

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTADOS MAGNÉTICOS DE FRONTERA EN EL GRAFENO



Ricardo Zavaleta Madrid

DIRECTOR DE TESIS: Dra. Gabriela Murguía Romero 2011





Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hoja de Datos del Jurado

1.Datos del alumno Zavaleta Madrid Ricardo 47 52 93 12 Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Ciencias Física 301135261

2. Datos del tutor Dra. Gabriela Murguía Romero

3.Datos del sinodal 1 Dr. Rodolfo Martínez y Romero

4.Datos del sinodal 2 Dr. Manuel Torres Labansat

5.Datos del sinodal 3 Dra. María de los Ángeles Ortiz Flores 6.Datos del sinodal 4 Dr. José Alejandro Ayala Mercado

7. Datos del trabajo escritoEstados Magnético de Frontera en el Grafeno.73p2011

Agradecimientos

Para eleborar la tesis que a continuación presento, tuve la fortuna de ser dirigido por la Doctora Gabriela Murguía Romero, a quien deseo expresar mi más sincero agradecimiento por todo el tiempo, dedicación y profesionalismo que ha destinado. Gracias por toda su paciencia y por ser parte de este proceso de enseñanza que me permitirá crecer enormemente en mí vida profesional.

Agradezco a toda mi familia, a mis padres y mis hermanos que jamas dejaron de apoyarme y de darme cariño incondicional. Gracias a Mariana Méndez Janovitz por iluminar mi vida y llenarla de esta nueva esperanza, gracias por toda su paciencia y amor.

Este trabajo fue apoyado por la beca del SNI de ayudante de investigador otorgada por el CONACYT y el Dr. Manuel Torres Labansat a quien también le agradezco por todos sus comentarios y disponibilidad.

También agradezco a los doctores: Rodolfo Martínez y Romero, María de los Angeles Ortiz Flores y José Alejandro Ayala Mercado, por su disponibilidad de tiempo que tuvieron al revisar este trabajo de tesis y por los comentarios finales al mismo.

Gracias al Departamento de Física que durante este periodo me asignó un espacio de trabajo.

Gracias también a todos a quien directa o indirectamente fueron parte de este proceso.

Ricardo Zavaleta Madrid Septiembre de 2011.

Estados Magnéticos de Frontera en el Grafeno

Ricardo Zavaleta Madrid

2011

Índice general

Re	esumen	5
In	troducción	7
1.	El Grafeno 1.1. Estructura	9 12
2.	Ecuación de Dirac2.1. Partícula libre en $(3 + 1)D$ 2.2. Partícula libre en $(2 + 1)D$ 2.2.1. Representación irreducible A2.2.2. Representación irreducible B2.2.3. Representación reducible2.2.4. Campo magnético en $(2 + 1)D$	15 16 23 23 25 26 28
3.	Supersimetría en la Mecánica Cuántica 3.1. Potenciales compañeros SUSY 3.2. Propiedades SUSY en N=2 3.3. Carácter SUSY del \hat{H} de Dirac Supersimetría en la Mecánica Cuántica 3.1. Potenciales compañeros SUSY 3.2. Propiedades SUSY en N=2 3.3. Carácter SUSY del \hat{H} de Dirac Supersimetría en la Mecánica Cuántica 3.3. Carácter SUSY del \hat{H} de Dirac Supersimetría en la Mecánica Cuántica Supersimetría en la Mecánica SUSY Supersimetría en la Mec	31 32 35 36 39
5.	Resultados y Conclusiones 5.1. Resultados	49 49 55
А.	Estados de Landau	59
в.	Funciones Parabólicas Cilíndricas	61
C.	Límite no relativista de la ecuación de Dirac	63
D.	. Código	67

Resumen

En este trabajo se estudiarán los estados magnéticos de frontera en el grafeno, material que en la última década ha despertado gran interés en el desarrollo de nuevos materiales. Su estructura de la red cristalina hexagonal (panal) sp^2 logra formar una de las estructuras más fuertes conocidas. Al ser un material bidimensional y tener electrones casi libres se puede modelar con la mecánica cuántica relativista mediante la ecuación de Dirac en (2+1)D con masa igual a cero en una barrera de campo magnético constante en norma de Landau. La estructura de panal puede ser representada por dos subredes triangulares.

Este trabajo se centrará en el estudio de la interacción de los electrones en el grafeno con un campo magnético externo y constante tipo barrera en la norma de Landau. En particular se determinarán los estados ligados del sistema conocidos en la literatura como estados magnéticos de frontera. Las soluciones de dichos estados se encuentran con la ayuda de la supersimetría en la mecánica cuántica. Los portadores de carga en el grafeno serán descritos por dos ecuaciones de Dirac no masivas dadas en términos de las dos representaciones irreducibles de las matrices de Dirac en (2 + 1)D. Las soluciones de estas ecuaciones serán biespinores etiquetados por un pseudo-espín. Cada uno de los dos posibles valores del pseudo-espín está asociado a cada una de las dos subredes triangulares del grafeno.

Este formalismo de la supersimetría en mecánica cuántica permite conocer las soluciones completas en ambas representaciones de las matrices de Dirac conociendo tan solo una de las componentes del espinor solución de la ecuación de Dirac correspondiente a solo una de las representaciones.

Mediante el formalismo anteriormente descrito y un cálculo numérico se calculan los estados magnéticos de frontera, para este potencial en particular.

Introducción

Me propuse hacer este trabajo de investigación sobre el grafeno porque este material tiene, actualmente, una gran relevancia dentro de la física actual. El grafeno es un material relativamente nuevo, su desarrollo data de la segunda mitad del siglo XX. Es importante mencionar que en los últimos años ha estado en boca de todos, incluyendo a los investigadores Geim y Novoselov quienes obtuvieron el Premio Nobel de Física 2010 por su trabajo de varios años dedicados al grafeno.

Personalmente este trabajo me hace pensar que el material interés de mi investigación se usa cada vez que se escribe con un lápiz común, pues el lápiz está formado por grafito y este objeto de uso cotidiano tiene aproximadamente 447 años de vida.

El grafito tiene una dirección en la cual existen fuerzas de enlace débiles (tipo van der Waals), mientras que en las otras dos direcciones existen fuerzas de enlace fuertes (covalentes), que da lugar a la formación de grafeno.

La estructura de las láminas es bidimensional, cristalina hexagonal tipo panal; esta estructura puede ser descrita por dos subredes triangulares de Bravais. La estructura de bandas de energía del grafeno tiene una brecha semiconductora que se anula en las intersecciones de las dos subredes cristalinas, a estos puntos se les denominan puntos de Dirac, $\mathbf{K} \ \mathbf{y} \ \mathbf{K}'$. Esto implica una relación de dispersión lineal, dando lugar a que los portadores de carga tengan una masa efectiva nula, en el capítulo 1 se comentarán las propiedades del grafeno.

Bajo estas condiciones se puede describir al grafeno con la ecuación de Dirac en (2+1)Den el límite de masa cero, debido a que incluye a la Relatividad Especial dentro de la Teoría de la Mecánica Cuántica para partículas de espín 1/2. En este caso existen dos posibles representaciones inequivalentes de las matrices de Dirac mediante las cuales se describen a los portadores de carga cerca de los puntos de Dirac **K** y **K**'. En el capítulo 2 se presenta con detalle la ecuación de Dirac tanto en (3 + 1)D como en (2 + 1)D.

Como se verá en el capítulo 3, la supersimetría en mecánica cuántica es un formalismo que permite establecer una relación entre un Hamiltoniano de Dirac y un Hamiltoniano diagonal con entradas tipo un Hamiltoniano de Schrödinger (no relativista).

Utilizando la supersimetría de la mecánica cuántica en el capitulo 4 se calculan los estados magnéticos de frontera en el grafeno descritos por la ecuación de Dirac en (2 + 1)D en el límite de masa cero en las dos representaciones irreducibles de las matrices de Dirac dentro de una barrera de campo magnético. La existencia de los estados ligados dentro del potencial efectivo dependerá de los parámetros del problema como lo son: la intensidad de campo magnético (que es el alto de la barrera), el ancho de la barrera y el momento con el que inciden las partículas.

En el capítulo 5 se presentan los resultados numéricos obtenidos de los estados magnéticos de frontera en el grafeno para una barrera magnética. En este mismo capítulo se presentan las conclusiones de este trabajo de tesis.

Capítulo 1

El Grafeno

El grafeno [1] es un nuevo material nanométrico bidimensional obtenido en el 2004 por exfoliación micrométrica del grafito. Es una superficie de un átomo de carbono de un grosor aproximando de 0.1nm con pequeñas ondulaciones formando una estructura cuasiplana en forma de panal de abeja. Su producción está restringida a nivel laboratorio, sin embargo se realizan arduas investigaciones para producirlo a escalas industriales, ya que cuenta con extraordinarias propiedades: tiene un comportamiento tipo semiconductor, presenta ausencia de localización electrónica y se ha mostrado la existencia del efecto Hall cuántico anómalo [2]; propiedades entre otras que se vislumbra serán de gran utilidad en computación, electrónica y ecología.

En este capítulo se presenta la información básica del surgimiento de este material, desde sus principales características, hasta el por qué se puede estudiar con los modelos de la mecánica cuántica relativista con masa efectiva nula. El carbono de número atómico 6 es un elemento químico del que más estamos familiarizados por ser un componente fundamental de la receta de la vida. Su nombre es conocido desde la antigüedad por el término latino *carbón*, él cual es fácil de asociar con el combustible mineral ocupado desde nuestros antepasados. No es un metal y tiene un papel básico dentro de la química orgánica.

Los sistemas a base de carbono tienen una gran variedad de estructuras y a su vez cada una de ellas tiene gran diversidad de propiedades físicas. Existen diversas configuraciones moleculares estables del carbono, conocidas como alótropos. Existen algunas de las cuales no nos parecerían del todo desconocidas como lo son: el diamante, el carbono amorfo y el grafito; el grafeno es componente de este último.



Figura 1.1: Los alótropos del grafeno se pueden ver como grafeno en otras dimensiones [1]

El entendimiento del grafeno tiene vital importancia para el desarrollo de otros alótropos de carbono, como lo son los fullerenos y los nanotubos de carbono, ver figura 1.1. Estos alótropos son algún tipo de grafeno en otras dimensiones, por ejemplo, los fullerenos pueden ser obtenidos introduciendo pentágonos en la red dando la curvatura positiva para formar un sistema sin dimensiones, a cierta escala. Los nanotubos los obtenemos enrollando una capa de grafeno en una dirección y uniendo los extremos por los mismos enlaces, por lo que se considera un sistema en una dimensión (1D). El grafito es una composición del grafeno corrugado en tres dimensiones (3D), ya que son muchas capas de grafeno desordenadas, pero débilmente unidas por fuerzas tipo van der Waals, por lo que al deslizar la punta de grafito de un lápiz, varias capas de grafeno son impresas en la hoja de papel ver figura 1.2. Esto mismo se utilizaba desde hace unos 440 años aproximadamente.



Figura 1.2: El grafito esta formado por láminas de grafeno unidas débilmente entre ellas, por lo que al resbalar el lápiz un conjunto de capas se impregna en el papel. Imagen obtenida de http://www.cmdmc.com.br/cg/ESP/imagenes.html

El grafeno es un material relativamente nuevo, ya que el término fue utilizado por primera vez por el químico alemán Hanns-Peter Boehm en el año 1962, considerado como el pionero del grafeno [3]. Aunque ya era conocido por los científicos desde la mitad del siglo pasado, su obtención en estado libre no fue posible hasta el año 2004 [1]. El término es compuesto de la palabra grafito y el sufijo -eno que denota "procedencia".

Los métodos de obtención de grafeno son diversos: exfoliación micromecánica (técnica de la cinta scotch), exfoliación química, exfoliación de compuestos grafíticos intercalados y el de sublimación de silicio a partir de sustratos de SiC. El grafeno en estado libre fue obtenido por primera vez mediante la técnica de exfoliación micromecánica en el año 2004 por Geim y Novoselov [1], trabajo por el cual les otorgaron en 2010 el premio Nobel de física.

Un aspecto interesante del problema del grafeno es que a energías de excitación bajas, las masas de los electrones son despreciables y son llamados Fermiones de Dirac, haciéndolos invisibles antes potenciales electrostáticos externos dando lugar a la paradoja de Klein.

La paradoja de Klein plantea un problema de dispersión de electrones en una barrera de potencial. En el caso no relativista de la mecánica cuántica existe tunelamiento de electrones dentro de la barrera y funciones exponenciales fuera de la misma. Klein mostró que si el potencial es del orden de la masa del electrón, la barrera se vuelve transparente y cuando el potencial se acerca al infinito la reflexión disminuye y el electrón siempre se transmite.

Tomando como base discriminatoria sus propiedades, el grafeno puede ser clasificado en tres tipos: monocapa, bicapa y aquel que se halla en el rango de 3 a 10 capas. Sin embargo presentan un conjunto de propiedades comunes que permiten caracterizar a los tres tipos como grafeno:

El grafeno al ser un forma alotrópica del carbono y este último al ser no metálico, parecería hacer del grafeno un mal conductor de la electricidad, sin embargo, presenta ciertas propiedades que corresponden a los metales, comportándose como semiconductor.

1.1. Estructura

El grafeno es una superficie plana de un átomo de espesor, formando una red cristalina compuesta por átomos de carbono dispuestos en orbitales tipo sp^2 , dando como resultado un arreglo de panal de abeja, es decir hexagonal. La característica de tener espacialmente solo dos grados de libertad da lugar a poder utilizar un modelo bidimensional (2D) para su descripción.

