \zeta + 1)$.
 - Cuando el sistema no presenta el término de flujo Aharonov-Bohm, se tiene que los niveles de energía comparados con los de Landau se encuentran alterados en un factor $n' = (n + m + 1)$ y en el caso que $n \rightarrow 0$ en un factor $n' = (m + 1)$.
 - Los argumentos anteriores demuestran que los niveles de Landau y los niveles de energía del punto cuántico de grafeno, en las diferentes variantes estudiadas en el capítulo, presentan similitudes en su forma matemática y fenomenológica, por lo que es posible considerar que los niveles de energía hallados son una adecuación de los niveles de Landau al sistema.
- En el caso de la solución aproximada por el método WKB se tiene como particularidad que los niveles de energía dependen del tamaño del punto cuántico, relación que no es evidente en el desarrollo del sistema por el Método Fórmula. Los niveles de energía discrepan con los reportados en el artículo [1] pero contrastan con la información reportada en la literatura [39] [13], donde se recalca que las propiedades ópticas del punto cuántico de grafeno dependen de las dimensiones. Para fines académicos de la tesis, que los niveles de energía dependen del tamaño del punto cuántico es un punto a favor del método WKB, que permite de forma matemática y explícita observar la dependencia en los espectros energéticos y su tamaño.
 - Al resolver el sistema por el método WKB se observa una diferencia entre los niveles de energía para las componentes del spinor χ_A y χ_B , este suceso se sustenta en que el método es una aproximación y se fundamenta en la mecánica clásica, por tanto los fenómenos cuánticos de acoplamiento de la componente radial no son tan fuertes, lo que ocasiona la diferencia entre los niveles de energía.
 - El método específico del grafeno descrito por Jian Ru [13] no presente mayor exactitud en comparación con los dos métodos aplicados anteriormente; aun así conserva similitud con los niveles registrados por el método fórmula y por el método WKB. La discrepancia que se genera en los niveles de energía al aplicar el método se pueden justificar en la falta de estudios y análisis de las soluciones asintóticas por métodos de la función de Green, aspecto que superan el alcance de la tesis, pero que para posteriores estudios puede ser un aporte relevante.

6. Análisis teórico de un punto cuántico de grafeno sometido a una diferencia de potencial V_0

En la presente sección se realiza el análisis teórico para un sistema de punto cuántico de grafeno que es sometido a una diferencia de potencial V_0 . Se emplea el método fórmula para determinar las funciones de onda de las componentes radiales del spinor y el espectro energético propio del sistema.

6.1 Definición de las variables

Considerando una barrera de potencial $V(r)$ definida como

$$V(r) = V = \begin{cases} eV_0 & \text{para } 0 < r < R \\ \infty & \text{para otro caso} \end{cases} \quad (206)$$

La ecuación de Dirac-Weyl para el grafeno en la región $0 < r < R$ es

$$\hat{H} = v_f(\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{r\varphi} + \tau eV_0\sigma_z \quad (207)$$

El termino τ define el punto de Dirac en el que se encuentra el sistema, tomando el valor de -1 para el punto de Dirac k' y de 1 para el punto de Dirac k . El acople que se genera entre el potencial constante V_0 y la matriz de Pauli σ_z induce un gap en la estructura de bandas del grafeno, que puede ser controlado vía potencial externo suministrado; además se genera un campo eléctrico radial que da origen a la línea equipotencial en la que se encuentra el punto cuántico a un valor V_0 .

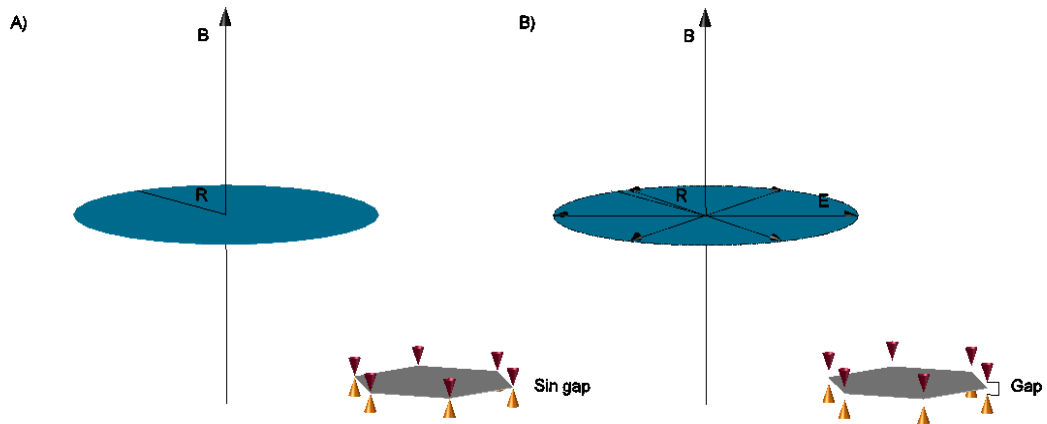


Figura 2 Modelo del punto cuántico de grafeno. A) se presenta el modelo del punto cuántico de grafeno de radio R sin presencia de una diferencia de potencial externo constante, en la esquina inferior se observa la estructura de bandas del grafeno sin gap. B) se presenta el modelo del punto cuántico de grafeno al someterlo a una diferencia de potencial constante V_0 que origina un campo eléctrico radial, en la esquina inferior se observa la estructura de bandas del grafeno con el gap inducido por la diferencia de potencial.

En la región $r > R$ se consigue el confinamiento de los portadores de carga en el plano $x - y$ al considerar $V(r)$ como una barrera de potencial infinita por fuera del punto cuántico de grafeno, mientras que la velocidad de los portadores de carga que participan en la conducción es la velocidad de fermi [18] que es 300 menor a la de la luz $v_f = 10^6 \text{ m/s}$.

El objetivo es analizar el comportamiento de los niveles de energía al considerar la región donde existe un potencial finito, por lo se requiere determinar si al considerar una diferencia de potencial eléctrico constante V_0 se modifica el gauge para $\hat{\mathbf{A}}$, que inicialmente es $\hat{\mathbf{A}}' = \left(\frac{Br}{2} + \frac{\phi_{AB}}{2\pi r}\right) \hat{\phi}$, para ello se retoma la ecuación (51) con $V = 0$ y $\beta = V_0$ y el escalar λ del gauges se halla resolviendo la ecuación diferencial (58)

$$V_0 = -\frac{d\lambda}{dt} \rightarrow \lambda = -V_0 t + C \rightarrow \lambda = -V_0 t; t = 0 \rightarrow \lambda(0) = 0 \quad (208)$$

La condición inicial se extrae del problema al considerar que el punto cuántico no está sometido a una diferencia de potencial en un tiempo $t = 0$. Para determinar el α se emplea la ecuación (54)

$$\alpha = \nabla\lambda = \frac{\partial}{\partial r}(-V_0 t)\hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}(-V_0 t)\hat{\phi} + \frac{\partial}{\partial z}(-V_0 t)\hat{z} = \mathbf{0} \quad (209)$$

Con las variables λ y α que cumplen la teoría gauges se determinan el potencial eléctrico del sistema y el vector potencial

$$\hat{\mathbf{A}} = \left(\frac{Br}{2} + \frac{\phi_{AB}}{2\pi r}\right) \hat{\phi} \quad V = V_0 \quad (210)$$

Como se observa el gauge para $\hat{\mathbf{A}}$ no se modifica si se suministra una diferencia de potencial V_0 constante al sistema, por lo que se mantiene el vector potencial magnético descrita en el capítulo anterior.

6.2 Desarrollo del hamiltoniano de Dirac-Weyl para un punto cuántico sometido a una diferencia de potencial V_0

En la región $0 < r < R$ el hamiltoniano de Dirac-Weyl es

$$\hat{H} = v_f(\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{r\varphi} + \tau e V_0 \sigma_z \quad (211)$$

Reemplazando el operador momentum en coordenadas cilíndricas, el operador vector potencial, el operador vector de las matrices de Pauli y simplificando, se tiene

$$\hat{H} = v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \sigma_r + \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \sigma_\varphi \right) + \tau e V_0 \sigma_z \quad (212)$$

Aplicando la función de onda al hamiltoniano para hallar los valores propios de \hat{H}

$$\hat{H}\Psi = \left(v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \sigma_r + \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \sigma_\varphi \right) + \tau eV_0 \sigma_z \right) \Psi = E\Psi \quad (213)$$

Operando las matrices de Pauli σ_r y σ_φ con la función de onda Ψ , de forma análoga a lo descrito en el capítulo anterior y agrupando se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} 1) v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} (ie^{im\varphi} \chi_B(r)) + i \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) (-ie^{im\varphi} \chi_B(r)) \right) \\ + \tau eV_0 (e^{im\varphi} \chi_A(r)) = E e^{im\varphi} \chi_A(r) \\ 2) v_f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} (e^{i(m+1)\varphi} \chi_A(r)) + i \left(-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) (e^{i(m+1)\varphi} \chi_A(r)) \right) \\ - \tau eV_0 (ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r)) = E ie^{i(m+1)\varphi} \chi_B(r) \end{aligned} \quad (214)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones 1) (214): se operan las derivadas, se agrupan los términos y se divide a ambos lados por el término $e^{im\varphi}$

$$v_f \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\hbar \frac{m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) = (E - \tau eV_0) \chi_A(r) \quad (215)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones 2) (214): se operan las derivadas, se agrupan los términos y se divide a ambos lados por el término $ie^{i(m+1)\varphi}$

$$v_f \left(-\hbar \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} + \left(\hbar \frac{(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_A(r) \right) = (E + \tau eV_0) \chi_B(r) \quad (216)$$