Las propiedades físicas de cualquier material son dominantemente determinadas por su estructura, es decir, que aunque se tenga el mismo elemento (como en este caso el carbono), es fundamental observar el tipo de estructura que tiene, ya que definirá las propiedades físicas de cada alótropo, como el diamante y el grafeno: El carbono con estructura sp^3 es translúcido, tridimensional y forma diamantes (esta es la estructura más dura del mundo), mientras que cuando la estructura es sp^2 es opaco, bidimensional y forma grafeno, también es una estructura muy dura pero solo en un plano, mientras que es muy débil en la dirección restante.

La configuración sp^2 (un orbital *s* y dos orbitales *p*), forman una estructura triangular plana, creando enlaces σ entre átomos de carbono separados por .142*nm*, a diferencia de la configuración híbrida sp^3 que forma una estructura tetraédrica y que constituye al diamante. En ambas los enlaces σ son los responsables de que se formen materiales con una estructura extremadamente robusta, ya que el enlace σ es el tipo más fuerte de enlace químico covalente.

La estructura cristalina del grafeno corresponde a una red de Bravais hexagonal que se puede separar en dos subredes triangulares tomando como base dos átomos por unidad de celda.



Figura 1.3: Estructura cristalina del grafeno (izquierda). Primera zona de Brillouin (Derecha) [1]

Los vectores de red se pueden escribir como:

$$\mathbf{a_1} = \frac{a}{2}(3,\sqrt{3}), \qquad \mathbf{a_2} = \frac{a}{2}(3,-\sqrt{3}), \qquad (1.1)$$

donde $a \approx .142 nm$ y es la distancia entre átomos de carbono. Los vectores de la red recíproca son:

$$\mathbf{b_1} = \frac{2\pi}{3a}(1,\sqrt{3}), \qquad \qquad \mathbf{b_2} = \frac{2\pi}{3a}(1,-\sqrt{3}). \tag{1.2}$$

En la figura 1.3 se muestran los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' , físicamente importantes por ser las esquinas de la primera zona de Brillouin del grafeno y son llamados puntos de Dirac, en la figura 1.4 se muestra un agrandamiento de la primera zona de Brillouin. Las posiciones en el espacio de momentos están dados por:

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \qquad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right). \tag{1.3}$$



Figura 1.4: Estructura de bandas para la primera zona de Brillouin. Imagen obtenida de http://www.magnet.fsu.edu/inhouseresearch/condensedmatter/electroninteraction.html.

Los vectores de los tres vecinos más cercanos en el espacio real son:

$$\delta_{1} = \frac{a}{2}(1,\sqrt{3}), \qquad \delta_{2} = \frac{a}{2}(1,-\sqrt{3}), \qquad \delta_{3} = a(1,0), \qquad (1.4)$$

y los seis segundos vecinos se localizan en $\delta'_1 = \pm \mathbf{a_1}, \delta'_2 = \pm \mathbf{a_2}, \delta'_3 = \pm (\mathbf{a_2} - \mathbf{a_1}).$

Las Bandas de energía se obtienen de un Hamiltoniano para electrones en el grafeno, considerando que los electrones están casi libres pudiendo interactuar tanto con los vecinos más cercanos como con los segundos vecinos:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t\sqrt{3+f(\mathbf{k})} - t'f(\mathbf{k}), \qquad (1.5)$$

con
$$f(\mathbf{k}) = 2\cos\left(\sqrt{3}k_ya\right) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_ya\right)\cos\left(\frac{3}{2}k_xa\right),$$
 (1.6)

donde el signo positivo se aplica para la banda superior (π) y el signo negativo se aplica para la banda inferior $(\pi*)$. $t \ y \ t'$ son las energías de salto al vecino más cercano y al siguiente vecino cercano respectivamente. De la ecuación (1.5) el espectro de energías es simétrico alrededor de la energía cero si t' = 0.

Alrededor de los puntos de Dirac \mathbf{K} y \mathbf{K}' de la primera zona de Brillouin la relación de dispersión se puede obtener de un desarrollo es series de potencias a partir de la estructura de bandas cerca de los vectores de la ecuación (1.3), como $\mathbf{k}=\mathbf{K}+\mathbf{q}$ con $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}|$:

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx \pm v_F |\mathbf{q}| + \mathcal{O}\left(\frac{\mathbf{q}}{\mathbf{K}}\right)^2,$$
(1.7)

donde **q** es el momento relativo al punto de Dirac y v_F es la velocidad de Fermi dada por $v_F = 3ta/2 \approx c/300$ [4].

Cerca de los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' los electrones del grafeno son semejantes a fermiones de Dirac sin masa. Un fermión es una partícula subatómica (electrones, protones y neutrones) que tiene espín 1/2 y se rige por el principio de exclusión de Pauli, el cual establece que dos fermiones no pueden ocupar un mismo estado cuántico particular, a no ser que tengan un espín distinto. El espín es el momento angular intrínseco de una partícula subatómica, que experimentalmente se evidencía cuando la partícula interacciona con un campo magnético externo como lo mostró el experimento de Stern-Gerlach.

Los portadores de carga en el grafeno están descritos por dos ecuaciones de Dirac en el plano (2 + 1)D correspondientes al comportamiento de los electrones cerca de los puntos **K** y **K'**. Las soluciones de cada ecuación de Dirac están descritas por un espinor de dos componentes (biespinor). Cada biespinor dependerá de un número cuántico que en este caso llamaremos pseudo-espín por su comportamiento análogo al espín en (3 + 1)D. Para cada uno de los biespinores solución de la ecuación de Dirac cerca de los puntos **K** y **K'**, el valor de pseudo-espín corresponderá a la subred triangular a la que pertenecerán los portadores de carga del grafeno.

De acuerdo a la teoría clásica, una partícula no puede propagarse por una región donde su energía potencial es más grande que su energía total. Pero los electrones obedecen a la mecánica cuántica, y así para el caso de una barrera de potencial existe una probabilidad finita de que la partícula se encuentre del otro lado de la barrera, llamando a esto efecto túnel. Sorpresivamente para una barrera escalar en el grafeno la probabilidad de transmisión del electrón es 1, independientemente del ancho y alto de la barrera, esta conducta es denominada paradoja de Klein.

El grafeno ha despertado últimamente un inusitado interés por parte de los investigadores y la industria por sus promisorias aplicaciones en la electrónica y la computación. Estas investigaciones tienen la intensión de buscar un método para obtener una producción a nivel industrial y seguir revolucionando la ciencia de materiales.

De igual forma ha aumentado el interés en este material en el aspecto teórico. El presente trabajo está motivado en el estudio de algunas potenciales aplicaciones del grafeno interactuando con campos electromagnéticos externos que van desde confinamiento cuántico magnético hasta fenómenos de transporte.

Capítulo 2 Ecuación de Dirac

En este capítulo se presenta la ecuación de onda de Dirac de la mecánica cuántica relativista formulada por el físico británico Paul Adrien Maurice Dirac en 1928. Describe a partículas cuyo espín es 1/2, tal como el electrón, y es consistente con los principios de la mecánica cuántica y la teoría especial de la relatividad. Los primeros intentos por crear una teoría que fuera consistente con este par de teorías fue la ecuación de Klein-Gordon (KG), pero al resultar estados con energías negativas se empezaron a buscar otras alternativas. Dirac propuso una ecuación matricial y lineal en las derivadas espacio-temporales, pero seguían surgiendo los estados con probabilidad de energía negativa, los que posteriormente Dirac interpretó como pertenecientes a los estados de la antimateria, una nueva forma de materia de la que en ese entonces no se tenía conocimiento. Esto dejaba entonces a la ecuación de KG para describir a los bosones, es decir, partículas con espín entero.

Capítulo 2. Ecuación de Dirac

2.1. Partícula libre en (3+1)D

En la mecánica cuántica se asocian a las observables de momento y energía los operadores covariantes:

$$\hat{E} \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$
 y $\hat{\mathbf{p}}^k \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x^k},$ (2.1)

a partir de los que se obtiene la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi$$
(2.2)

 con

$$\hat{H} = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r})\right],\,$$

Si se reemplaza el operador \hat{E} con su expresión relativista [5],

$$\hat{E}^2 = \hat{\mathbf{p}}^2 c^2 + m^2 c^4, \qquad \text{es decir} \qquad (2.3)$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -c^2 \hbar^2 \nabla^2 \Psi + m^2 c^4 \Psi, \qquad (2.4)$$

obtenemos la ecuación de KG. Esta ecuación tiene solución para energías negativas por el término \hat{E}^2 , pero la energía se había definido positiva, por lo que se buscaron otras alternativas.

Dirac propuso linealizar el Hamiltoniano, es decir, tener únicamente el término de la derivada temporal de forma lineal contenido en \hat{E} de la siguiente manera:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial\Psi}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial\Psi}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial\Psi}{\partial x^3}\right) + \beta m c^2 \Psi \equiv \hat{H}_D \Psi$$
(2.5)

en donde los coeficientes α_i no pueden ser simples funciones escalares, como en las ecuaciones de Schrödinger y KG ya que el Hamiltoniano \hat{H}_D debe ser invariante ante rotaciones espaciales. Las funciones de onda Ψ , de igual modo tienen que cumplir que sean invariantes relativistas y describir correctamente la función la densidad de probabilidad $\rho = \Psi^* \Psi$. La ecuación de Dirac es una ecuación matricial y la función de onda una matriz columna con N componentes y que por ser un análogo con la parte de espín de la función de onda de una partícula en la mecánica cuántica no relativista, es denominado espinor:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_N \end{pmatrix}.$$
(2.6)

 H_D es el Hamiltoniano de Dirac, que al igual que los coeficientes constantes α_i, β es una matriz de $N \times N$.

La ecuación de Dirac tiene que cumplir con:

- 1. La relación de momento-energía (2.3) para partícula libre.
- 2. La ecuación de continuidad y tener la interpretación de probabilidad para la función de onda Ψ .
- 3. Ser invariante de Lorentz.

Para que la primera condición sea correcta, cada componente del espinor (2.6) debe cumplir la ecuación de KG. Entonces aplicando el operador \hat{H}_D por la izquierda a la ecuación (2.5):

$$-\hbar\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi = -\hbar^2 c^2 \sum_{i,j=1}^3 \frac{\alpha_j \alpha_i + \alpha_i \alpha_j}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^i \partial x^j} + \frac{\hbar m c^3}{i} \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \frac{\partial \Psi}{\partial x^i} + \beta^2 m^2 c^4 \Psi, \quad (2.7)$$

y para recuperar al ecuación de KG, (2.4), las matrices α_i, β deben obedecer el álgebra

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik} \tag{2.8}$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \tag{2.9}$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1 \tag{2.10}$$

Para construir explícitamente α_i , β , se analizaran las propiedades que deben de cumplir:

Ya que H_D debe ser hermitiano las matrices lo deben de ser. Como $\alpha_i^2 = \beta^2 = 1$, los valores propios de α_i y β son ± 1 . Como la traza de una matriz es la suma de los valores propios entonces se puede saber que la dimensión de las matrices α_i y β es par. La menor dimensión par es N = 2, pero con esta dimensión solo se puede acomodar tres condiciones de anticonmutación. Por lo que la menor dimensión posible de las matrices α_i y β es N = 4. En particular la representación explicita de α_i y β es :

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$
(2.11)

donde σ_i son las matrices de Pauli de 2 × 2 y 1 es la matriz unidad de 2 × 2. Si se multiplica por la izquierda la ecuación de Dirac (2.5) por β e introduciendo la notación

$$\gamma^0 = \beta \qquad \gamma^i = \beta \alpha_i \tag{2.12}$$

la ecuación de Dirac queda como:

$$i\hbar c \left(\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + \gamma^1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \gamma^2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \gamma^3 \frac{\partial}{\partial x^3}\right) \Psi - mc^2 \mathbb{1}\Psi = 0.$$
(2.13)

Las matrices γ^{μ} proveen una relación de anticonmutación (2.14) mas elegante

$$\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu} = 2g^{\mu\nu} \tag{2.14}$$

Los índices latinos como i, j, k etiquetan a las coordenadas espaciales, (1, 2, 3), mientras que los índices griegos como μ, ν se utilizaran para coordenadas espacio-temporales (0, 1, 2, 3) puede escribir la ecuación de Dirac de forma covariante:

$$(c\gamma^{\mu}\hat{\mathbf{p}}_{\mu} - \mathbb{1}mc^2)\Psi = 0, \qquad (2.15)$$

donde el cuadrivector de momento $\hat{\mathbf{p}}_{\mu}$ en forma covariante es $\hat{\mathbf{p}}_{\mu} = (\hat{E}/c^2, p_x, p_y, p_z)$, y las matrices γ^{μ} son las denominadas matrices de Dirac que tiene que satisfacer el anticonmutador (2.14). Cuando se introduce una interacción electrómagnetica en el límite no relativista se reduce a la ecuación de Pauli. Lo cual nos muestra que la ecuación de Dirac es buena descripción para un fermión relativista, ver Apéndice C. Una manera estándar de representar las matrices de Dirac es con la representación de Dirac-Pauli:

$$\gamma^{0} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0\\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \qquad \gamma^{i} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^{i}\\ -\sigma^{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad (2.16)$$

Para resolver la ecuación de Dirac (2.15) se puede proponer la solución estacionaria

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{\frac{-iEt}{\hbar}},$$

resultando, con la ayuda de (2.1), en

$$\left(\frac{E\gamma^0}{c} - c\gamma^k \hat{\mathbf{p}}_k - mc^2\right)\psi = 0.$$
(2.17)

Separando a la función de onda en dos bi-espinores de dos componentes cada uno,

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \varphi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}; \quad \chi = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$
(2.18)

Y utilizando la representación (2.16) de las matrices γ la ecuación (2.17) escrita en forma matricial explícitamente es:

$$E\begin{pmatrix}\varphi\\-\chi\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&c\sigma\\-c\sigma&0\end{pmatrix}\cdot\hat{\mathbf{p}}\begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix}-mc^{2}\begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix}=0,$$

que se reduce a:

$$\begin{pmatrix} E - mc^2 & -c\sigma \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ c\sigma \cdot \hat{\mathbf{p}} & -E - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 0,$$

de tal forma que se obtiene un sistema de dos ecuaciones acopladas para φ , χ debido a que existen términos matriciales no diagonales.

$$E\varphi = c\sigma \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi + mc^2\varphi,$$

$$E\chi = c\sigma \cdot \hat{\mathbf{p}}\varphi - mc^2\chi.$$
(2.19)

Proponiendo a los espinores solución como:

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\vec{x}}.$$
 (2.20)

Y sustituyendo en (2.19) con la ayuda de (2.1) se obtiene el siguiente sistema de dos ecuaciones acopladas:

$$\begin{array}{rcl} (E - mc^2) & \varphi_0 & - & c\sigma \cdot \mathbf{p} & \chi_0 & = & 0 \\ -c\sigma \cdot \mathbf{p} & \varphi_0 & + & (E + mc^2) & \chi_0 & = & 0 \end{array}$$

Como este sistema tiene soluciones no triviales, entonces el determinante del sistema debe anularse,

$$\begin{vmatrix} \mathbb{1}(E - mc^2) & -c\sigma \cdot \mathbf{p} \\ -c\sigma \cdot \mathbf{p} & \mathbb{1}(E + mc^2) \end{vmatrix} = 0,$$

es decir, se debe de cumplir con la relación relativista de momento-energía:

$$\mathbb{1}E^2 = \mathbb{1}(m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2).$$

De aquí:

$$E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2} = \lambda E_p, \qquad (2.22)$$

donde E_p representa la energía de una partícula con momento \vec{p} , mientras que $\lambda = \pm 1$.

De la ecuación (2.21) del sistema se obtiene χ_0 como:

$$\chi_0 = \frac{c\sigma \cdot \mathbf{p}}{mc^2 + \lambda E}\varphi_0$$

Si denotamos al espinor φ_0 en términos de dos funciones escalares U_1, U_2 como:

$$\varphi_0 = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix}, \qquad \qquad \varphi_0^{\dagger} = \begin{pmatrix} U_1^* & U_2^* \end{pmatrix},$$

donde estas últimas cumplen la regla de normalización: $\varphi_0^{\dagger}\varphi = U_1^*U_1 + U_2^*U_2 = 1$, entonces la función de onda $\Psi_{p,\lambda}(x,t)$ solución de la ecuación de Dirac es:

$$\Psi_{p,\lambda}(x,t) = N\left(\begin{array}{c}\varphi_0\\\frac{\sigma \cdot \mathbf{p}}{m+\lambda E_p}\varphi_0\end{array}\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\vec{x}-\lambda E_p)},$$

con $\lambda=\pm 1$ según sea la energía positiva ó negativa. Para obtenerNutilicemos la condición de normalización

$$\int \psi_{p,\lambda}^{\dagger} \psi_{p,\lambda} d^3 x = \delta_{\lambda\lambda'} (p - p'),$$

entonces,

$$N^2 \left(\varphi_0^{\dagger} \varphi_0 + \varphi_0^{\dagger} \frac{(c\sigma \cdot \mathbf{p})(c\sigma \cdot \mathbf{p})}{(mc^2 + \lambda E_p)^2} \varphi_0 \right) = 1.$$

Recordando la relación entre las matrices de Pauli

$$(\sigma \cdot \vec{A})(\sigma \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\sigma \cdot \vec{A} \times \vec{B}, \qquad (2.23)$$

con \vec{A} y \vec{B} vectores arbitrarios, entonces $(\sigma \cdot \hat{\mathbf{p}})(\sigma \cdot \hat{\mathbf{p}}) = \mathbf{p}^2$ y la constante N de normalización es:

$$N = \sqrt{\frac{mc^2 + \lambda E_p}{2\lambda E_p}}.$$
(2.24)

Observemos que las funciones propias antes obtenidas son también funciones propias del momento $\hat{\mathbf{p}}\psi_{p,\lambda} = \mathbf{p}\psi_{p,\lambda}$. Para cada valor del operador de momento \mathbf{p} existen dos tipos de energía posibles E_p y $-E_p$ asociadas a $\lambda = \pm 1$.

La parte espinorial de la función de onda está contenida en φ_0 . Definiendo el operador de espín \hat{S} como

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma \otimes \mathbb{1}.$$

Al operador que proyecta al espín a lo largo de la dirección del momento lineal se le denomina operador de helicidad:

$$\hat{\Lambda}_s = \frac{\hat{S} \cdot \hat{p}}{\hbar ||p||}.$$

El conmutador $[\hat{H}_f, \hat{\Lambda}_s]$ se anula, por lo que la proyección del espín sobre la dirección de movimiento adquiere valor de constante de movimiento.

Considerando a un electrón que se desplaza en dirección z, por lo que su momento es $\vec{p} = (0, 0, p), ||p|| = p$, su operador de helicidad será:

$$\hat{\Lambda}_s = \frac{\hat{S} \cdot \vec{p}}{\hbar p} = \frac{\hat{S}_z p_z}{\hbar p} = \frac{p\hbar}{2\hbar p} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0\\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Los valores propios para este operador \hat{S}_z son $s = \pm \frac{\hbar}{2}$:

$$\hat{S}_z \Psi_s = \pm \frac{\hbar}{2} \Psi_s, \qquad (2.25)$$

y los vectores propios son:

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1\\0\\0\\0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0\\1\\0\\0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0\\0\\1\\0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0\\0\\1\\0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0\\0\\0\\1 \end{pmatrix} \right\}.$$
(2.26)

Proponiendo a dos espinores de dos componentes u y u_{-1} , de la siguiente manera:

$$u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 $y \quad u_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$,

entonces los vectores propios de la ecuación (2.25) se pueden escribir como:

$$\left(\begin{array}{c} u\\0\end{array}\right), \left(\begin{array}{c} u_{-1}\\0\end{array}\right), \left(\begin{array}{c} 0\\u\end{array}\right), \left(\begin{array}{c} 0\\u_{-1}\end{array}\right).$$

Finalmente la solución de la ecuación de Dirac en (3+1)D de la partícula libre propagándose en dirección z con momento \vec{p} es

$$\begin{split} \psi_{p,\lambda,\frac{1}{2}} &= N \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{c\sigma \cdot \mathbf{p}}{mc^2 + \lambda E_p} \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pz - \lambda E_p t)}, \\ \psi_{p,\lambda,-\frac{1}{2}} &= N \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix} \\ \frac{c\sigma \cdot \mathbf{p}}{mc^2 + \lambda E_p} \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pz - \lambda E_p t)}, \end{split}$$

con N dada por la ecuación (2.24).

Identificando cada solución con sus respectivos números cuánticos λ, s como $\lambda = 1$ para partículas y $\lambda = -1$ para antipartículas; $s = \frac{1}{2}$ espín para arriba y $s = -\frac{1}{2}$ espín abajo, se

tienen los espinores como soluciones independientes:

$$\begin{split} \psi_{p,1,\frac{1}{2}} &= N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c\sigma \cdot \mathbf{p}}{mc^2 + E_p} \\ 0 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pz - E_p t)} &= \psi_1 \left(p, 1, \frac{1}{2} \right) \\ \psi_{p,1,-\frac{1}{2}} &= N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{c\sigma \cdot \mathbf{p}}{mc^2 + E_p} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pz - E_p t)} &= \psi_2 \left(p, 1, -\frac{1}{2} \right) \\ \psi_{p,-1,\frac{1}{2}} &= N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c\sigma \cdot \mathbf{p}}{mc^2 - E_p} \\ 0 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pz + E_p t)} &= \psi_3 \left(p, -1, \frac{1}{2} \right) \\ \psi_{p,-1,-\frac{1}{2}} &= N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{c\sigma \cdot \mathbf{p}}{mc^2 - E_p} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pz + E_p t)} &= \psi_4 \left(p, -1, -\frac{1}{2} \right) \end{split}$$

Si en las funciones $\psi_3(p, -1, \frac{1}{2})$ y $\psi_4(p, -1, -\frac{1}{2})$ soluciones de partícula con energía negativa, se reemplaza $p \to -p$ y $\lambda = -1 \to \lambda = 1$, entonces se obtienen la soluciones de antipartículas con energía positiva y con espín arriba y espín abajo respectivamente.

2.2. Partícula libre en (2+1)D

Para el caso de la ecuación de Dirac en (2+1)D, el conjunto de matrices γ que cumplen la relación de anticonmutación $\{\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}\} = 2g^{\mu\nu}$ se reduce, ya que solo son necesarias tres matrices y la dimensión de dichas matrices es 2×2 , por lo que pueden ser representadas por medio de las matrices de Pauli.

Se utilizan las representaciones inequivalentes denominadas A, B de las matrices de Dirac [6], expresadas como:

$$A: \qquad \gamma^0 = \sigma^3, \qquad \gamma^1 = i\sigma^1, \qquad \gamma^2 = i\sigma^2, \qquad (2.27)$$

$$B: \qquad \gamma^0 = \sigma^3, \qquad \gamma^1 = \sigma^1, \qquad \gamma^2 = -i\sigma^2. \tag{2.28}$$

Cuando las representaciones son matemáticamente equivalentes, lo que significa es que ambas tienen la misma información del sistema. Pero cuando las representaciones son matemáticamente inequivalentes, no se puede obtener una con transformaciones elementales de la otra. Físicamente esto quiere decir que la información de cada una es diferente. También podemos verificar que el producto $\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}$ cambia dependiendo de la representación tomada:

$$A: \gamma^{\mu}\gamma^{\nu} = g^{\mu\nu} - i\varepsilon^{\mu\nu\alpha}\gamma^{\alpha}, \qquad (2.29)$$

$$B:\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} = g^{\mu\nu} + i\varepsilon^{\mu\nu\alpha}\gamma^{\alpha}, \qquad (2.30)$$

con $\mu, \nu = 0, 1, 2.$

La ecuación de Dirac para partícula libre con $m \neq 0$ en (2+1)D es:

$$(c\gamma^{\mu}\hat{\mathbf{p}}_{\mu} - \mathbb{1}mc^2)\Psi = 0, \qquad (2.31)$$

en donde 1 es la matriz unidad de 2×2 .

Se observa cómo la diferencia en las representaciones A y B es un signo menos en la matriz γ^2 , como consecuencia cambia el signo en la componente p_2 del momento en la ecuación de Dirac cuando cambia de representación.

La solución de la ecuación (2.31) para partícula libre con momento $\vec{p} = (p_1, p_2)$ y energía *E*, es de la forma:

$$\Psi = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{x} \cdot \vec{p})} \begin{pmatrix} \Psi_1(x, y) \\ \Psi_2(x, y) \end{pmatrix}, \qquad (2.32)$$

donde $\Psi_1(x, y)$ y $\Psi_2(x, y)$ son las dos componentes del espinor en este caso, funciones escalares. En las siguientes secciones se estudiará cada representación por separado.

2.2.1. Representación irreducible A

Sustituyendo la ecuación (2.32) en (2.31) con la primera representación irreducible A de las matrices de Dirac descrita por (2.29), el Hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H}_A = \begin{pmatrix} mc^2 & c(\hat{\mathbf{p}}_2 + i\hat{\mathbf{p}}_1) \\ c(\hat{\mathbf{p}}_2 - i\hat{\mathbf{p}}_1) & -mc^2 \end{pmatrix}.$$
(2.33)

Entonces la ecuación matricial a resolver es

$$\begin{pmatrix} E - mc^2 & -c(\hat{\mathbf{p}}_2 + i\hat{\mathbf{p}}_1) \\ c(\hat{\mathbf{p}}_2 - i\hat{\mathbf{p}}_1) & -(E + mc^2) \end{pmatrix} \Psi^A = 0, \qquad (2.34)$$

con Ψ^A la solución en la representación A

$$\Psi^A = \left(\begin{array}{c} \Psi_1^A \\ \Psi_2^A \end{array}\right)$$

sustituyendo la ecuación (2.32) en (2.34) resulta un sistema de ecuaciones acopladas para Ψ^A ,

$$(E - mc^2)\Psi_1^A - c(p_2 + ip_1)\Psi_2^A = 0, \qquad (2.35)$$

$$c(p_2 - ip_1)\Psi_1^A - (E + mc^2)\Psi_2^A = 0. (2.36)$$

Al hacer el determinante igual a cero de la matriz (2.34) para tener soluciones no triviales resulta

$$E^2 = \mathbf{\hat{p}}^2 c^2 + m^2 c^4,$$

la relación de energía-momento.

Si en el sistema de ecuaciones (2.35) y (2.36) que es un sistema que se encuentra acoplado, se supone que $\Psi_1^A = 1$, al sustituir en la ecuación (2.36) se obtiene Ψ_2^A :

$$\Psi_2^A = \frac{c(p_2 - ip_1)}{E + mc^2}$$

Y si hacemos $\Psi_2^A=1,$ de la ecuación (2.35) obtenemos Ψ_1^A :

$$\Psi_1^A = \frac{c(p_2 + ip_1)}{E - mc^2}.$$

Por lo que ya hemos encontrado las soluciones para la partícula libre en la representación irreducible A de las matrices de Dirac:

$$\begin{pmatrix} 1\\ \frac{c(p_2-p_1)}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} \frac{c(p_2+ip_1)}{E-mc^2}\\ 1 \end{pmatrix}.$$
(2.37)

La segunda solución corresponde a la solución de partícula con energía negativa, pero si reemplazamos $\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$ y $E \to -E$ tendremos una solución de antipartícula con energía positiva.