De esta forma el sistema de ecuaciones de Weyl acopladas por la componente radial son

$$\begin{aligned} 1) v_f \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\hbar \frac{m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) = (E - \tau eV_0) \chi_A(r) \\ 2) v_f \left(-\hbar \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} + \left(\hbar \frac{(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_A(r) \right) = (E + \tau eV_0) \chi_B(r) \end{aligned} \quad (217)$$

6.2.1 Forma de las componentes radiales desacopladas

El problema de resolver la componente radial se reduce a desacoplar las ecuaciones de Weyl (217). Despejando de la primera ecuación (217) χ_A se tiene

$$\frac{v_f}{E - \tau eV_0} \left(\hbar \frac{\partial \chi_B}{\partial r} + \left(\hbar \frac{m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) = \chi_A(r) \quad (218)$$

Reemplazando en la segunda ecuación de Weyl acoplada (217), agrupando y simplificando se tiene que

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial r} \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\hbar \frac{m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) + \left(\hbar \frac{(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \left(\hbar \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\hbar \frac{m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) = \frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{v_f^2} \chi_B(r) \quad (219)$$

Analizando los términos por separado

i) **El primer término de la izquierda (219):** operando el factor $-\hbar \frac{\partial}{\partial r}$ y agrupando

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \hbar \frac{\partial}{\partial r} \left(\left(\hbar \frac{m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \right) \quad (220)$$

El segundo término se opera como la derivada de un producto

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \hbar \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \hbar \left(-\frac{\hbar m}{r^2} + \frac{eB}{2} - \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r^2} \right) \chi_B(r) \quad (221)$$

ii) **El segundo término de la izquierda (219):** realizando el producto de los dos factores y agrupando

$$\hbar \left(\hbar \frac{(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\hbar \frac{(m+1)}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \left(\hbar \frac{m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \chi_B(r) \quad (222)$$

Operando los factores y simplificando se llega a

$$\hbar \left(\frac{\hbar m}{r} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi r} \right) \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} + \left(\frac{\hbar^2 m(m+1)}{r^2} + \frac{\hbar(2m+1)eB}{2} + \frac{\hbar(2m+1)e\phi_{AB}}{2\pi r^2} + \frac{e^2 B^2 r^2}{4} + \frac{e^2 B \phi_{AB}}{2\pi} + \frac{e^2 \phi_{AB}^2}{4\pi^2 r^2} \right) \chi_B(r) \quad (223)$$

Retomando la ecuación en conjunto, cancelando los términos de primera derivada que son iguales, dividiendo a ambos lados por $-\hbar^2$ y agrupando los términos con $\chi_B(r)$

$$\frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \left(\frac{m(m+2)}{r^2} + \frac{meB}{\hbar} + \frac{(m+1)e\phi_{AB}}{\pi \hbar r^2} + \frac{e^2 B^2 r^2}{4\hbar^2} + \frac{e^2 B \phi_{AB}}{2\pi \hbar^2} + \frac{e^2 \phi_{AB}^2}{4\pi^2 \hbar^2 r^2} \right) \chi_B(r) = -\frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{\hbar^2 v_f^2} \chi_B(r) \quad (224)$$

Empleando las definiciones de longitud magnética $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$, de fluxón $\phi_0 = e/h$, relación flujo Aharonov-Bohm y fluxón como $\zeta = \phi_{AB}/\phi_0$ y reemplazando, se tiene que

$$\frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \left(\frac{m(m+2)}{r^2} + \frac{m}{l_B^2} + \frac{2(m+1)\zeta}{r^2} + \frac{r^2}{4l_B^4} + \frac{\zeta}{l_B^2} + \frac{\zeta^2}{r^2} \right) \chi_B(r) = -\frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{\hbar^2 v_f^2} \chi_B(r) \quad (225)$$

Agrupando términos

$$\frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \left(\frac{m(m+2) + 2(m+1)\zeta + \zeta^2}{r^2} + \frac{m+\zeta}{l_B^2} + \frac{r^2}{4l_B^4} \right) \chi_B(r) = -\frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{\hbar^2 v_f^2} \chi_B(r) \quad (226)$$

Analizando el termino de $1/r^2$

$$\frac{m(m+2) + 2(m+1)\zeta + \zeta^2}{r^2} = \frac{1}{r^2}(m(m+2) + 2(m+1)\zeta + \zeta^2) = \frac{1}{r^2}((m+\zeta+1)^2 - 1) \quad (227)$$

Reemplazando y agrupando los términos con $\chi_B(r)$

$$\frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \left(\frac{(m+\zeta+1)^2 - 1}{r^2} + \frac{m+\zeta}{l_B^2} + \frac{r^2}{4l_B^4} - \frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{\hbar^2 v_f^2} \right) \chi_B(r) = 0 \quad (228)$$

De forma análoga se halla la ecuación para $\chi_A(r)$

$$\frac{\partial^2 \chi_A}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} - \left(\frac{(m+\zeta)^2 - 1}{r^2} + \frac{m+\zeta+1}{l_b^2} + \frac{r^2}{4l_B^4} - \frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{v_f^2 \hbar^2} \right) \chi_A(r) = 0 \quad (229)$$

Las ecuaciones anteriores corresponden a las ecuaciones tipo Schrödinger para las componentes radiales $\chi_A(r)$ (229) y $\chi_B(r)$ (228)

6.2.2 Solución de la componente radial de Ψ empleando el método fórmula: función de onda y niveles de energía.

Las ecuaciones tipo Schrödinger para la componente radia de Ψ son

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \left(\frac{(m+\zeta+1)^2 - 1}{r^2} + \frac{m+\zeta}{l_B^2} + \frac{r^2}{4l_B^4} - \frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{\hbar^2 v_f^2} \right) \chi_B(r) = 0 \\ 2) \quad & \frac{\partial^2 \chi_A}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_A(r)}{\partial r} - \left(\frac{(m+\zeta)^2 - 1}{r^2} + \frac{m+\zeta+1}{l_b^2} + \frac{r^2}{4l_B^4} - \frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{\hbar^2 v_f^2} \right) \chi_A(r) = 0 \end{aligned} \quad (230)$$

Para solucionar las ecuaciones de tipo Schrödinger de $\chi_B(r)$ y $\chi_A(r)$ se requiere identificar el cambio de variable adecuado para transformar $r \rightarrow s$. Factorizando de la primera ecuación el factor $1/r^2$ en los términos que no tienen derivada, se tiene que

$$\frac{\partial^2 \chi_B(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_B(r)}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \left(\frac{r^4}{4l_B^4} + r^2 \left(\frac{m+\zeta}{l_B^2} - \frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{\hbar^2 v_f^2} \right) + (m+\zeta+1)^2 - 1 \right) \chi_B(r) = 0 \quad (231)$$

Se considera el cambio $\chi_B(s) = \chi_B(r)$ del tipo (107) con $s = r^2$, por lo que se emplean las relaciones para primera y segunda derivada descritas en (93) y (94). Reemplazando el cambio de variable, las nuevas derivadas con respecto a s y simplificando se tiene que

$$\frac{\partial^2 \chi_B(s)}{\partial s^2} + \frac{1}{s^2} \left(s^2 \left(-\frac{1}{16l_B^4} \right) + s \left(\frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{4\hbar^2 v_f^2} - \frac{m+\zeta}{4l_B^2} \right) - \frac{(m+\zeta+1)^2 - 1}{4} \right) \chi_B(s) = 0 \quad (232)$$

De forma análoga se halla la ecuación trasformada para $\chi_A(r)$

$$\frac{\partial^2 \chi_A(s)}{\partial s^2} + \frac{1}{s^2} \left(s^2 \left(-\frac{1}{16l_B^4} \right) + s \left(\frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{4v_f^2 \hbar^2} - \frac{m+\zeta+1}{4l_b^2} \right) - \frac{(m+\zeta)^2 - 1}{4} \right) \chi_A(s) = 0 \quad (233)$$

- **Caso de $\chi_A(s)$**

Comparando la ecuación (233) con la ecuación del método fórmula (74), se tiene que

$$k_1 = 0; k_2 = 0; k_3 = 0; A = -\frac{1}{16l_B^4}; B = \frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{4v_f^2 \hbar^2} - \frac{m + \zeta + 1}{4l_b^2}; C = -\frac{(m + \zeta)^2 - 1}{4} \quad (234)$$