El operador de espín \hat{S} en (2+1)D, es decir,

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\sigma,\tag{2.38}$$

cuyos valores propios son $\sigma = \pm \frac{\hbar}{2}$

$$\sigma^3 \chi = \pm \frac{\hbar}{2} \sigma \chi, \tag{2.39}$$

con los vectores propios,

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi_2 = \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}.$$
(2.40)

en el plano tiene una interpretación la cual depende del valor propio: si el valor propio es $\frac{\hbar}{2}$ es un espín girando en el sentido de las manecillas del reloj, al cual le llamaremos espín arriba; mientras que con un valor propio $-\frac{1}{2}$ un espín girando en dirección contraria a las manecillas del reloj, espín abajo.

Y entonces podemos asociar a cada solución de la ecuación (2.41) un valor propio de espín determinado:

$$\begin{pmatrix} 1\\ \frac{c(p_2-p_1)}{E+mc^2} \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} \frac{c(p_2+ip_1)}{E-mc^2}\\ 1 \end{pmatrix}$$
(2.41)

Partícula espín arriba.

Antipartícula espín abajo.

2.2.2. Representación irreducible B

La diferencia entre las dos representaciones irreducibles de las matrices de Dirac A y B, es un cambio de signo frente a la matriz γ^2 , que como ya antes se mencionó se refleja en un cambio de signo en la componente del momento $\hat{\mathbf{p}}_2$ en la ecuación de Dirac, es por eso que la ecuación (2.31) en la representación B nos arroja el Hamiltoniano:

$$\hat{H}_B = \begin{pmatrix} mc^2 & -c(\hat{\mathbf{p}}_2 - i\hat{\mathbf{p}}_1) \\ -c(\hat{\mathbf{p}}_2 + i\hat{\mathbf{p}}_1) & -mc^2 \end{pmatrix}.$$
(2.42)

El sistema de ecuaciones acopladas para por las componentes Ψ_1^B y Ψ_2^B del espinor Ψ^B solución de la ecuación de Dirac en la representación irreducible B es:

$$(E - mc^2)\Psi_1^B + c(p_2 - ip_1)\Psi_2^B = 0, (2.43)$$

$$-c(p_2 + ip_1)\Psi_1^B - (E + mc^2)\Psi_2^B = 0, \qquad (2.44)$$

y de igual manera que al utilizar la representación irreducible A, obtenemos las soluciones igualando cada componente a uno y obteniendo la otra, resultando para Ψ_B :

$$\begin{pmatrix} 1\\ -\frac{c(p_2+ip_1)}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} \frac{-c(p_2-ip_1)}{E-mc^2}\\ 1 \end{pmatrix}$$
(2.45)

El segundo espinor de la ecuación (2.46) corresponde a una solución de partícula con energía negativa, pero si reemplazamos $\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$ y $E \to -E$ tendremos la solución de antipartícula con energía positiva. De igual forma que en la representación A se determina cada valor del espín:

$$\begin{pmatrix} 1\\ -\frac{c(p_2+ip_1)}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} \frac{-c(p_2-ip_1)}{E+mc^2}\\ 1 \end{pmatrix}$$
(2.46)

Partícula espín abajo.

Antipartícula espín arriba.

2.2.3. Representación reducible

Si bien la dimensión mínima que se necesita para construir las matrices γ en (2+1)D es 2×2 , se pueden usar matrices de mayor dimensión para resolver la ecuación de Dirac. En particular se puede usar una representación reducible de matrices de 4×4 definida como:

$$\gamma^{0} = \begin{pmatrix} \sigma^{3} & 0\\ 0 & -\sigma^{3} \end{pmatrix}, \qquad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} i\vec{\sigma} & 0\\ 0 & -i\vec{\sigma} \end{pmatrix}, \qquad (2.47)$$

donde $\vec{\gamma}$ contiene componentes γ_1 y γ_2 únicamente. Partiendo de la ecuación de Dirac en el espacio de momentos y descomponiendo el espinor de 4 componentes en espinores de dos componentes u_A y u_B se llega al sistema de ecuaciones:

$$(\sigma^{3}E - i(\sigma^{1}p_{1} + \sigma^{2}p_{2}) - m)u_{A}(p) = 0,$$

$$(-\sigma^{3}E + i(\sigma^{1}p_{1} + \sigma^{2}p_{2}) - m)u_{B}(p) = 0.$$

Es importante notar que en este caso, a diferencia de (3 + 1)D, las ecuaciones no se encuentran acopladas. Si se escribe

$$u_A = \begin{pmatrix} u_{A_1}(p, E) \\ u_{A_2}(p, E) \end{pmatrix}, \qquad u_B = \begin{pmatrix} u_{B_1}(p, E) \\ u_{B_2}(p, E) \end{pmatrix},$$

se obtiene el sistema de ecuaciones:

$$\begin{array}{rcrcrcr} (E-m)u_{A_1}(p,E) & - & (p_2+ip_1)u_{A_2}(p,E) & = & 0, \\ (p_2-ip_1)u_{A_1}(p,E) & - & (E+m)u_{A_2}(p,E) & = & 0, \\ -(E+m)u_{B_1}(p,E) & + & (p_2+ip_1)u_{B_2}(p,E) & = & 0, \\ -(p_2-p_1)u_{B_1}(p,E) & + & (E-m)u_{B_2}(p,E) & = & 0. \end{array}$$

Por lo que se pueden encontrar cuatro soluciones linealmente independientes:

$$\begin{split} \psi_1(x) &= \begin{pmatrix} 1\\ \frac{p_2 - ip_1}{E+m} \\ 0\\ 0 \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = \begin{pmatrix} u_{A_1}(p, E) \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_1(p)e^{-ip \cdot x}, \\ \psi_2(x) &= \begin{pmatrix} \frac{p_2 + ip_1}{E-m} \\ 1\\ 0\\ 0 \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = \begin{pmatrix} u_{A_2}(p, E) \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_2(p)e^{-ip \cdot x}, \\ \psi_3(x) &= \begin{pmatrix} 0\\ 1\\ \frac{p_2 - ip_1}{E-m} \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = \begin{pmatrix} 0\\ u_{B_1}(p, E) \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_3(p)e^{-ip \cdot x}, \\ \psi_4(x) &= \begin{pmatrix} 0\\ 0\\ \frac{p_2 + ip_1}{E+m} \\ 1 \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = \begin{pmatrix} 0\\ u_{B_2}(p, E) \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_4(p)e^{-ip \cdot x}. \end{split}$$

Por la forma no acoplada de las soluciones, podemos unir soluciones de energía positiva y negativa de la siguiente manera:

$$\psi_P(x) = \begin{pmatrix} 1\\ \frac{p_2 - ip_1}{E+m}\\ \frac{p_2 + ip_1}{E+m}\\ 1 \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = \begin{pmatrix} u_{A_1}(p, E)\\ u_{B_2}(p, E) \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x},$$

$$\psi_N(x) = \begin{pmatrix} \frac{p_2 + ip_1}{E-m}\\ 1\\ \frac{1}{\frac{p_2 - ip_1}{E-m}} \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = \begin{pmatrix} u_{A_2}(p, E)\\ u_{B_1}(p, E) \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x},$$
(2.48)

donde los índices P y N indican que se trata de soluciones de energía positiva y negativa respectivamente. Si en las soluciones de energía negativa se cambia $p \rightarrow -p$ y $E \rightarrow -E$ se obtienen los estados de antipartículas con energía positiva:

$$\psi_P(x) = \begin{pmatrix} 1\\ \frac{p_2 - ip_1}{E+m}\\ \frac{p_2 + ip_1}{E+m} \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = \begin{pmatrix} u_{A_1}(p, E)\\ u_{B_2}(p, E) \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x}, \qquad (2.49)$$
$$\psi_N(x) = \begin{pmatrix} \frac{p_2 + ip_1}{E+m}\\ 1\\ \frac{1}{\frac{p_2 - ip_1}{E+m}} \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = \begin{pmatrix} u_{A_2}(p, E)\\ u_{B_1}(p, E) \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x}.$$

2.2.4. Campo magnético en (2+1)D

Cuando se introduce campo magnético en la ecuación de Dirac se utiliza la sustitución mínima

$$\hat{\mathbf{p}}^{\mu} \to \hat{\mathbf{p}}^{\mu} + \frac{e}{c} \hat{A}^{\mu}, \qquad (2.50)$$

donde \vec{A} es el potencial vectorial que en (2+1)D tiene la forma $\hat{A} = (\phi, A_1, A_2)$ y siendo ϕ el potencial eléctrico. Para mayor facilidad se denotará al momento generalizado como $\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\hat{A} = \hat{\pi}$. Por lo que la ecuación (2.31) queda:

$$(c\gamma^{\mu}\hat{\pi}_{\mu} - mc^2\mathbb{1})\Psi = 0. \tag{2.51}$$

Multiplicando la ecuación (2.51) por γ^0 por el lado izquierdo

$$\gamma^0 (c\gamma^\mu \hat{\pi}_\mu - mc^2 \mathbb{1})\Psi = 0, \qquad (2.52)$$

y utilizando la relación (2.29) para expresar el producto de dos matrices de Dirac (en la representación A) la ecuación (2.52) es:

$$\mathbb{1}E\Psi = (ic\gamma^1\hat{\pi}_2 - ic\gamma^2\hat{\pi}_1 + \gamma^0 mc^2)\Psi,$$

por lo que el Hamiltoniano de Dirac, en forma matricial corresponde a

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} mc^2 & c(\hat{\pi}_2 + i\hat{\pi}_1) \\ c(\hat{\pi}_2 - i\hat{\pi}_1) & -mc^2 \end{pmatrix}.$$

Se observa que \hat{H} acopla las componentes del espinor. Pero \hat{H}^2 es diagonal y no acopla las componentes:

$$\hat{H}^{2} = \begin{pmatrix} m^{2}c^{4} + c^{2}(\hat{\pi}_{2} - i\hat{\pi}_{1})(\hat{\pi}_{2} + i\hat{\pi}_{1}) & 0\\ 0 & m^{2}c^{4} + c^{2}(\hat{\pi}_{2} + i\hat{\pi}_{1})(\hat{\pi}_{2} - i\hat{\pi}_{1}) \end{pmatrix}.$$
 (2.53)

$$\hat{H}^2 \psi = \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E\hat{H}\psi = E^2\psi$$
 (2.54)

Obsérvese que las funciones propias del Hamiltoniano \hat{H} son también funciones propias de \hat{H}^2 ; los cuadrados de los valores propios de \hat{H} son los valores propios de \hat{H}^2 :

Siguiendo en la representación A y haciendo $\vec{\pi} = \hat{\pi}_2 + i\hat{\pi}_1$ observamos que en la ecuación (2.53) las componentes son las mismas y son $m^2c^4 + c^2\vec{\pi}^2$. Por lo que podemos resolver una sola componente, manteniendo la parte espinorial en los vectores propios del operador de espín (2.38). Los valores propios son $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ y los vectores propios son los mostrados en la ecuación (2.40).

Podemos observar como para el caso de partícula libre $\hat{A} = 0$ y $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}}, \hat{\pi}^2 = \hat{\mathbf{p}}^2$, pero en el caso general de introducir un campo magnético es:

$$|\vec{\pi}|^2 = \vec{\pi}^* \vec{\pi} = \vec{\pi} \vec{\pi}^* = \pi^2 + \frac{\sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}}{2},$$

donde $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}]$ y $iF_{\mu\nu} = [\hat{\pi}_{\mu}, \hat{\pi}_{\nu}]$ el tensor de campo electromagnético.

Por lo que el cuadrado de la ecuación de Dirac en (2+1)D para el caso de una partícula masiva en presencia de un campo magnético arbitrario, se puede resolver considerando solo la siguiente ecuación escalar incluyendo la parte espinorial en el valor propio del operador de espín σ que surgirá del tensor $\sigma^{\mu\nu}$ (por ejemplo $\sigma^{12} = \sigma^3$),

$$\left(m^2 c^4 + c^2 \hat{\pi}^2 + \frac{c^2 \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}}{2}\right) \psi = E^2 \psi.$$
(2.55)
Capítulo 3

Supersimetría en la Mecánica Cuántica

En este capítulo se presenta el formalismo de la supersimetría en la Mecánica Cuántica (SUSY).

Cuando se logra establecer una relación de supersimetría entre dos sistemas cuánticos es posible conocer los espectros de energías de ambos sistemas con solo saber el de uno de ellos, es por ello que en los últimos años SUSY ha marcado una pauta importante sirviendo como una fuerte herramienta dentro de la física teórica moderna.

Para algunas configuraciones de campo magnético la SUSY permite mapear las soluciones de la ecuación de Dirac, a un problema no relativista con soluciones exactas.

A continuación se presentan los elementos básicos de SUSY para posteriormente aplicarlos al sistema cuántico que se estudia en este trabajo de tesis. El estudio de la simetría en la naturaleza ha sido, desde la antigüedad, un tema de gran interés debido a que mientras más simétrico sea un sistema, más podrá ser simplificado. En el estricto propósito de la mecánica cuántica, las simetrías con frecuencia arrojan niveles de energías degenerados, es decir, que a más de un estado cuántico le corresponde la misma energía.

La supersimetría es uno de los más intrigantes y fundamentales conceptos de la teoría de la física de partículas.

En mecánica cuántica, se establece un álgebra de operadores con relaciones de conmutación, como por ejemplo los operadores canónicos de posición y momento $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{x}] = i\hbar$ ó el álgebra de los operadores de momento angular, por mencionar algunos. El álgebra involucrada en SUSY es una clase de álgebra de Lie formada de relaciones de conmutación y anticonmutación. Cuando se establecen relaciones para un conjunto de operadores que cumplan ambas reglas, es decir, tanto la regla de anticonmutación como de conmutación se dice que dicho conjunto de operadores forma una superálgebra.

En mecánica cuántica a un Hamiltoniano \mathcal{H} y a un conjunto de N operadores autoadjuntos Q_i se le llama un sistema supersimétrico [7], si cumplen con las siguientes relaciones de anticonmutación

$$\{Q_i, Q_j\} = \mathcal{H}\delta_{ij}, \qquad i, j = 1, 2, ..., N \qquad [Q_i, \mathcal{H}] = 0.$$
 (3.1)

Cuando el álgebra anterior se satisface nombramos a Q_i como las supercargas del sistema y \mathcal{H} es el Hamiltoniano supersimétrico. Un álgebra SUSY es caracterizada por el número de supercargas denotadas por N. El caso más simple es N = 2, el cual fue introducido por Witten en 1981 [8]. Este modelo describe grados de libertad cartesianos a los cuales se le agrega un grado de libertad extra debido al espín.

3.1. Potenciales compañeros SUSY

Considérese el Hamiltoniano de una partícula de masa m en una dimensión en la mecánica cuántica no relativista descrita por la ecuación de Schrödinger

$$H_1\psi^{(1)} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} + V_1(x)\psi^{(1)} = E_n^{(1)}\psi^{(1)}$$

Conociendo el perfil de $V_1(x)$ se pueden calcular los estados ligados y/o los estados de dispersión del sistema. Así mismo se puede especificar la función de onda del estado base $\psi_0^{(1)}(x)$, (la cual no tiene nodos y se anula en $x = \pm \infty$). Sin pérdida de generalidad se puede escoger el nivel de energía del estado base $E_0^{(1)}$ de H_1 como cero, $E_0^1 = 0$. Entonces la ecuación de Schrödinger para la función de onda del estado base $\psi_0^{(1)}(x)$ es:

$$H_1\psi_0^{(1)}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_0^{(1)}(x)}{dx^2} + V_1(x)\psi_0^{(1)}(x) = 0.$$
(3.2)

Esto permite determinar el potencial $V_1(x)$ conociendo la función de onda del estado base de la siguiente forma:

$$V_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial_x \psi_0^{(1)}(x)}{\psi_0^{(1)}(x)}.$$
(3.3)

Obsérvese que el Hamiltoniano del sistema, H_1 , se puede factorizar como el producto de dos operadores,

$$H_1 = L^{\dagger}L, \tag{3.4}$$

 donde

$$L = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x + W(x), \qquad L^{\dagger} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x + W(x). \tag{3.5}$$

La función W(x) es conocida en la literatura como superpotencial y se relaciona con el potencial $V_1(x)$ de la siguiente manera:

$$V_1(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \partial_x W(x).$$
(3.6)

La ecuación (3.6) es una ecuación de Riccati, cuya solución, en términos de la función de onda del estado base, es la siguiente:

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\partial_x \psi_0^{(1)}(x)}{\psi_0^{(1)}(x)}.$$
(3.7)

Esta solución es obtenida reconociendo que se cumple $L\psi_0^{(1)} = 0$, ya que se escogió la energía del estado base en cero, es decir, $H_1\psi_0^{(1)} = E_0^1\psi_0^{(1)} = 0\psi_0^{(1)} = 0$.

Como siguiente paso para construir una teoría SUSY, se define un nuevo Hamiltoniano ${\cal H}_2$

$$H_2 = LL^{\dagger}$$

que se relaciona con el Hamiltoniano original H_1 al invertir el orden de los operadores $L \ge L^{\dagger}$ en la ecuación (3.4). Se puede mostrar que efectivamente el operador H_2 es el Hamiltoniano de un sistema con potencial $V_2(x)$:

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x), \qquad (3.8)$$

$$V_2(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \partial_x W(x).$$
(3.9)

Los potenciales $V_1(x)$ y $V_2(x)$ son conocidos como potenciales compañeros supersimétricos.

Los valores propios de la energía, las funciones de onda y las matrices H_1 y H_2 están relacionados. Representemos por $E_n^{(1,2)}$ el espectro de energía de cada Hamiltoniano H_1 y H_2 , en donde el superíndice muestra el Hamiltoniano al que pertenecen, y n > 0 es el nivel de energía. La ecuación de Schrödinger para H_1 es

$$H_1\psi_n^{(1)} = L^{\dagger}L\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}\psi_n^{(1)}, \qquad (3.10)$$

multiplicando por la izquierda por L

$$LH_1\psi_n^{(1)} = LL^{\dagger}L\psi_n^{(1)} = H_2(L\psi_n^{(1)}) = E_n^{(1)}(L\psi_n^{(1)})$$
(3.11)

Similar para el sistema de H_2 :

$$H_2\psi_n^{(2)} = LL^{\dagger}\psi_n^{(2)} = E_n^{(2)}\psi_n^{(2)}, \qquad (3.12)$$

multiplicando por la izquierda por L^{\dagger}

$$L^{\dagger}H_{2}\psi_{n}^{(2)} = L^{\dagger}LL^{\dagger}\psi_{n}^{(2)} = H_{1}(L^{\dagger}\psi_{n}^{(2)}) = E_{n}^{(2)}(L^{\dagger}\psi_{n}^{(2)}).$$
(3.13)

Con las ecuaciones (3.10), (3.11), (3.12) y (3.13) y dada le elección $E_0^{(1)} = 0$, se pueden obtener los valores y funciones propias de ambos Hamiltonianos H_1 y H_2 lo cuales están relacionados mediante (n = 0, 1, 2, ...)

$$E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)}, \qquad E_0^{(1)} = 0, \qquad (3.14)$$

$$\psi_n^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(1)}}} L \psi_{n+1}^{(1)}, \qquad (3.15)$$

$$\psi_{n+1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(2)}}} L^{\dagger} \psi_n^{(2)}.$$
(3.16)

Los operadores L y L^{\dagger} no solo permiten convertir una función propia de H_1 (H_2) en una función propia de H_2 (H_1) , con la misma energía, también pueden destruir y crear un nodo en las funciones propias del Hamiltoniano compañero.

De esta manera con H_1 y H_2 se puede considerar un Hamiltoniano SUSY de la forma:

$$\mathcal{H} = \left(\begin{array}{cc} H_1 & 0\\ 0 & H_2 \end{array}\right). \tag{3.17}$$

Así conociendo el espectro de $H_1(H_2)$, será posible conocer el espectro de $H_2(H_1)$ si ambos son compañeros SUSY.

3.2. Propiedades SUSY en N=2

En esta sección se muestra el caso de SUSY en la mecánica cuántica con N = 2. De la definición de SUSY dada por la ecuación (3.1) se tienen dos supercargas Q_1, Q_2

$$Q_1 = Q_1^{\dagger} \qquad \text{y} \qquad Q_2 = Q_2^{\dagger}.$$

De (3.1) se siguen las siguientes relaciones

$$Q_1 Q_2 = -Q_2 Q_1, \qquad \mathcal{H} = 2Q_1^2 = 2Q_2^2 = Q_1^2 + Q_2^2.$$
 (3.18)

Introduciendo las supercargas complejas que definen al Hamiltoniano SUSY \mathcal{H} :

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_1 + iQ_2), \qquad Q^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_1 - iQ_2).$$
(3.19)

Usando estos operadores junto con el Hamiltoniano \mathcal{H} se obtiene la siguiente superálgebra.

$$Q^{2} = 0 = (Q^{\dagger})^{2}, \qquad \{Q, Q^{\dagger}\} = \mathcal{H}, \qquad [Q, \mathcal{H}] \qquad \text{y} \qquad [Q^{\dagger}, \mathcal{H}].$$
(3.20)

Proponiendo los operadores $Q \ge Q^{\dagger}$ de la siguiente manera

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ L & 0 \end{pmatrix}, \qquad \qquad Q^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & L^{\dagger} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (3.21)$$

con L y L^{\dagger} dados por (3.5), \mathcal{H} se puede expresar en forma de una matriz diagonal

$$\mathcal{H} = \{Q, Q^{\dagger}\} = \begin{pmatrix} 0 & 0\\ 0 & LL^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} L^*L & 0\\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(3.22)

comparando a (3.22) con (3.17) se identifican los dos Hamiltonianos compañeros SUSY como

$$H_1 = L^{\dagger}L$$
 y $H_2 = LL^{\dagger}$

Es posible escribir Q y Q^{\dagger} en términos de las matrices de Pauli definiendo

$$\sigma^{+} = \frac{1}{2} \left(\sigma^{1} + i \sigma^{2} \right) = \left(\begin{array}{c} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{array} \right), \ \sigma^{-} = \frac{1}{2} \left(\sigma^{1} - i \sigma^{2} \right) = \left(\begin{array}{c} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{array} \right), \tag{3.23}$$

por lo que las supercargas son de esta siguiente manera

$$Q = \sigma^- \otimes L$$
 y $Q^\dagger = \sigma^+ \otimes L^*$ (3.24)

Obsérvese que H_1 y H_2 comparten el mismo espectro salvo el estado base,(ver (3.14)), esto se refleja en el hecho de que las supercargas Q, Q^{\dagger} conmuten con \mathcal{H} .

3.3. Carácter SUSY del \hat{H} de Dirac

En esta sección se estudiará el aspecto SUSY del Hamiltoniano de Dirac \hat{H}_D , para el caso particular de masa cero, sin embargo un tratamiento similar se puede usar para el caso masivo [9].

Si se logran encontrar operadores Q y Q^{\dagger} tales que \hat{H}_D se puede expresar en la forma

$$\hat{H}_D = Q + Q^{\dagger}, \qquad (3.25)$$

con $Q^2 = 0 = (Q^{\dagger})^2$ entonces el Hamiltoniano tiene un carácter SUSY que resulta de considerar el cuadrado del de Dirac,

$$\mathcal{H} = \hat{H}_D^2 = (Q + Q^{\dagger}) = Q^2 + \{Q, Q^{\dagger}\} + (Q^{\dagger})^2,$$

el cual se puede escribir en forma matricial (3.17)

$$\hat{H}_D^2 = \begin{pmatrix} H_1 & 0\\ 0 & H_2 \end{pmatrix}, \qquad (3.26)$$

El hecho de que \hat{H}_D y \hat{H}_D^2 tengan el mismo espectro, junto con el carácter SUSY de \hat{H}_D^2 , permitirá encontrar las soluciones al Hamiltoniano \hat{H}_D tan solo determinando las correspondientes soluciones de $H_1(H_2)$. Las soluciones al Hamiltoniano compañero SUSY $H_2(H_1)$ se obtendrán a través de las relaciones (3.14), (3.15) y (3.16). Sustituyendo a las ecuaciones (3.24) en (3.25) se obtiene la siguiente forma matricial para el Hamiltoniano de Dirac

$$\hat{H}_D = \begin{pmatrix} 0 & L^{\dagger} \\ L & 0 \end{pmatrix} \tag{3.27}$$

Recordando el caso de (2+1)D de la ecuación de Dirac en presencia de un campo electromagnético externo constante y con masa cero (ver sección 2.2.4) y considerando soluciones estacionarias :

$$\Psi = \phi(x, y)e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \tag{3.28}$$

la ecuación $(\gamma^{\mu}\hat{\pi}_{\mu})\Psi$ en la representación irreducible A tiene la siguiente expresión

$$\begin{pmatrix} E & -(\hat{\pi}_2 - i\hat{\pi}_1) \\ \hat{\pi}_2 + i\hat{\pi}_1 & -E \end{pmatrix} \psi(x, y) = 0.$$
(3.29)

Eligiendo al tripotencial vectorial en norma de Landau como $A_{\mu} = (0, 0, A(x))$ de tal forma que el perfil del campo magnético es constante a lo largo de la dirección y y esta dado por $\partial_x A(x)$. De esta manera la dependencia en y de la función de onda (3.28) corresponde a una onda plana con número de onda k_2 por lo que

$$\phi(x,y) = \psi(x)e^{ik_2y} \tag{3.30}$$

con $\psi(x)$ dado por el espinor

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}.$$
(3.31)

Sustituyendo la ecuación (3.28) en (3.29) se obtiene

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & \partial_x - \left[k_2 + \frac{e}{c\hbar}A(x)\right] \\ \partial_x + \left[k_2 + \frac{e}{c\hbar}A(x)\right] & -\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0$$
(3.32)

con $\varepsilon = E/\hbar$. La cual se puede reescribir en la forma

$$\hat{H}_D \left(\begin{array}{c} \psi_1 \\ \psi_2 \end{array} \right) = \varepsilon \left(\begin{array}{c} \psi_1 \\ \psi_2 \end{array} \right) \tag{3.33}$$

 con

 con

$$\hat{H}_D = \begin{pmatrix} 0 & \partial_x - \left[k_2 + \frac{e}{c\hbar}A(x)\right] \\ \partial_x + \left[k_2 + \frac{e}{c\hbar}A(x)\right] & 0 \end{pmatrix}$$
(3.34)

El sistema de ecuaciones para ψ_1 y ψ_2 que resulta de la ecuación anterior se puede desacoplar mediante el formalismo de la SUSY-QM y para ello considérese el cuadrado de \hat{H}_D . Comparando 3.27) con (3.34) se puede identificar a los operadores L y L^{\dagger} para este caso,

$$L = \partial_x - [k_2 + \frac{e}{c\hbar}A(x)] \qquad L^{\dagger} = \partial_x + [k_2 + \frac{e}{c\hbar}A(x)]$$
(3.35)

Aplicando \hat{H}_D por la izquierda a (3.33)

$$\begin{pmatrix} L^{-}L^{+} & 0\\ 0 & L^{+}L^{-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1}\\ \psi_{2} \end{pmatrix} = \varepsilon^{2} \begin{pmatrix} \psi_{1}\\ \psi_{2} \end{pmatrix}$$
(3.36)

Las ecuaciones desacopladas para ψ_1 y ψ_2 resultantes del Hamiltoniano SUSY de la ecuación anterior se pueden considerar cada una como un Hamiltoniano tipo Schrödinger de la forma,

$$\mathcal{H}_i^A \psi_i(x) = \varepsilon^2 \psi_i(x) \tag{3.37}$$

 con

$$\mathcal{H}_i^A = -\partial_x^2 - V_i(x) \tag{3.38}$$

donde i = 1, 2 y el superíndice indica la representación de las matrices de Dirac.