Hallando las constantes k_4 y k_5 con la ecuación (78) y (79)

$$k_{4+} = \frac{1 + \sqrt{1 - 4 \left(-\frac{(m + \zeta)^2 - 1}{4} \right)}}{2} = \frac{1 + \sqrt{1 + (m + \zeta)^2 - 1}}{2} = \frac{m + \zeta + 1}{2} \quad (235)$$

$$k_{5\pm} = \sqrt{-\left(-\frac{1}{16l_B^4} \right)} = \pm \frac{1}{4l_B^2}$$

La función de onda para $\chi_A(s)$ es

$$\chi_A(s) = N_n s^{\frac{m+\zeta+1}{2}} e^{\mp \frac{1}{4l_B^2} s} F_1 \left(-n; m + \zeta + 1; \pm \frac{1}{2l_B^2} s \right); s = r^2 \quad (236)$$

$$\chi_A(r) = N_n r^{m+\zeta+1} e^{\mp \frac{1}{4l_B^2} r^2} F_1 \left(-n; m + \zeta + 1; \pm \frac{1}{2l_B^2} r^2 \right)$$

Los niveles de energía para $\chi_A(r)$ se hallan con la ecuación (80)

$$\left[\frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2) - \frac{m + \zeta + 1}{4l_b^2}}{2 \left(\frac{m + \zeta + 1}{2} \right) + 2n} \right]^2 - \left(\frac{1}{4l_B^2} \right)^2 \rightarrow E_{m,n} = \pm \sqrt{\frac{2v_f^2 \hbar^2 (m + \zeta + 1 + n)}{l_B^2} + \tau^2 e^2 V_0^2} \quad (237)$$

- **Caso de χ_B**

Comparando la ecuación (232) con la ecuación del método fórmula (74), se tiene que

$$k_1 = 0; k_2 = 0; k_3 = 0; A = -\frac{1}{16l_B^4}; B = \frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2)}{4\hbar^2 v_f^2} - \frac{m + \zeta}{4l_B^2}; C = -\frac{(m + \zeta + 1)^2 - 1}{4} \quad (238)$$

Hallando las constantes k_4 y k_5 la ecuación (78) y (79) para cuando $k_3 = 0$

$$k_{4+} = \frac{1 + \sqrt{1 - 4 \left(-\frac{(m + \zeta + 1)^2 - 1}{4} \right)}}{2} = \frac{1 + \sqrt{1 + (m + \zeta + 1)^2 - 1}}{2} = \frac{m + \zeta + 2}{2}; \quad (239)$$

$$k_{5\pm} = \sqrt{-\left(-\frac{1}{16l_B^4} \right)} = \pm \frac{1}{4l_B^2}$$

La función de onda $\chi_B(s)$ es

$$\chi_B(s) = N_n s^{\frac{m+\zeta+2}{2}} e^{\mp \frac{1}{4l_B^2} s} F_1 \left(-n; m + \zeta + 2; \pm \frac{1}{2l_B^2} s \right); s = r^2 \quad (240)$$

$$\chi_B(r) = N_n r^{m+\zeta+2} e^{\mp \frac{1}{4l_B^2} r^2} F_1 \left(-n; m + \zeta + 2; \pm \frac{1}{2l_B^2} r^2 \right)$$

Los niveles de energía para $\chi_B(r)$ se hallan con la ecuación (80)

$$\left[\frac{(E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2) - \frac{m + \zeta}{4l_B^2}}{4\hbar^2 v_f^2} - \left(\frac{1}{4l_B^2} \right)^2 \right] - \frac{2v_f^2 \hbar^2 (m + \zeta + 1 + n)}{l_B^2} + \tau^2 e^2 V_0^2 = 0 \rightarrow E_{m,n} = \pm \sqrt{\frac{2v_f^2 \hbar^2 (m + \zeta + 1 + n)}{l_B^2} + \tau^2 e^2 V_0^2} \quad (241)$$

6.3 Función de onda solución para un punto cuántico sometido a una diferencia de potencial V_0

La función de onda solución Ψ para un punto cuántico de grafeno sometido a una diferencia de potencial V_0 , tiene la forma descrita en (151) con los respectivos $\chi_A(r)$ y $\chi_B(r)$ hallados anteriormente.

$$\Psi = \begin{pmatrix} N_n r^{m+\zeta+1} e^{im\varphi \mp \frac{1}{4l_B^2} r^2} F_1 \left(-n; m + \zeta + 1; \pm \frac{1}{2l_B^2} r^2 \right) \\ N_n i r^{m+\zeta+2} e^{i(m+1)\varphi \mp \frac{1}{4l_B^2} r^2} F_1 \left(-n; m + \zeta + 2; \pm \frac{1}{2l_B^2} r^2 \right) \end{pmatrix} \quad (242)$$

Y los niveles de energía para el sistema de estudio son

$$E_{m,n} = \pm \sqrt{\frac{2v_f^2 \hbar^2 (m + \zeta + 1 + n)}{l_B^2} + \tau^2 e^2 V_0^2} \quad (243)$$

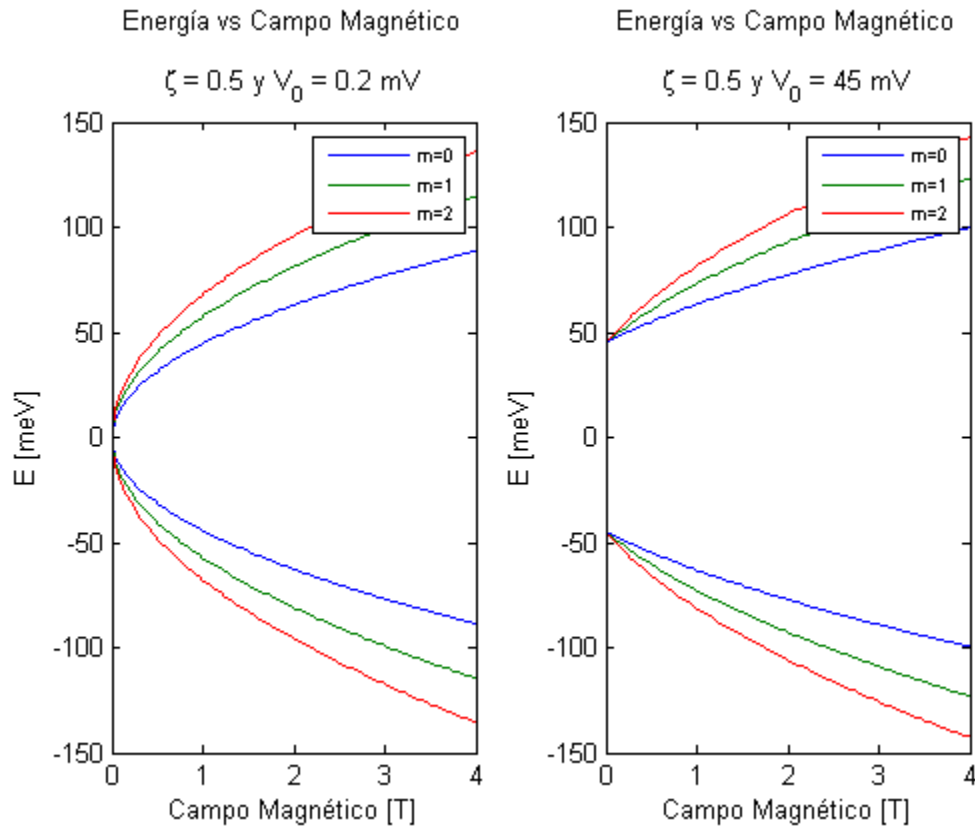
Los niveles de energía de $\chi_A(r)$ y $\chi_B(r)$ coinciden, lo que demuestra que el sistema se encuentra acoplado por las componente radiales y que el sistema físico se puede describir de forma completa por los niveles de energía del punto cuántico en el grafeno.

6.4 Gráficas y análisis de los niveles de energía en función del número cuántico magnético m

En la presente sección del capítulo se realizan las gráficas de los niveles de energía. Se considera la dependencia solo del número cuántico magnético m , por lo que se hace $n = 0$.

6.4.1 Niveles de energía en función del campo magnético: $E_m = f(B)$

Para la realización de la gráfica se considera: una relación entre flujo tipo Aharonov-Bohm y fluxón de $\zeta = 0.5$, un $\tau = 1$ por lo que se encuentra en el punto de Dirac k y se varía el campo magnético B entre $0T$ y $4T$

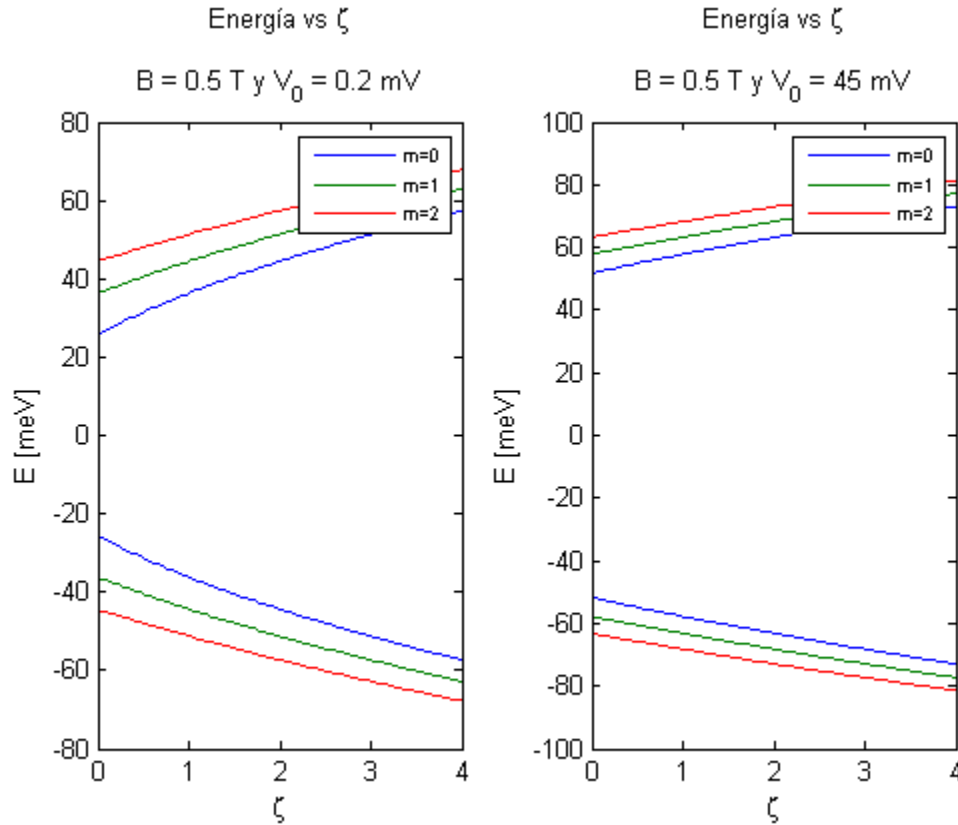


Gráfica 4 Relación de la energía en función del campo magnético para valores del número cuántico magnético m entre 0 y 2, una relación de flujo Aharonov-Bohm y flujo de $\zeta = 0.5$ a una diferencia de potencial de $V_0 = 0.2 \text{ mV}$ y $V_0 = 45 \text{ mV}$

Al realizar el análisis de las gráficas se observa que la contribución de diferencias de potencial del orden de 0.2 mV es casi nula para los niveles de energía del sistema, por lo que el término $\tau^2 V_0^2$ aporta $4 * 10^{-8} (\text{meV})^2$ que en comparación con el aporte aproximado del primer término $2v_f^2 \hbar^2 (m + \zeta + 1) eB / \hbar$ de $1.9754 * 10^{-3} B$, $3.2923 * 10^{-3} B$ y $4.6094 * 10^{-3} B$ para los primeros tres estados y a un $\zeta = 0.5$. Esta diferencia entre los términos de los niveles de energía produce que gráficamente no sea apreciable la contribución de diferencias de potencial “pequeños” y que los resultados obtenidos sean similares a los desarrollados en la Gráfica 1 del capítulo anterior. Lo contrario ocurre cuando se suministra una diferencia de potencial de 45 mV , con lo que se alcanza una contribución del término $\tau^2 V_0^2$ de $2.025 * 10^{-3} (\text{meV})^2$ aporte que es significativo para los niveles de energía y que se corrobora en su respectiva gráfica, donde los estados del sistema a un campo $B = 0$ se ven alterados energéticamente y alcanzan un valor inicial de 45 meV . Para campos magnéticos mayores a cero, se observa una contribución del potencial eléctrico suministrado pero que se atenúa debido a la influencia del campo. Se resalta que la presencia del potencial V_0 induce un gap al sistema, que varía según el potencial externo suministrado, aspecto que se corrobora gráficamente y que es más notorio para el voltaje de 45 mV .

6.4.2 Niveles de energía en función de la relación de flujo: $E_m = f(\zeta)$

Para la realización de la gráfica se considera: un campo magnético de $B = 0.5 T$, un $\tau = 1$ por lo que se encuentra en el punto de Dirac k y se varia la relación de flujo Aharonov-Bohm y fluxón entre $0 < \zeta < 4$

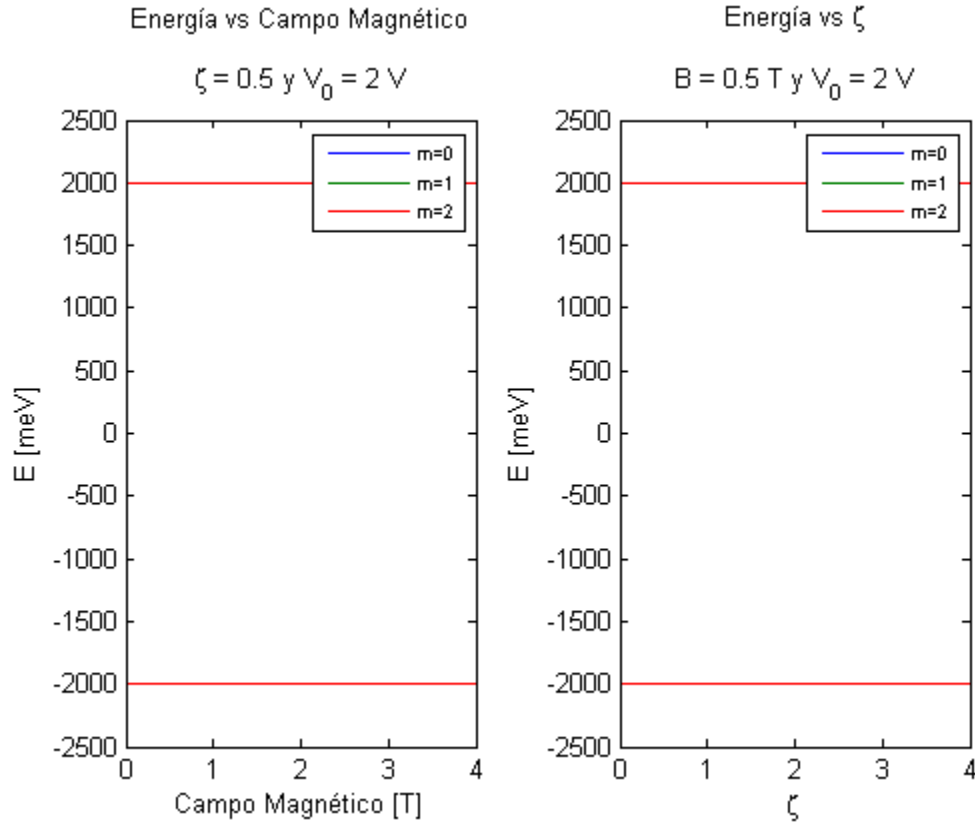


Gráfica 5 Relación de la energía en función de ζ para valores del número cuántico magnético m entre 0 y 2, un campo magnético $B = 0.5 T$ a una diferencia de potencial de $V_0 = 0.2 mV$ y $V_0 = 45 mV$

Al realizar el análisis de la graficas se observa que la contribución de la diferencia de potencial de $V_0 = 0.2 mV$ en los niveles de energía es de $4 * 10^{-8} (meV)^2$, correspondiente al segundo término dentro de la raíz; en comparación con el primer término para los primeros tres estados y a un campo magnético de $B = 0.5 T$ es poco apreciable por lo que se tienen valores aproximados de $6.5847(1 + \zeta) * 10^{-4}$, $6.5847(2 + \zeta) * 10^{-4}$ y $6.5847(3 + \zeta) * 10^{-4}$ respectivamente. Lo anterior se corrobora al observar que el comportamiento de la gráfica para $V_0 = 0.2 mV$ es similar al de la Grafica 2 del capítulo anterior. Mientras que al suministrar un potencial de $V_0 = 45 mV$ la contribución a los niveles de energía es de $2.025 * 10^{-3} (meV)^2$ valor que en orden de magnitud es similar al aporte del primer término, por lo que se observa un incremento global en cada nivele de energía, incluso el comportamiento es aún más notorio para el estado base. Por último, se observa que suministrar una diferencia de potencial de $V_0 = 45 mV$ no solo aumenta globalmente la energía sino que disminuye la separación entre cada nivele de energía, aspecto que se corrobora gráficamente

6.4.3 Niveles de energía cuando la diferencia de potencial al que se somete el punto cuántico aumenta en el orden de voltios

En las siguientes graficas se considera una diferencia de potencial de $V_0 = 2 V$ constante; se analiza el comportamiento del sistema al variar el campo magnético manteniendo constante la relación de flujo magnético (grafica de la derecha) y variando la relación de flujo magnético manteniendo constante el campo magnético (grafica de la izquierda).



Gráfica 6 Comportamiento de las graficas $E = f(B)$ y $E = f(\zeta)$ para un voltaje constante de $V_0 = 2 V$.