Los potenciales V_1 y V_2 en la ecuación (3.38) en este caso corresponden a

$$V_1(x) = W^2(x) - W'(x),$$

$$V_2(x) = W^2(x) + W'(x),$$

 \cos

$$W(x) = \mp \left[k_2 + \frac{e}{c\hbar}A(x)\right]$$

Las expresiones explicitas de los Hamiltonianos compañeros \mathcal{H}_1^A y \mathcal{H}_2^A son:

$$\mathcal{H}_1^A = L^- L^+ = -\partial_x^2 - \partial_x \frac{e}{c\hbar} A(x) + (k_2 + \frac{e}{c\hbar} A(x))^2,$$
$$\mathcal{H}_2^A = L^+ L^- = -\partial_x^2 + \partial_x \frac{e}{c\hbar} A(x) + (k_2 + \frac{e}{c\hbar} A(x))^2,$$

Los potenciales compañeros logran establecer relaciones entre dos ecuaciones de la mecánica cuántica no relativista, descritas cada una mediante un potencial, en general estos dos potenciales no tienen relación física entre sí, pero obsérvese que para el caso de la ecuación de Dirac que se estudió en este capítulo si hay una clara relación física entre los Hamilitonianos compañeros SUSY \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 . Este hecho se verá evidenciado en el siguiente capítulo.

En resumen en este capítulo se mostró la relación entre la ecuación de Dirac de partículas sin masa y SUSY en la mecánica cuántica, relación que ayuda a solo tener que resolver una ecuación diferencial para una sola de las componentes del espinor solución de la ecuación de Dirac en (2 + 1)D.

Capítulo 4

Estados Magnéticos de Frontera

Como se explicó en el capítulo 2 el grafeno, lo podemos modelar con la ecuación de Dirac en (2 + 1)D y asociar a cada punto de Dirac **K** y **K'** una de las representaciones inequivalentes de las matrices de Dirac. Como se explicó en el capitulo 3 mediante una relación de supersimetría, se puede simplificar el problema en estudio, ya que obteniendo una componente del espinor solución de la ecuación de Dirac en (2 + 1)D, se puede conocer vía SUSY la otra componente del espinor solución. Con toda la herramienta antes descrita se podrá resolver el problema de introducir una barrera magnética en un sola dirección con ancho 2d en la norma de Landau. A continuación se resolverá el caso particular de un campo magnético tipo barrera de la forma $\vec{B}(x, y, z) = (0, 0, B)$, este campo magnético uniforme se puede describir mediante un potencial en tan solo dos dimensiones debido a que

$$\nabla \times \vec{A} = \vec{B} \tag{4.1}$$

La componente z del vector de campo magnético, descrita por la ecuación (4.1) es $\partial_x A_y - \partial_y A_x$, por lo que una barrera de campo magnético orientada en dirección z depende de un potencial vectorial que solo depende de las componentes x, y, El potencial vectorial es de la forma $\vec{A}(x, y) = (0, A(x))$, es decir solo tiene componente y con dependencia únicamente de la coordenada x, es la llamada norma de Landau y se le llama comúnmente norma asimétrica, a diferencia de la norma simétrica $\vec{A}(x, y) = (-A(y), A(x))$.

Proponiendo la barrera de campo magnético como

$$\vec{B}(x) = \begin{cases} 0, & |x| > d, \\ B_0, & |x| < d. \end{cases}$$
(4.2)

Entonces podemos escribir al potencial vectorial de la siguiente manera

$$A(x) = B_0 \begin{cases} -d, & x < -d, \\ x, & |x| < d, \\ d, & x > d. \end{cases}$$
(4.3)

se observa que las constantes en las regiones donde el campo es cero toman estos valores para que A(x) sea una función continua. Observando el potencial (4.3) y con ayuda de la fuerza de Lorentz

$$\vec{F} = q\left(\frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}\right),\tag{4.4}$$

se puede introducir una cantidad que permita un elegante manejo de las unidades dentro del problema. Las unidades de qB según la ecuación (4.4) son unidades de fuerza,

$$[qB] = [F] = \frac{E}{l} = \frac{ElT}{l^2T} = ET\frac{l}{T}\frac{1}{l^2} = [\hbar][c]\frac{1}{l_B^2},$$
(4.5)

en donde se ha introducido una nueva cantidad l_B , que debe tener unidades de longitud, por lo que la llamaremos la longitud magnética l_B ,

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}.\tag{4.6}$$

La longitud magnética servirá como parámetro de la intensidad de campo magnético,

$$B = \frac{\hbar c}{e l_B^2},\tag{4.7}$$

el campo magnético es inversamente proporcional a la longitud magnética, por lo tanto cuando l_B crece, B disminuye y viceversa. Entonces con ayuda de esta l_B se puede escribir al potencial vectorial (4.3) para una barrera magnética como,

$$A(x) = \frac{\hbar c}{e l_B^2} \begin{cases} -d, & x < -d, \\ x, & |x| < d, \\ d, & x > d. \end{cases}$$
(4.8)

Fijando los valores de l_B y d, podemos graficar al potencial vectorial como lo muestra la figura 4.1.



Figura 4.1: Potencial vectorial en estudio, en este caso se eligió $d = 3l_B$ ó $\tilde{d} = 3$

La ecuación de Dirac en presencia de un campo magnético con masa igual a cero está dada por,

$$\gamma^{\mu}\hat{\pi}_{\mu}\Psi = 0. \tag{4.9}$$

Dado el caracter supersimétrico de \hat{H}_D , como se mostró en el capítulo 3, basta con calcular

$$(\gamma^{\mu}\hat{\pi}_{\mu})^{2}\Psi = 0, \tag{4.10}$$

la cual para estados estacionarios

$$\Psi = \Psi_{\sigma}(x, y)e^{-iEt/\hbar} \tag{4.11}$$

se reduce a la ecuación (2.55) con m = 0,

$$c^{2}\left(\hat{\pi}^{2}\mathbb{1} + \frac{\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}}{2}\right)\Psi_{\sigma}(x,y) = E^{2}\mathbb{1}\Psi_{\sigma}(x,y).$$

$$(4.12)$$

Utilizando el potencial vectorial de la ecuación (4.1) los términos $F_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}$ son:

$$F_{12}\sigma^{12} = F_{21}\sigma^{21} = \frac{\hbar e}{c} \left(\partial_1 A_2 - \partial_2 A_1\right)\sigma^{12} = \frac{\hbar e}{c} \frac{dA(x)}{dx}\sigma^3, \tag{4.13}$$

por lo tanto en la ecuación (4.12) los dos términos anteriormente descritos se combinan y la división entre dos se elimina, como se muestra a continuación:

$$\left(\sigma^3 \frac{\hbar e}{c} \frac{dA}{dx}(x) - \hat{\pi}^2 \mathbb{1}\right) \Psi_{\sigma}(x, y) = \frac{E^2}{c^2} \mathbb{1} \Psi_{\sigma}(x, y), \tag{4.14}$$

Separando la parte espinorial de la parte escalar con ayuda de la ecuación de vectores propios del operador de espín en (2+1)D mostrada en (2.38), se puede escribir a $\Psi_{\sigma}(x,y)$ como:

$$\Psi_{\sigma}(x,y) = \chi_{\sigma}\phi_{\sigma}(x,y) \tag{4.15}$$

donde $\phi_{\sigma}(x, y)$ es una función escalar y χ_{σ} son los vectores propios de σ_3 , con valores propios $\sigma = \pm 1$. χ_{σ} se presenta en el capítulo 2 explicitamente en (2.40). Para el caso del grafeno σ corresponde a los valores del pseudo-espín (ver capítulo 1). Sustituyendo (4.15) en (4.14)

$$\left(\frac{\hbar e\sigma}{c}\frac{dA}{dx}(x) + \hat{\pi}^2\right)\chi_{\sigma}\phi_{\sigma}(x,y) = \frac{E^2}{c^2}\chi_{\sigma}\phi_{\sigma}(x,y).$$
(4.16)

Ya que el potencial no depende de y explícitamente, se proponen los estados de onda plana para la dirección y con momento K_2 ,

$$\phi_{\sigma}(x,y) = \psi_{\sigma}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}(K_2y)},\tag{4.17}$$

donde $\psi_{\sigma}(x)$ es una función escalar dependiente solo de x. En la función de onda se muestra con el subíndice σ la diferencia entre las componentes del espinoriales, por lo que la ecuación (4.12) es:

$$-\hbar^2 \frac{d^2 \psi_\sigma(x)}{dx^2} + \left[\left(\hbar K_2 + \frac{eA(x)}{c} \right)^2 + \frac{\hbar e\sigma}{c} \frac{dA(x)}{dx} \right] \psi_\sigma(x) = \frac{E^2}{c^2} \psi_\sigma(x).$$
(4.18)

Realizando los cambios de variable siguientes

$$\tilde{x} = \frac{x}{l_B},$$
$$\tilde{d} = \frac{d}{l_B},$$
$$\tilde{p} = K_2 l_B.$$

$$\tilde{E} = \frac{El_B}{c\hbar}$$

la ecuación (4.18) (en términos de variables adimensionales) se reescribe como

$$-\frac{d^2\psi_{\sigma}(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} + \tilde{V}_{\sigma}(\tilde{x})\psi_{\sigma}(\tilde{x}) = \tilde{E}^2\psi_{\sigma}(\tilde{x}), \qquad (4.19)$$

donde $\tilde{V}_{\sigma}(\tilde{x})$ es el potencial efectivo

$$\tilde{V}_{\sigma}(\tilde{x}) = \begin{cases} (\tilde{p} - \tilde{d})^2, & \tilde{x} < -\tilde{d}, & \text{Región I} \\ (\tilde{p} + \tilde{x})^2 - \sigma, & |\tilde{x}| < \tilde{d}, & \text{Región II} \\ (\tilde{p} + \tilde{d})^2, & \tilde{x} > \tilde{d} & \text{Región III.} \end{cases}$$
(4.20)

Es por eso que la barrera de campo magnético dependerá del parámetro $\tilde{d} = d/l_B$; que es el cociente entre su anchura y su longitud magnética.

En la figura 4.2 se muestra un caso particular para el potencial efectivo.



Figura 4.2: Potencial efectivo con $\tilde{d} = 3, \sigma = 1$ y $\tilde{p} = 0$. La región sombreada corresponde a la región en la que pueden existir estados ligados.

Nótese que la ecuación (4.19) corresponde a una ecuación tipo Schrödinger en una dimensión de la forma:

$$-\frac{d^2\psi_{\sigma}(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} + \tilde{V}_{\sigma}(\tilde{x})\psi_{\sigma}(\tilde{x}) = \varepsilon\psi_{\sigma}(\tilde{x})$$
(4.21)

en donde $\varepsilon = \tilde{E}^2$.

De esta manera se puede simplificar el problema en estudio al de una ecuación tipo Schrödinger con un potencial efectivo de oscilador armónico truncado, ya que el potencial, al ser definido por regiones, solo permite que se comporte como un oscilador armónico en la región $|\tilde{x}| < \tilde{d}$. En el límite en el que el ancho de la barrera es muy grande en comparación a la longitud magnética $2d \gg l_B$ la ecuación se reduce a

$$-\frac{d^2\psi_{\sigma}(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} + \left[\left(\tilde{p} + \tilde{x}\right)^2 + \sigma\right]\psi_{\sigma}(\tilde{x}) = \varepsilon\psi_{\sigma}(\tilde{x}), \qquad (4.22)$$

ecuación cuyas soluciones corresponden a los niveles de Landau con frecuencia $\omega = \hbar/l_B^2$ y posición de equilibrio $\tilde{x}_0 = -\tilde{p}l_B$ ver Apéndice A.

$$\psi_{\sigma}(\tilde{x}) = \frac{1}{\pi^{1/4} a_H^{1/2} \sqrt{2^n n}} e^{-\frac{(\tilde{x} - \tilde{x}_0)^2}{2a_H^2}} H_n\left(\frac{\tilde{x} - \tilde{x}_0}{a_H}\right),\tag{4.23}$$

donde H_n son los polinomios de Hermite [10] y cuyos niveles de energía son:

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} + \sigma\right)\hbar\omega \tag{4.24}$$

Sin considerar el límite anterior se calcula la parte escalar del espinor de onda en cada una de las regiones que separa el tipo de potencial estudiado.