El comportamiento de las gráficas $E_m = f(B)$ y $E_m = f(\zeta)$ es similar. Se observa que en los niveles de energía desaparece la relación con el numero cuántico magnético m , por lo que la cuantización no es perceptible, y el sistema tiende a exhibir niveles de energía continuos, con solo dos valores posibles de energía de $-2 eV$ y $2 eV$. La justificación de por qué la cuantización no es evidente en la gráfica es debido a la relación en ordenes de magnitud entre los términos de la raíz del modelo físico, donde la contribución cuántica del sistema se hace “muy pequeña” en comparación con el aporte del potencial eléctrico, de forma que

$$\frac{2v_f^2 \hbar^2 (m + \zeta + 1 + n)}{l_B^2} \ll \tau^2 e^2 V_0^2 \quad (244)$$

Considerando $n = 0$ y reemplazando numéricamente las constantes se tiene que

$$\begin{aligned} 1,3158 * 10^{-3}(m + \zeta + 1)B &\ll 4 \\ 0.0013158(m + \zeta + 1)B &\ll 4 \end{aligned} \quad (245)$$

De esta forma se corrobora que el término $2v_f^2\hbar^2(m + \zeta + 1 + n)/l_B^2$ es “pequeño” en comparación con $\tau^2 e^2 V_0^2$, por lo que los niveles de energía tiendan al valor con mayor peso dentro de la raíz que en este caso es 4. La diferencia “tan grande” entre los dos términos no era tan evidente para potenciales eléctricos del orden de milivoltios, por lo que aun exhibían cuantización en sus niveles de energía.

6.5 Análisis de resultados

A continuación se presentan los análisis de los resultados obtenidos en el presente capítulo

- Los niveles de energía del sistema para las componentes χ_A y χ_B del spinor Ψ coinciden exactamente, por lo que se corrobora que el sistema se encuentra acoplado y la información que se puede extraer de este observable no varía sin importar cual componente se desee estudiar.
- Al analizar el espectro energético del grafeno en presencia de una diferencia de potencial V_0 constante (243) se observa que el número cuántico magnético m solo puede tomar ciertos valores, tales que

$$\frac{2v_f^2\hbar^2(m + \zeta + n + 1)}{l_B^2} + \tau^2 e^2 V_0^2 \geq 0 \rightarrow m \geq - \left(\left(\frac{l_B^2}{2v_f^2\hbar^2} \right) \tau^2 e^2 V_0^2 + \zeta + n + 1 \right) \quad (246)$$

Por lo que m no puede tomar todos los numero enteros \mathbb{Z} sino ciertos valores que cumplan con la condición (246). En el caso que $n = 0$ la restricción para el número cuántico magnético depende solamente del potencial externo suministrado, el campo magnético y del valor de la relación flujo Aharonov-Bohm – fluxón.

- Si se considera que el potencial suministrado al punto cuántico es cero $V_0 = 0$

$$E_{m,n} = \sqrt{\frac{2v_f^2\hbar^2(m + \zeta + 1 + n)}{l_B^2} + \tau^2 e^2 V_0^2}; \text{ si } V_0 = 0 \therefore E_{m,n} = \frac{v_f\hbar}{l_B} \sqrt{2(m + \zeta + 1 + n)} \quad (184)$$

Se recuperan los valores de energía reportados, y demostrados en la tesis, para un punto cuántico de grafeno que no está sometido a ningún tipo de potencial.

- Al comparar los valores de energía hallados en este capítulo con los reportados en el **Capítulo 5**, se tiene que la presencia de un potencial constantes en el hamiltoniano de Dirac-Weyl genera un estado base más energético, tal que

$$n = 0 \text{ y } m = 0 \rightarrow \text{Estado base} \quad (247)$$

$$E_{0,0} = \sqrt{\frac{2v_f^2 \hbar^2 (\zeta + 1)}{l_B^2} + \tau^2 e^2 V_0^2} = \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(\zeta + 1) + \frac{\tau^2 e^2 l_B^2 V_0^2}{v_f^2 \hbar^2}} \left\{ \begin{array}{l} \text{Punto cuántico} \\ \text{somético a un} \\ \text{potencial } V_0 \end{array} \right. \quad (248)$$

$$E_{0,0} = \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(\zeta + 1)} \left\{ \begin{array}{l} \text{Punto cuántico sin} \\ \text{presencia de potencial} \end{array} \right.$$

El desfase entre los niveles de energía de ambos modelos está dado por el término

$$\frac{\tau^2 e^2 l_B^2 V_0^2}{v_f^2 \hbar^2} \quad (249)$$

Por lo que se concluye que el nivel de energía base y en general los niveles excitados presentan un aumento global en la energía, aspecto que es más notorio en el estado base, al suministrar una diferencia de potencial al sistema.

- Al comparar los niveles de energía del sistema sometido a una diferencia de potencial V_0 con los niveles de energía de Landau (34), se tiene que

$$E_{m,0} = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(m + \zeta + 1) + \frac{\tau^2 e^2 l_B^2 V_0^2}{v_f^2 \hbar^2}} = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2 \left[(m + \zeta + 1) + \frac{1}{2} \left(\frac{\tau l_B e V_0}{v_f \hbar} \right)^2 \right]} \quad (250)$$

La primera diferencia, igual que en el **Capítulo 5**, es el término de la velocidad que en el caso del punto cuántico de grafeno toma un valor del orden de 10^6 m/s. La segunda diferencia esta relacionada con su estructura dentro de la raíz, donde se observa de forma evidente que existe un corrimiento en cada nivel de energía, constituido por el aporte de la diferencia de potencial eléctrico y la relación flujo Aharonov-Bohm - fluxón, es posible manipular algebraicamente los niveles de energía del modelo de forma que $n' = (m + \zeta + 1) + \frac{1}{2} \left(\frac{\tau l_B e V_0}{v_f \hbar} \right)^2$ y así ambas ecuaciones coincidan en estructura. En general, el modelo exhibe niveles de energía de Landau con algunas adaptaciones debido al aporte energético que proviene de la diferencia de potencial eléctrico y de la relación de flujo ζ , variables físicas propias del problema que se deseaba estudiar y del grafeno.

- En el caso que se suministre una diferencia de potencial eléctrico de $2V$ se observa que la energía del sistema cambia de valores discretos con dependencia del número cuántico magnético m a valores continuos con $E = -2eV$ y $E = 2eV$, lo anterior tiene sustento en que el porte del término $2v_f^2 \hbar^2 (m + \zeta + 1)/l_B^2$ es “muy pequeño” en comparación con $\tau^2 e^2 V_0^2$. Un caso interesante de análisis es determinar el valor aproximado del voltaje suministrado al punto cuántico que no anula los efectos cuánticos, para ello se considera que los términos dentro de la raíz de la energía deben de ser en orden de magnitud aproximadamente iguales de tal forma que ninguno de los dos prime sobre el otro, por lo que

$$\frac{2v_f^2 \hbar^2 (m + n + \zeta + 1)}{l_B^2} \approx \tau^2 e^2 V_0^2 \quad (251)$$

Reemplazando los valores numéricos de las constantes y despejando V_0 , se tiene que

$$V_0 \approx \pm 0,03627 \sqrt{(m+n+\zeta+1)B} \quad (252)$$

Por medio de la expresión anterior se puede calcular el voltaje aproximado que se puede suministrar al punto cuántico y que no elimina los efectos de cuantización energética propios del punto cuántico; para un caso específico de un campo magnético de $B = 1 T$, $\zeta = 1$ y $n = 0$ se tiene que

$$V_0 \approx 36.27 \sqrt{(m+2)} mV \quad (253)$$

Valor que se encuentra en el rango de voltajes que se consideran en las Gráfica 4 y Grafica 5, donde se observa que aún existe influencia del número cuántico magnético m en los niveles de energía. En la Gráfica 6 se supera este valor límite y se observa como los niveles de energía tiendan al continuo.

Por último, dado que se considera una diferencia de potencial constante, voltaje suministrado por medio de una fuente externa, se tiene que la teoría gauges vista en el **Capítulo 3** permite establecer que el campo eléctrico está relacionado con los potenciales de la siguiente forma

$$\mathbf{E} = -\left(\nabla V + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right) \quad (50)$$

El gradiente para una diferencia de potencial constante es cero $\nabla V = 0$ por lo que el término temporal del vector potencial magnético es la única contribución al campo eléctrico. Considerando que $\hat{\phi} = -\text{sen}\phi\hat{i} + \text{cos}\phi\hat{j}$ y las variables $\phi = \phi(t)$ y $r = cts = R$ se tiene que

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\frac{BR}{2} + \frac{\phi_{AB}}{2\pi R} \right) \hat{\phi} \right] = -\left(\frac{BR}{2} + \frac{\phi_{AB}}{2\pi R} \right) \frac{\partial}{\partial t} (-\text{sen}\phi\hat{i} + \text{cos}\phi\hat{j}) \\ \mathbf{E} &= -\left(\frac{BR}{2} + \frac{\phi_{AB}}{2\pi R} \right) (-\text{cos}\phi\hat{i} - \text{sen}\phi\hat{j}) \frac{\partial \phi}{\partial t}; \quad \hat{r} = \text{cos}\phi\hat{i} + \text{sen}\phi\hat{j}; \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} = \dot{\phi} \\ \mathbf{E} &= \left(\frac{BR}{2} + \frac{\phi_{AB}}{2\pi R} \right) \dot{\phi} \hat{r} \end{aligned} \quad (254)$$

Con el fin de expresar el campo eléctrico en función de las variables propias del modelo, se define la frecuencia ciclotrónica del punto cuántico de grafeno ω_c [12] como

$$\omega_c = \frac{v_f}{l_B} \quad (255)$$

De esta forma el campo eléctrico con $\dot{\phi} = \omega_c$ es

$$\mathbf{E} = \frac{v_f}{l_B} \left(\frac{BR}{2} + \frac{\phi_{AB}}{2\pi R} \right) \hat{r} \quad (256)$$

Por lo que se concluye que el campo eléctrico generado en el sistema es de carácter radial (sobre el plano $x - y$), su origen es debido al gauges del vector potencial magnético y a la variación temporal

del ángulo azimutal φ . Para el grafeno se encuentra reportado que la frecuencia ciclotrónica [12] es (257) por lo que el campo eléctrico radial característico del modelo tiene una forma definida y depende de las variables propias del punto cuántico. Se resalta que el acople entre el potencial eléctrico y el vector potencial magnético cumple con lo establecido por la teoría y además mantiene invariante el campo magnético \mathbf{B} , por lo que la elección del gauges para \mathbf{A} y V fue la adecuada.

7. Conclusiones

Durante el desarrollo de la tesis se verifico la fiabilidad del Método Fórmula y se realizó un análisis teórico del hamiltoniano de Dirac-Weyl para un punto cuántico de grafeno en diferentes escenarios, con el objetivo de determinar las variables que alteran los niveles de energía en el modelo. A continuación se mencionan los resultados y variaciones más relevantes en este estudio

- **Hamiltoniano sin flujo tipo Aharonov-Bohm ϕ_{AB} :** al estudiar el sistema sin la presencia del flujo Aharonov-Bohm, se observó cómo los niveles de energía disminuyen en su valor y de igual forma en la diferencia entre cada nivel de energía en comparación con los resultados obtenido con la presencia del flujo ϕ_{AB} , de forma que

$$\Delta E_{\phi_{AB}} > \Delta E \quad (257)$$

- **Hamiltoniano con un término perturbativa V_0 :** al estudiar un sistema de punto cuántico sometido a una diferencia de potencial V_0 : constante se consigue un incremento global en cada nivel de energía asociado al termino $\tau^2 V_0^2 e^2$.
- **Hamiltoniano en presencia del flujo tipo Aharonov-Bohm y sin potencial:** se logran reproducir en su totalidad los cálculos de [1]; se profundiza en los aspectos matemáticos y físicos que produce las soluciones de los niveles de energía al realizar las variaciones de l_B y ζ , observando cómo estas variables alteran los espectros de energía y, además se amplían algunos aspectos que en el artículo [1] se dan por comprendidos.
- **Función de onda del spinor Ψ :** Las funciones de onda del spinor Ψ para los sistemas sin potencial y con potencial V_0 poseen a simple vista una estructura idéntica, descrita por las ecuaciones (183) y (242); aunque un análisis detallado de las constantes k_5 propias de cada sistema, permite expresar las funciones de onda del spinor Ψ en función de la energía, término que no se evidencia en las ecuaciones descritas en el **Capítulo 5** y **Capítulo 6**. Considerando el valor de la constante k_5 , los valores de energía y el sistema cuando $n = 0$, se tiene que

$$k_5 = \frac{1}{4l_B^2} \text{ y } k_5 = \frac{1}{4l_B^2} \quad (258)$$

$$E_{m,n} = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(m+n+\zeta+1)} \quad y \quad E_{m,n} = \pm \sqrt{\frac{2v_f^2 \hbar^2 (m+n+\zeta+1)}{l_B^2} + \tau^2 e^2 V_0^2}$$

Manipulando algebraicamente la expresión y despejando para obtener el término $1/4l_B^2$ de cada sistemas se tiene que

$$\frac{1}{4l_B^2} = k_5 = \frac{E^2}{8v_f^2 \hbar^2 (m+n+\zeta+1)} \quad y \quad \frac{1}{4l_B} = k_5 = \frac{E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2}{8v_f^2 \hbar^2 (m+n+\zeta+1)} \quad (259)$$

Remplazando en las funciones de onda del spinor Ψ

$$\Psi = \begin{pmatrix} N_n r^{m+\zeta+1} e^{im\varphi - \frac{r^2}{4l_B^2}} F_1 \left(-n, m+\zeta+1; \frac{E^2}{4v_f^2 \hbar^2 (m+\zeta+1)} r^2 \right) \\ N_n i r^{m+\zeta+2} e^{i(m+1)\varphi - \frac{r^2}{4l_B^2}} F_1 \left(-n, m+\zeta+2; \frac{E^2}{4v_f^2 \hbar^2 (m+\zeta+1)} r^2 \right) \end{pmatrix} \quad (260)$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} N_n r^{m+\zeta+1} e^{im\varphi - \frac{1}{4l_B^2} r^2} F_1 \left(-n, m+\zeta+1; \frac{E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2}{4v_f^2 \hbar^2 (m+\zeta+1)} r^2 \right) \\ N_n i r^{m+\zeta+2} e^{i(m+1)\varphi - \frac{1}{4l_B^2} r^2} F_1 \left(-n, m+\zeta+2; \frac{E^2 - \tau^2 e^2 V_0^2}{4v_f^2 \hbar^2 (m+\zeta+1)} r^2 \right) \end{pmatrix}$$

Las expresiones anteriores de las funciones de onda de cada sistema permiten observar la dependencia que tiene con la energía y afirmar que en esencia las funciones de onda no son las mismas, y que al igual que los niveles de energía las funciones de onda se ven alteradas en presencia de un potencial eléctrico. En el caso que $V_0 = 0$ se recupera la función de onda del spinor Ψ sin potencial eléctrico.

- **Niveles de energía de los modelos de punto cuántico de grafeno sin potencial y con un potencial V_0 con k_{4-} :** de los ejercicios desarrollados en el **Capítulo 4** con el método fórmula se concluyó que era necesario considerar $k_{4\pm}$ como una raíz, aun así en el **Capítulo 5** y **Capítulo 6** los niveles de energía registrados corresponden solo a la raíz positiva de k_{4+} . Para el caso de k_{4-} se obtienen los siguientes niveles de energéticos

$$\chi_A: E_n = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(n+1)}; \quad \chi_B: E_n = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2n} \quad \leftrightarrow \quad \text{Sin potencial} \quad (261)$$

$$\chi_A: E_n = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2(n+1) + \left(\frac{\tau e V_0 l_B}{v_f \hbar} \right)^2}; \quad \chi_B: E_n = \pm \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{2n + \left(\frac{\tau e V_0 l_B}{v_f \hbar} \right)^2} \quad \leftrightarrow \quad V_0$$

Se observa que los niveles de energía para k_{4-} no coinciden entre componentes spinoriales, un aspecto negativo pues se espera que las componentes del spinor Ψ coincidan al ser

componentes acopladas y que describen un mismo modelo físico; además al comparar los niveles de energía (262) con los niveles de energía (258) se tiene que los niveles de energía para la raíz negativa de k_4_- son un caso particular de las soluciones halladas en los capítulos 5 y 6, debido a estas razones no se contempló la parte negativa de k_4 y se descartó estas soluciones en el desarrollo de la tesis.

- **Niveles de energía:** se observa que la relación de los niveles de energía determinados para los sistemas de estudio involucran una raíz cuadrada, por lo que se obtienen soluciones positivas y negativas de la energía. De forma análoga a lo realizado por Paul Dirac, se concluye que la ecuación de Dirac-Weyl describen fermiones con spin $1/2$ que poseen una orientación de su proyección de spin definida (*spin up o spin down*), es decir, es un conjunto compuesto únicamente de partícula – antipartícula; en el caso de materia condensada es un conjunto de cuasi-partícula y anticuasi-partícula, razón por la cual la solución a la función de onda es un spinor de Weyl y no un bi-spinor como ocurre en la ecuación de Dirac, donde el sistema tiene una solución spinorial para la orientación *spin up* y otra para la orientación *spin down*, cada una para el conjunto partícula – antipartícula.
- **Niveles de Landau:** al relacionar y comparar los niveles de Landau con los niveles de energía de los puntos cuánticos de grafeno en los diferentes escenarios planteados, se concluye que guardan similitud en su estructura matemática e incluso pueden considerarse niveles de Landau modificados por los factores físicos propios del modelo. La similitud se debe a la simetría cilíndrica y el tipo de confinamiento al que se someten los portadores de carga del punto cuántico, factores que generan de forma natural el gauge de Landau dando origen a los niveles de Landau con algunas variaciones en su espectro energético.
- **Límite aproximado del potencial eléctrico:** se determinó que el valor aproximado del potencial eléctrico que no elimina los efectos de cuantización propios del sistema planteado es

$$V_0 \approx \pm 0,03627 \sqrt{(m + n + \zeta + 1)B} \quad (252)$$

Los voltajes que se encuentran en este rango de valores cumplen con que el término del potencial eléctrico no supera los efectos cuánticos debidos a $2v_f^2 \hbar^2 (m + n + \zeta + 1)/l_B^2$, por lo que la discretización de la energía se mantiene y los niveles de energía no tienden al continuo. Un ejemplo es Grafica 6 donde los $2V$ superan el rango mencionado en (252) y se obtiene un espectro energético continuo con valores de energía de $E = \pm 2 eV$.