Para cuando $|\tilde{x}| > \tilde{d}$ la ecuación (4.18) toma la forma,

$$-\frac{d^2\psi_{\sigma}(\tilde{x})}{dx^2} + (\tilde{p} \mp \tilde{d})^2\psi_{\sigma}(\tilde{x}) = \varepsilon\psi_{\sigma}(\tilde{x}), \qquad (4.25)$$

donde el signo \mp indica en qué parte de la barrera se encuentra, si el signo es negativo se encuentra en la región $\tilde{x} < -\tilde{d}$, si el signo es positivo se encuentra en la región $\tilde{x} > \tilde{d}$.

Sea

$$k_{\mp}^2 = \left(\tilde{p} \mp \tilde{d}\right)^2 - \varepsilon, \qquad (4.26)$$

la ecuación (4.25) la podemos reescribir como,

$$\frac{d^2\psi_{\sigma}(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} - k_{\mp}^2\psi_{\sigma}(\tilde{x}) = 0, \qquad (4.27)$$

cuyas soluciones son:

$$\psi_{\sigma}^{(I,III)}(\tilde{x}) = \begin{cases} Ae^{k_{-}\tilde{x}} & \text{en} & \tilde{x} < -\tilde{d} & \text{Región I} \\ Be^{k_{+}\tilde{x}} + B'e^{-k_{+}\tilde{x}} & \text{en} & \tilde{x} > \tilde{d} & \text{Región III}, \end{cases}$$
(4.28)

donde A, B, B' son constantes de normalización.

En la región $|\tilde{x}| < d$, la ecuación (4.18) es la misma que en (4.22). Haciendo los siguientes cambios de variable

$$\xi = \sqrt{2}(\tilde{x} + \tilde{p}) \tag{4.29}$$

у

$$a(\sigma) = \frac{\sigma}{2} - \frac{\varepsilon}{2},\tag{4.30}$$

dando como resultado la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2\psi_{\sigma}(\xi)}{d\xi^2} - \left[\frac{\xi^2}{4} + a\right]\psi_{\sigma}(\xi) = 0.$$
(4.31)

Las soluciones a la ecuación anterior son las funciones parabólicas cilíndricas de orden $-a(\sigma) - 1/2$, ver Apéndice B [11], $D_{-a(\sigma)-\frac{1}{2}}(\xi)$

$$\psi_{\sigma}^{(II)}(\tilde{x}) = \sum_{\pm} C^{\pm} D_{-a(\sigma) - \frac{1}{2}}(\pm \sqrt{2}(\tilde{x} + \tilde{p})), \qquad \text{Región II}$$
(4.32)

donde C^{\pm} son constantes de normalización. El orden de las funciones parabólicas cilíndricas claramente depende de σ , es decir, las soluciones ψ_{σ} están en función del valor propio del pseudo-espín como lo indica la ecuación (4.30). Con los dos posibles valores de pseudo-espín, $\sigma = \pm 1$, se puede tener como soluciones funciones parabólicas cilíndricas de orden:

$$-a(1) - \frac{1}{2} = \frac{\epsilon}{2} - 1$$
 y $-a(-1) - \frac{1}{2} = \frac{\epsilon}{2}$ (4.33)

Así la función de onda solución a la ecuación (4.21) es:

$$\psi_{\sigma}(\tilde{x}) = \begin{cases} Ae^{k_{-}\tilde{x}} & \text{en} & \tilde{x} < -\tilde{d} & \text{Región I} \\ \sum_{\pm} C^{\pm} D_{-a(\sigma) - \frac{1}{2}} (\pm \sqrt{2}(\tilde{x} + \tilde{p})) & \text{en} & |\tilde{x}| < \tilde{d} & \text{Región II} & (4.34) \\ Be^{k_{+}\tilde{x}} + B'e^{-k_{+}\tilde{x}} & \text{en} & \tilde{x} > \tilde{d} & \text{Región III} \end{cases}$$

Es claro que el término B es cero ya que la función de onda se anula en el infinito, pero se ha conservado dicha constante para poder calcular los valores permitidos de las energías haciendo cero a B [12], obteniendo el espectro de energía de los estados ligados.

Exigiendo condiciones de continuidad en la función de onda y en su derivada, se logran obtener las condiciones para los estados ligados mediante un sistema de ecuaciones de las constantes de normalización de cada parte de la función de onda.

Analizando únicamente el caso $\sigma = 1$ y para simplificar los términos, sean

$$u(\tilde{x}) = D_{\frac{\epsilon}{2}-1}(\tilde{x}),$$
$$v(\tilde{x}) = D_{\frac{\epsilon}{2}}(\tilde{x}).$$

Como ya se tienen las soluciones en cada región, ahora es importante determinar las condiciones que tienen que cumplir las constantes A, B, B', C^+ , y C^- para que sean continuas

junto con sus derivadas. Plante ando con la condición de continuidad en $\tilde{x}=-\tilde{d}$ se obtien en las ecuaciones:

$$Ae^{-k_{-}\tilde{d}} = C^{+}u(-\tilde{d}) + C^{-}u(\tilde{d}),$$
(4.35)

$$Ak_{-}e^{-k_{-}\tilde{d}} = C^{+} \left[-\frac{\sqrt{2}\tilde{d}}{2}u(-\tilde{d}) - v(-\tilde{d}) \right] + C^{-} \left[\frac{\sqrt{2}\tilde{d}}{2}u(\tilde{d}) - v(\tilde{d}) \right].$$
(4.36)

Se puede resolver el sistema de ecuaciones para C^+ y C^- , despejando C^+ de la ecuación (4.35) y sustituyendo el valor en (4.36). De esta sustitución se despeja C^- y sustituyendo el resultado en el despeje de C^+ se obtienen:

$$C^{-} = \frac{Ae^{-k_{-}\tilde{d}} \left[u(-\tilde{d})k_{-} - 1 \right]}{\sqrt{2}\tilde{d}u(-\tilde{d})u(\tilde{d}) + u(\tilde{d})v(-\tilde{d}) + u(-\tilde{d})v(\tilde{d})},$$
(4.37)

$$C^{+} = \frac{Ae^{-k_{-}\tilde{d}}}{u(-\tilde{d})} \left[1 - \frac{u(\tilde{d}) \left[u(-\tilde{d})k_{-} - 1 \right]}{\sqrt{2}\tilde{d}u(-\tilde{d})u(\tilde{d}) + u(\tilde{d})v(-\tilde{d}) + u(-\tilde{d})v(\tilde{d})} \right].$$
(4.38)

La condición de continuidad en $\tilde{x} = \tilde{d}$ arroja el siguiente sistema de ecuaciones:

$$C^{+}u(\tilde{d}) - C^{-}u(-\tilde{d}) = Be^{k_{+}\tilde{d}_{+}} + B'e^{-k_{+}\tilde{d}},$$

$$C^{+}\left[\frac{\sqrt{2}\tilde{d}}{2}u(\tilde{d}) - v(\tilde{d})\right] - C^{-}\left[\frac{\sqrt{2}\tilde{d}}{2}u(-\tilde{d}) - v(-\tilde{d})\right] = k_{+}(Be^{k_{+}\tilde{d}} - B'e^{-k_{+}\tilde{d}_{+}}).$$
(4.39)

Resolviendo el sistema anterior para B, B' por el mismo método de la condición en $\tilde{x} = -\tilde{d}$ con C^+ y C^- , se obtienen:

$$\frac{B'}{A} = \sum_{\pm} \frac{e^{k_+\tilde{d}}}{2k_+} \left(\frac{C^{\pm}}{A} \left[u(\pm\tilde{d}) \left(k_+ \mp \frac{\sqrt{2}\tilde{d}}{2} \right) \pm v(\pm\tilde{d}) \right] \right)$$
(4.40)

$$\frac{B}{A} = \sum_{\pm} \frac{e^{-k_{\pm}\tilde{d}}}{2k_{\pm}} \left(\frac{C^{\pm}}{A} \left[u(\pm \tilde{d}) \left(k_{\pm} \pm \frac{\sqrt{2}\tilde{d}}{2} \right) \pm v(\pm \tilde{d}) \right] \right)$$
(4.41)

B tiene ser cero, ya que cuando \tilde{x} tiende a infinito, la función de onda debe anularse, dando como resultado una ecuación trascendental, de la que se obtiene el espectro de energía permitido para los estados ligados. Para resolverla se realizará un cálculo numérico.

En este trabajo interesan los estados ligados los cuales corresponden a valores de la energía ε tales que

$$\varepsilon < (\tilde{p} - \tilde{d})^2 + \sigma,$$
(4.42)

lo cual se obtiene por la condición (4.26). En la figura (4.2) se pueden observar las regiones en las cuales puede haber dichos estados.

Hasta ahora se ha trabajado en tan solo en una representación de las matrices de Dirac, es decir, en la representación A (2.27). Las soluciones en la representación B con ambos valores del pseudo-espín, se pueden calcular mediante la teoría de supersimetría descrita en el capítulo 3.

Con una transformación SUSY, se puede obtener el espinor solución en la representación B conociendo al espinor solución en la representación A. Para eso comparemos los Hamiltonianos en cada una de las representaciones y sus formas SUSY $\hat{H}^2 = \mathcal{H}$ (ver tabla).

	Representación A	Representación B
Ĥ	$\begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_2 - i\hat{\pi}_1 \\ \hat{\pi}_2 + i\hat{\pi}_1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -(\hat{\pi}_2 + i\hat{\pi}_1) \\ -(\hat{\pi}_2 - i\hat{\pi}_1) & 0 \end{pmatrix}$
$\mathcal{H}(=\hat{H}^2)$	$\begin{pmatrix} \hat{\pi}^2 - \frac{\hbar e}{c} A'(\tilde{x}) & 0\\ 0 & \hat{\pi}^2 + \frac{\hbar e}{c} A'(\tilde{x}) \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \hat{\pi}^2 + \frac{\hbar e}{c} A'(\tilde{x}) & 0\\ 0 & \hat{\pi}^2 - \frac{\hbar e}{c} A'(\tilde{x}) \end{pmatrix}$

Se puede observar como la componente del pseudo-espín $\sigma = 1$ (arriba) en una representación A (B) es la componente $\sigma = -1$ (abajo) de la otra representación B (A).

$$\mathcal{H}^{A} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{+1} & 0\\ 0 & \hat{H}_{-1} \end{pmatrix}, \qquad \qquad \mathcal{H}^{B} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{-1} & 0\\ 0 & \hat{H}_{+1} \end{pmatrix}$$
(4.43)

Utilizando a los Hamiltonianos H_{-1} y H_{+1} como la teoría de potenciales compañeros SUSY nos indica, se puede tener un superpotencial:

$$W(x) = K_2 + \frac{e}{\hbar c} A(x), \qquad (4.44)$$

mismo que nos permite construir los operadores L^{\pm} ,

$$L^{\pm} = \mp \frac{d}{dx} + K_2 + \frac{eA(x)}{\hbar c}.$$
 (4.45)

para los Hamiltonianos SUSY $\mathcal{H}^{(A,B)}$ por ejemplo

$$\mathcal{H}^A = \begin{pmatrix} L^- L^+ & 0\\ 0 & L^+ L^- \end{pmatrix} \tag{4.46}$$

Llamemos a $\{\varepsilon_{-1,n}\}$ el espectro discreto de \hat{H}_{-1} con las siguientes funciones propias $\{\psi_{-1,n}(x)\}$. Si el estado base de \hat{H}_{-1} se aniquila por L^- , es decir,

$$L^{-}\psi_{-1,0} = 0 \tag{4.47}$$

entonces $\varepsilon_{-1,0} = 0$ por lo que los valores propios $\varepsilon_{+1,n}$ del Hamiltoniano H_{+1} cuyas funciones propias son $\psi_{+1,n}$ están dados por la relación (3.14) como:

$$\varepsilon_{+1,n-1} = \varepsilon_{-1,n}.\tag{4.48}$$

y de forma similar con las funciones propias en la relación (3.15)

$$\psi_{+1,n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{-1,n}}} L^- \psi_{-1,n}(x)$$
(4.49)

Si $\varepsilon_{-1,0} = 0$ entonces $\tilde{E}_{-1,0} = 0$ y la función de onda del estado base del Hamiltoniano de Dirac (4.21) esta dado por el siguiente espinor

$$\Psi_0(x,y) = e^{iK_2y} \left(\begin{array}{c} 0\\ \psi_{-1,0}(x) \end{array} \right), \tag{4.50}$$

(4.51)

para el caso de los estados excitados $(n \ge 1)$, los espinores solución de (4.21) y los correspondientes valores propios de la energía son:

$$\Psi_n(x,y) = e^{iK_2 y} \begin{pmatrix} \psi_{\pm 1,n-1}(x) \\ \psi_{\pm 1,n}(x) \end{pmatrix} \qquad \qquad \tilde{E}_{\sigma,n} = \pm \sqrt{\varepsilon_{\sigma,n}}.$$
(4.52)

De la ecuación (4.49), se obtiene que:

$$L^{+}\psi_{+1,n-1} = \frac{L^{+}L^{-}}{\sqrt{\varepsilon_{-1,n}}}\psi_{-1,n} = \frac{\hat{H}_{-1}}{\sqrt{\varepsilon_{-1,n}}}\psi_{-1,n} = \frac{\varepsilon_{-1,n}}{\sqrt{\varepsilon_{-1,n}}}\psi_{-1,n}$$
(4.53)

Entonces obsérvese que para el grafeno, sin necesidad de calcular las dos componentes del espinor de Dirac en (2+1)D para una barrera de campo magnético constante de ancho 2d, se pudo, vía la supersimetría, obtener el espinor solución en ambas subredes cristalinas. Con el siguiente diagrama se puede observar el cambio de una componente a otra.

$$\begin{pmatrix} & \psi_{+1}^{\mathbf{A}} \\ & \psi_{+1}^{\mathbf{A}} \\ & L^{+} \downarrow \uparrow L^{-} \\ & L^{+} \downarrow \uparrow L^{-} \\ & \psi_{-1}^{\mathbf{A}} \end{pmatrix} \xrightarrow{L^{+}} \begin{pmatrix} \psi_{-1}^{\mathbf{B}} \\ & \psi_{-1}^{\mathbf{A}} \\ & L^{+} \downarrow L^{-} \\ & L^{+} \downarrow L^{-} \\ & \downarrow L^{+} \downarrow L^{-} \\ & \psi_{+1}^{\mathbf{B}} \end{pmatrix}$$
(4.54)

Capítulo 5

Resultados y Conclusiones

5.1. Resultados

En este capítulo se mostrarán los resultados obtenidos mediante un cálculo numérico. El código de este cálculo se encuentra en el apéndice D.