- **Niveles de energía solucionados por el método fórmula:** se da como aporte al método fórmula el considerar las constantes $k_{4\pm}$ y $k_{5\pm}$ como raíces positivas y negativas, con lo que se logra complementar los resultados obtenidos de los niveles de energía de un oscilador armónico unidimensional, un oscilador armónico esférico y la función de onda de una partícula en un pozo de potencial infinito; mientras que para los modelos de un punto cuántico de grafeno sin presencia de potencial y en presencia de un potencial constante V_0 considerar $k_{4\pm}$ como dos raíces no se hace necesario por lo que los valores para k_{4+} de ambos modelos corresponden a una solución general y los que se obtienen con k_{4-} corresponden a una solución particular que se puede obtener dadas algunas condiciones de la solución general. Se concluye que es necesario darle un sentido físico a las soluciones que se obtienen para cada una de las raíces de las constantes $k_{4\pm}$ y $k_{5\pm}$ con el fin de expresar el espectro energético del modelo de forma completa.
- **Niveles de energía solucionados por el método WKB:** al solucionar el sistema de ecuaciones de Weyl del **Capítulo 5**, se encuentra que los niveles de energía determinados por el método WKB presentan dependencia explícita con el tamaño del punto cuántico, radio R , lo que confirma lo descrito en [39] [13] donde se menciona que las dimensiones del punto cuántico alteran las propiedades ópticas del sistema. Esta relación no se encuentra de forma explícita en los sistemas solucionados por el Método Fórmula, lo que puede ser una falencia del método, aunque se resalta que los valores de energía para cada componente del spinor χ_A y χ_B si coinciden por lo que se corrobora que los sistemas están acoplados, aspecto que no se ve en el método WKB. Si se considera un punto cuántico de grafeno de radio 1 nm , dimensiones realistas dado que es una nanoestructura, se tiene que los niveles de energía del sistema reemplazando las constantes que involucra el radio del punto cuántico solucionado por el método WKB son

$$E_{\chi_A} = \frac{v_f \hbar}{l_B} \sqrt{(1.8999 * 10^{-4} B + m + \zeta + 1)} \quad (262)$$

El término $1.8999 * 10^{-4} B$ es “muy pequeño” comparado con $m + \zeta + 1$, por lo que incluso podría aproximarse a cero. Dado este análisis, se concluye que el aporte del tamaño explícito del punto cuántico no es significativo y que puede ser la variable ζ que contiene el flujo Aharonov-Bohm la que realmente influya en las propiedades ópticas del punto, asociadas al espectro energético de emisión.

- **Fase Aharonov-Bohm:** la forma de la fase ϕ_{AB} corresponde a la que se presenta en [23] [1] [40] [41] por lo que se corrobora que en materiales del tipo 2+1 dimensiones este tipo de fase topológica suele ser común.

Se corrobora la fiabilidad y precisión del método fórmula por medio del desarrollo de los siguientes sistemas

- Una partícula en un pozo de potencial infinito
- Oscilador armónico unidimensional
- Oscilador esférico
- Partícula sometida a un potencial del tipo Hylleraas
- Reproducción de resultados del análisis de la ecuación de Dirac-Weyl en el grafeno con estructura de punto cuántico
- Interacción de una diferencia de potencial constante en un punto cuántico de grafeno

Se da como aporte de la tesis el desarrollo de los modelos de: una partícula en un pozo de potencial infinito, oscilador armónico unidimensional, potencial de Hylleraas y el estudio de un punto cuántico de grafeno en presencia de una diferencia de potencia V_0 empleando el método fórmula, cálculos que se analizan y contrastan con los reportados en la literatura para soluciones con métodos matemáticos convencionales.

Se profundizo y amplio el conocimiento en la ecuación de Dirac-Weyl, su origen, características, cuasipartículas que se pueden modelar por medio de esta ecuación y su fuerte relación con la simetría de la teoría de grupos. Se destaca al grafeno como uno de los principales materiales que se describen por medio de la ecuación de Dirac-Weyl.

Por último, se destaca la importancia de la topología en el estudio de los sistemas cuánticos que tienen relación con física de partículas, materia condensada, simetrías y leyes de conservación. Se considera que el estudio de esta rama de la matemática enfocada al campo de la física debe de seguir avanzando en busca de la comprensión de fenómenos que hasta el momento no han encontrado sustento físico, como es el caso de los potenciales. En base a lo que se consultó y reviso durante el desarrollo de los capítulos y de estos años de maestría se tiene la fuerte convicción en que la mecánica cuántica y la topología pueden ser los que den el salto a una definición formal y física de los potenciales, en donde muy probablemente el efecto Aharonov-Bohm, o efecto similares de dispersión cuántica, desempeñen un rol importante.

7.1 Trabajos a futuro

En la presente sección se dan a conocer los posibles aspectos a considerar en investigaciones futuras; lo que se describe a continuación está fundamentado en lo desarrollado durante la tesis y en la revisión de literatura realizada en torno al tema de investigación.

- Analizar la relevancia de potenciales de interacción del tipo par electrón hueco en el punto cuántico, y su viabilidad para el análisis teórico del grafeno por medio de la ecuación de Dirac—Weyl.
- Profundizar en los análisis e investigaciones teóricas que permitan encontrar una definición física de los potenciales.
- Analizar diferentes simetrías en relación a la ecuación de Dirac-Weyl y corroborar las leyes de conservación que se pueden ver atribuidas por el teorema de Noether.
- Estudios del campo eléctrico que se genera en el sistema con diferencias de potenciales y su acople con el spin electrónico.
- Continuar los estudios de los materiales semiconductores topológicos como el grafeno y sus posibles aplicaciones en la electrónica y la óptica.
- Identificar de forma teórica las propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas que pueden tener los puntos cuánticos de grafeno al estudiarlos desde la ecuación de Dirac-Weyl.
- Continuar con el estudio de las cuasipartículas que se pueden originar en el grafeno dadas sus propiedades topológicas, e identificar qué tipo de cuasi partículas es más común y cuál puede ser más útil para aplicaciones.
- Continuar con el estudio y aplicación del método fórmula para diferentes sistemas cuánticos.
- Introducir un término de interacción tipo potencial periódico en el estudio del modelo, y analizar los efectos que producen la red de puntos cuánticos en los niveles de energía y la función de onda.
- Ampliar las investigaciones en los sistemas $2 + 1$ dimensiones, enfatizando los estudios de agujeros negros BTZ y sus analogías con la topología del grafeno.

Anexo A: Función hipergeométrica, polinomios de Laguerre y ecuación de Laguerre.

Función hipergeométrica confluyente

La función hipergeométrica confluyente [42] se define como

$${}_1F_1(a, c; z) \equiv 1 + \frac{az}{c(1)!} + \frac{a(a+1)z^2}{c(c+1)2!} + \frac{a(a+2)(a+1)z^3}{c(c+1)(c+2)3!} + \dots \quad (263)$$

Se usa la notación

$$[a, c, n] = \frac{a(a+1)(a+2)(a+3) \dots (a+n)}{c(c+1)(c+2)(c+3) \dots (c+n)} \quad (264)$$

Cuando $n = -1$ se tiene

$$[a, c, -1] \equiv 1 \quad (265)$$

Algunas propiedades de la función hipergeométrica [42] son

- i. ${}_1F_1(a, a; z) = e^z$
- ii. ${}_1F_1(a, c; z) = e^z {}_1F_1(c-a, c; z)$
- iii. $(c-a) {}_1F_1(a-1, c; z) + (2a-c+z) {}_1F_1(a, c; -z) = a {}_1F_1(a+1, c; z)$ (266)
- iv. $(a-c+1) {}_1F_1(a, c; z) + (c-1) {}_1F_1(a, c-1; -z) = a {}_1F_1(a+1, c; z)$
- v. si $a \in \mathbb{Z}^-$ entonces ${}_1F_1(-n, a; z)$ es un polinomio de orden n

Las derivadas de la función hipergeométrica se pueden hacer de forma de series o empleando las relaciones mencionadas, de esta forma

$$\begin{aligned} \text{i. } \frac{d}{dz} ({}_1F_1(a, a; z)) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} [a, c, n-1] = \frac{a}{c} {}_1F_1(a+1, c+1; z) \\ \text{ii. } \frac{d^2}{dz^2} ({}_1F_1(a, a; z)) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-2}}{(n-2)!} [a, c, n-1] \end{aligned} \quad (267)$$

Polinomios de Laguerre

Los polinomios de Laguerre son polinomios de orden n que son ortogonales con respecto al producto interno [43]. Los polinomios surgen de la fórmula de Rodríguez y se definen como

$$L_n^\alpha(x) = \frac{x^{-\alpha} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+\alpha} e^{-x}) \quad (268)$$

Se resalta que los polinomios de Laguerre son solución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrogeno [43].

La función hipergeométrica confluyente y los polinomios de Laguerre se relacionan por medio de la siguiente ecuación

$$L_n^\alpha(x) = \binom{n+\alpha}{n} M(-n, \alpha+1, x) = \frac{(\alpha+n)_n}{n!} F_1(-n, \alpha+1, x) \quad (269)$$

Ecuación de Laguerre

La ecuación de Laguerre [43] se halla diferenciando dos veces la siguiente forma de los polinomios de Laguerre

$$e^{\frac{-tx}{1-x}} = (1-x) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n(t)}{n!} x^n \quad (270)$$

$$L''_{n+2}(t) + (t-2n-3)L''_{n+1} + (n+1)^2 L''_n(t) + 2L'_{n+1} = 0$$

Aplicando propiedades de los polinomios de Laguerre y organizando los términos es posible demostrar la ecuación resultante. Para el presente estudio solo se requiere presentar la forma de la ecuación final de Laguerre.

$$tL''_n(t) + (t-1)L'_n(t) + nL_n(t) = 0 \quad (271)$$

La solución $L_n(t)$ es también solución de la ecuación diferencial

$$ty'' + (t-1)y' + \lambda y = 0 \quad (272)$$

Las soluciones son de la forma de series de potencia

$$y(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n \quad (273)$$

La ecuación de recurrencia para la serie de potencia es de la forma

$$a_{v+1} = \frac{v-\lambda}{(v+1)^2} a_v ; \text{ con radio de convergencia } \frac{a_{v+1}}{a_v} = \frac{1}{v} \quad (274)$$

Referencias

- [1] Serrano, F.A., Avalos, J.G., Cabrera, X., Cuevas, J.L., Martínez, H.M., «Enhancing the energy spectrum of graphene quantum dot with external magnetic and Aharonov-Bohm flux fields.,» *Heliyon.*, 2019.
- [2] D. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, Second ed., Person Education Inc, 2005.
- [3] J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics., Addison-Wesley publishing Company, Inc., 1994.
- [4] K. Gordon, Modern Elementary particle physics., Michigan: Addison-Wesley Publishing Company, Inc, 1993.
- [5] A. Messiah, Quantum Mechanics two volumes Bound as One., New York : Library of Congress Cataloging in publication Data, 1999.
- [6] O. Boyarkin, Introduction to physics of elementary particles., New York : Nova Science Publisher, Inc., 2007.
- [7] Díaz, J.L, Larios, B, Meza Aldana O, Reyes Perez J, «Espinoros de Weyl y el formalismo de helicidad,» *Revista Mexicana de física*, vol. 61, pp. 104-112, 2015.
- [8] Greiner, W., Reinhardt, J., Quantum Electrodynamics, New York : Springer, 1994.
- [9] De martinoa, A., Dell'Anna, L., Egger, R., «Magnetic barriers and confinement of Dirac–Weyl quasiparticles in graphene,» *Solid State Communications.*, vol. 144, pp. 547-550, 2007.
- [10] Ebert, D., Klimenko, K.G., Kolmakovc, Zhukovsky P.B., «Phase transitions in hexagonal, graphene-like lattice sheets and nanotubes under the influence of external conditions.,» *Annals of Physics*, vol. 371, pp. 254-286, 2016.
- [11] Berry, M. V., Mondragon, R.J., «Neutrino Billiards: Time-Reversal Symmetry-Breaking Without Magnetic Fields,» *Proceeding of the Royal Society A*, vol. 412, pp. 53-74, 1987.

- [12] Castro Neto, A.H., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S., Geim, A.K., «The electronic properties of graphene,» *REVIEWS OF MODERN PHYSICS*, vol. 81, pp. 1-54, 2009.
- [13] G. Jian Ru, Graphene Synthesis, Characterization, Properties and Application., Published by Inc., 2011.
- [14] A. A. Vargas Chávez, Estructura supergeométrica de los estados de Landau en el grafeno, Morelia: Universidad Michoaca de San Nicolás de Hidalgo.
- [15] Young, S.M. Kane, C.L., «Dirac semimetals in two dimensions.,» *Physical Review Letters.*, 2015.
- [16] Grujic, M., Zarenia, M., Chaves, A., Tadic, M., Farias, G.A., Peeters, F.M., «Electronic and optical properties of a circular graphene quantum dot in a magnetic field: Influence of the boundary conditions,» *PHYSICAL REVIEW B*, vol. 84, n° 205441, pp. 1-12, 2011.
- [17] Zarenia, M., Chaves, A., Farias, G.A., Peeters, F.M., «Energy levels of triangular and hexagonal graphene quantum dots: A comparative study between the tight-binding and Dirac equation approach,» *PHYSICAL REVIEW B*, vol. 84, 2011.
- [18] Oliva Leyva, O., Naumis, G.G., «Generalizing the Fermi velocity of strained graphene from uniform to non-uniform strain.,» *Physics Letter A*, vol. 339, pp. 2645-2651, 2015.
- [19] Odriazola, A., Delgado, A., Gonzales, A., «Propiedades universales en el espectro de energías de puntos cuánticos semiconductores.,» *Revista cubana de física*, vol. 26, n° 1, pp. 61-70, 2009.
- [20] M. De la torre, «Electrodinámica cuántica bidimensional: Sobre la teoría del efecto Hall cuántico.,» Universidad de Salamanca.
- [21] Xiao-Liang, Q., Shou-Cheng, Z., «Topological insulators and superconductors,» *Rev. Mod. Phys.*, n° 83, Agosto 2010.
- [22] Bender, C. M., Orszag, S.A., *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers.*, Library of Congress Cataloging in publication Data, 1979.
- [23] Aharonov, Y. Bohm, D., «Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory.,» *The physical review*, vol. Vo 115, n° 3, 1959.
- [24] Aharonov, Y., Carmi, G., «Quantum Aspects of the Equivalence Principle.,» *Foundations of Physics*, vol. Vo 3, n° 4, 1973.
- [25] J. Mattingly, «Classical fields and quantum time-evolution in the Aharonov–Bohm effect.,» *Studies in History and Philosophy of Modern Physics.*, vol. 38, pp. 888-905, 2007.

- [26] Kholmetskii, A.L., Missevitch, O.V., Yarman, T., «Quantum phases for point-like charged particles and for electrically neutral dipoles in an electromagnetic field.,» *Annals of Physics*, vol. 392, pp. 49-62, 2018.
- [27] Ardourel, V., Guay, A., «Why Is the transference theory of causation insufficient? The challenge of Aharonov-Bohm effect.,» *Studies in History and Philosophy of Modern Physics.*, pp. 12-33, 2018.
- [28] Sitenko, Y.A., Vlasii D., «Scattering theory and the Aharonov–Bohm effect in quasiclassical physics.,» *Annals of Physics*, vol. 326, pp. 1441-1456, 2011.
- [29] D. Griffiths, Introduction to electrodynamics, Upper Saddle River, New Jersey.: Prentice-Hall Inc, 1999.
- [30] K. Ottar, treatise on the Magnetic Vector Potential, Faculty of Physical Science, University of Iceland, 2018.
- [31] D. Tong, The quantum Hall Effect. Preprint typeset in JHEP style - HYPER VERSION, Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, Cambridge, 2016.
- [32] Novello, M., Salim, J.M., Falciono, F.T., «On a Geometrical Description of Quantum Mechanics.,» *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics.*, 2011.
- [33] Durr, D., Goldstein, S., Zanghí, N., «Quantum Equilibrium and Origin of Absolute Uncertainty. The Journal of Statistical Physics.,» 2003.
- [34] Ligata, I., Fiscaletti, D., Quantum Potential: Physics, Geometry and Algebra., New York : Springer, 2014.
- [35] E. Vasselli, «Background potentials and superselection sectors.,» *Journal of Geometry and Physics*, vol. 139, pp. 139-148, 2019.
- [36] Falaye, B.J., Ikhdair, S.M., Hamzavi, M., «Formula Method for Bound State Problems.,» *Springer.*, 2015.
- [37] De la peña, L., Villavicencio, M., «Problemas y ejercicios de la mecánica cuántica.,» Mexico FCE: UNAM., 2003.
- [38] P. Burke, Potential Scattering in Atomic Physics., New York : Plenum Press, 1977.
- [39] González, J., Hernández, M. A., Guinea, F., «El grafeno, una lámina de carbono cuyo espesor puede ser de un solo átomo, muestra propiedades electrónicas exóticas que revisten un gran interés para la investigación fundamental y el desarrollo de nuevos materiales.,» *Investigación y Ciencia*, Septiembre 2010.

- [40] Filgueiras, C., Rojas, M., Aciole G., Silva, E.O., «Landau quantization, Aharonov–Bohm effect and two-dimensional pseudo harmonic quantum dot around a screw dislocation.,» *Physics Letters A*, vol. 380, pp. 3847-3853, 2016.
- [41] Dvalia, G., Gußmanna A, «Aharonov–Bohm protection of black hole’s baryon/skymion hair.,» *Physics Letters B*, vol. 768, pp. 274-279, 2017.
- [42] Ferrer, R., Massmann, H., Roessler, J., Rogan, J., *Mecanica Cuantica I*, Departamento de física, facultad de ciencias, Universidad de Chile.
- [43] L. Torres, Una introducción a los polinomios ortogonales de Laguerre, Sovolev: Caso continuo., Bogotá: Universidad Distrital Francisco José de Caldas, 2016.