Para el cálculo numérico se utilizó *Mathematica* 7, software en el cual se desarrolló un programa que calcula las funciones propias de estados ligados en ambas representaciones y sus correspondientes energías para los dos posibles valores del pseudo-espín, todo ello según los parámetros que describan a la barrera magnética deseada. En las siguientes gráficas se mostrarán los módulos cuadrados de las funciones de onda $|\psi_{\sigma,n}(x)|^2$, es decir, las probabilidades en función de los parámetros $\tilde{d}, \tilde{p} \ge \sigma$.

El procedimiento para obtener los espinores solución es:

- 1. Plantear una barrera magnética, la cual se describe mediante el parámetro \tilde{d} y se fija el valor del parámetro \tilde{p} , que se relaciona con el vector de onda en la dirección y en forma adimensional.
- 2. Calcular los valores propios de la energía $\varepsilon_{\sigma,n}$, para una de las componentes espinoriales de la ecuación de Dirac (4.21), haciendo cero la relación (4.41) que es una ecuación trascendental.
- 3. Ya con los valores de $\varepsilon_{\sigma,n}$ se pueden conocer los valores de las constantes A, C^+, C^-, B' de la ecuación (4.34) y poder graficar explícitamente las funciones propias $\psi_{\sigma,n}$.
- 4. Al final con la componente espinorial obtenida, se obtiene mediante SUSY, la componente faltante con las ecuaciones (3.14), (3.15) y (3.16).

A continuación se muestran algunas gráficas de los estados ligados con distintos valores para los parámetros \tilde{d} y \tilde{p} . Por ejemplo, para un valor típico de la amplitud de campo magnético en un laboratorio de B = 4T, la longitud magnética es $l_B = 13nm$ [13]. Entonces para que el ancho de la barrera cubra una región en el grafeno de aproximadamente 300*a* (donde *a* es el parámetro de red) se necesita $d \approx 39nm$ y por lo tanto $\tilde{d} \approx 3$. De la relación (4.42) se observa que si *d* aumenta, lo cual implica tener mayor cantidad de celdas de grafeno dentro de la barrera, se tendrán también mayor cantidad de estados ligados. También se toman valores distintos de \tilde{p} para observar cómo se obtienen los estados ligados cuando este parámetro tiene valores negativos.



Figura 5.1: Componentes solución del espinor en la representación A para valores $\tilde{d} = 3$, $\tilde{p} = 0.$ (Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$, con espectro $\{\varepsilon_{+1,n}\} = \{2, 4, 6, 8\}$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$, con espectro $\{\varepsilon_{-1,n}\} = \{0, 2, 4, 6, 8\}$.



Figura 5.2: Componentes solución del espinor en la representación B para valores d = 3, $\tilde{p} = 0.$ (Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$.



Figura 5.3: Componentes solución del espinor en la representación A para valores $\tilde{d} = 3.5$, $\tilde{p} = 0.$ (Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$.



Figura 5.4: Componentes solución del espinor en la representación B para valores $\tilde{d} = 3.5$, $\tilde{p} = 0.$ (Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$.

Observar que en general las componentes $\sigma = 1$ en la representación A (B) son las componentes $\sigma = -1$ en la representación B (A).



Figura 5.5: Componentes solución del espinor en la representación A para valores $\tilde{d} = 2.5$, $\tilde{p} = 0.$ (Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$.



Figura 5.6: Componentes solución del espinor en la representación B para valores d = 2.5, $\tilde{p} = 0.$ (Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$.



Figura 5.7: Componentes solución del espinor en la representación A para valores $\tilde{d} = 3$, $\tilde{p} = 0.25$.(Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$.



Figura 5.8: Componentes solución del espinor en la representación B para valores $\tilde{d} = 3$, $\tilde{p} = 0.25$.(Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$.



Figura 5.9: Componentes solución del espinor en la representación A para valores $\tilde{d} = 3$, $\tilde{p} = -0.25$.(Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$.



Figura 5.10: Componentes solución del espinor en la representación B para valores $\tilde{d} = 3$, $\tilde{p} = -0.25$.(Derecha) Valor del pseudo-espín $\sigma = 1$. (Izquierda) Valor de la pseudo-espín $\sigma = -1$.

5.2. Conclusiones

Al finalizar el trabajo de investigación reconozco que me fueron útiles las siguientes premisas y mediante los resultados obtenidos incluyo las siguientes conclusiones:

- El grafeno es un material bidimensional. Cerca de los llamados puntos de Dirac **K** y **K**' los portadores de carga en el grafeno presentan una relación de dispersión lineal con velocidad $v_F \approx c/300$. Esto permite describir a los portadores de carga mediante dos ecuaciones de Dirac no masivas en (2 + 1)D.
- Cada ecuación de Dirac estará dada en términos de las dos representaciones inequivalentes de las matrices de Dirac en (2 + 1)D. Los espinores solución de estas dependen de un número cuántico llamado pseudo-espín.
- Agregar la relatividad a la mecánica cuántica, da como resultados la ecuación de Klein-Gordon y la ecuación de Dirac, cada una aplicada en distintas circunstancias, según se trabaje con bosones o fermiones. La ecuación de Dirac es una ecuación matricial, descrita por las matrices de Dirac que dependen de una relación de anticonmutación misma que determina la dimensión y el número de las matrices de Dirac, para el caso de (3+1)D son cuatro matrices de 4×4 , mientras que en (2+1)D solo son necesarias tres matrices de 2×2 .
- Para el caso de (3+1)D el álgebra matricial corresponde a matrices de 4 × 4 formadas por bloques de 2 × 2. Los espinores solución son cuatro: dos con energías positivas y dos con energías negativas. Para cada una de estas energías, hay una solución de espín arriba y otra de espín abajo. Las energías negativas tienen sentido cuando se cambia el signo de los valores del momento y energía, resultando una antipartícula con energía positiva.
- En (2+1)D se tienen dos representaciones para las matrices de Dirac. Estas pueden combinarse en una donde la representación es reducible 4×4 .
- SUSY como herramienta matemática logra simplificar a la mecánica cuántica relativista a una forma de la mecánica cuántica no relativista.
- Los potenciales compañeros logran establecer relaciones entre dos ecuaciones de la mecánica cuántica no relativista, descritas cada una mediante un potencial distinto. En general estos dos potenciales no tienen relación física entre sí.
- Se mostró la relación entre la ecuación de Dirac de partículas sin masa y SUSY de la mecánica cuántica. Con ello sólo fue necesario resolver uno de los espinores componentes de la ecuación de Dirac en (2+1)D y establecer relaciones para cambiar de uno a otro.
- Se ocupan las propiedades de supersimetría para resolver el caso particular de un potencial de campo magnético tipo barrera en el grafeno, reduciendo la ecuación de Dirac en (2+1)D, a dos ecuaciones tipo oscilador armónico truncado de la mecánica

cuántica no relativista en forma adimensional. Se pueden obtener las soluciones en cada una de las correspondientes regiones de la barrera. Los niveles de energía permitidos para los estados ligados, los obtenemos planteando las condiciones de continuidad en la función de onda y en su derivada.

- Al realizar estos cálculos se observa que la ecuación para obtener los niveles de energía de estados ligados, es una ecuación transcendental, por lo que se utilizó un método numérico para resolverla. El programa fue realizado en *Mathematica* 7 y puede determinar numéricamente los niveles de energía y los valores de las constantes que hacen que la función de onda y su derivada sean continuas. El programa exige los parámetros de la barrera y condiciones iniciales del problema como lo son: \tilde{d} (parámetro adimensional del ancho y alto de la barrera) y \tilde{p} (el momento en la dirección y); al igual que el valor del pseudo-espín σ .
- Al llegar a este punto de la investigación, es donde la SUSY-QM toma un papel determinante, ya que podemos obtener el espectro de energía y funciones propias de la otra componente de la ecuación de Dirac con las relaciones de potenciales compañeros, ya que se puede determinar al superpotencial explícitamente y de esa forma no es necesario tener que volver a realizar otro cálculo numérico.
- Al completar los cálculos en la otra representación irreducible B, se observa que las componentes son las mismas, solo que se invierte su orden; por lo que ya no es necesario volver a realizar cálculos numéricos de nuevo.
- En método numérico tiene sus limitaciones mismas que se ven reflejadas en las gráficas, donde se observa que en el nivel de energía más alto tiene unas pequeñas discontinuidades.
- Cuando se realiza el límite $2\tilde{d} \gg l_B$ en donde el ancho de la barrera es mucho mayor a la altura de la misma, el problema se reduce al de un oscilador armónico.
- Si la energía se encuentra en un punto cercano al borde de la barrera, tendrá mayores discrepancias en las gráficas que se obtengan. Estos resultados (errores) se asocian directamente al método numérico usado. Este es un punto a partir del cual se está trabajando para poder obtener un método numérico adecuado a cualquiera de los niveles de energía.
- El grafeno en los últimos ha sido estudiado ampliamente en la literatura, el aporte de este trabajo de tesis estos estudios es mediante la inclusión del formalismo de la supersimetría en mecánica cuántica. Mediante este formalismo se puede estudiar una clase de campos magnéticos externos.
- Se eligió estudiar la interacción de los portadores de carga en el grafeno en una barrera de campo magnético externo, ya que como se mostró en el capítulo 4 para ciertos parámetros de la barrera existen fenómenos de confinamiento.

- Otro aspecto interesante a estudiar utilizando estas herramientas es el de los estados de dispersión que no se estudiaron en el presente trabajo, pero es trabajo a futuro.
- Al finalizar mi trabajo de investigación, vislumbro posibilidades de seguir estudiando y profundizar sobre este tema. Con todo el formalismo presentado en este trabajo se pueden estudiar interacciones del grafeno en distintas configuraciones de campos electromagnéticos externos incluida radiación. Esto permitirá entender y caracterizar al grafeno para potenciales aplicaciones en un futuro.

Apéndice A

Estados de Landau

Cuando se agrega campo electromagnético a la ecuación de Schrödinger es necesario considerar la sustitución mínima $\hat{\mathbf{p}} \to \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}$, donde $\hat{\mathbf{A}}$ es el potencial vectorial magnético y $\hat{\mathbf{p}}$ es el operador de momento usualmente utilizado $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Mientras la partícula tenga espín, lo cual no lo podemos despreciar, éste interactuará con el campo magnético, de forma que se suma el término $-\hat{\mu} \cdot \mathbf{B}$, donde $\hat{\mu}$ es el momento magnético $\hat{\mu} = \mu \hat{s}/s$. Por lo cual el Hamiltoniano de una partícula cargada en un campo electromagnético se escribe de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 - \hat{\mu} \cdot \vec{\mathbf{B}}$$
(A.1)

Al desarrollar el término $(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}})^2$ tiene que ser con cuidado ya que $\hat{\mathbf{p}}$ no necesariamente conmuta con $\hat{\mathbf{A}}$.

Se determinarán los niveles de energía de una partícula cuando es sometida a una campo magnético uniforme y constante, dirigido a lo largo de la dirección z,

$$\mathbf{B} = (0, 0, B) \tag{A.2}$$

que se puede describir mediante un potencial vectorial en la siguiente forma:

$$\hat{\mathbf{A}} = (-By, 0, 0). \tag{A.3}$$

Ya que rotacional del potencial vectorial es el vector de campo magnético, $\nabla \times \hat{\mathbf{A}} = \tilde{\mathbf{B}}$, esta elección del potencial vectorial no es la única que describe al campo magnético (A.2), por ejemplo existen estas otras elecciones: $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$ y $\mathbf{A} = 1/2\mathbf{r} \times \mathbf{B} = 1/2(-By, Bx, 0)$. La elección del potencial vectorial como se hizo en (A.3) es llamada la norma de Landau.

La ecuación a resolver es:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\hat{\mathbf{p}}_x + \frac{eBy}{c} \right)^2 + \hat{\mathbf{p}}_y^2 + \hat{\mathbf{p}}_z^2 \right] \psi - \frac{\mu}{s} \sigma B \psi = E \psi.$$
(A.4)

donde $\sigma=s_z$ es el valor propio del operador de espín que conmuta con el Hamiltoniano, al igual que la componente $\hat{\mathbf{p}}_x, \hat{\mathbf{p}}_y$ del momento, por lo que todas estas son cantidades que se conservan. Se propone a la función de onda como:

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)} \Phi(y). \tag{A.5}$$

Los valores propios p_x y p_z pueden tomar cualquier valor real. Ya que $A_z = 0$ se dice que el campo no está cuantizado en esa dirección y toma el valor del momento ordinario mv_z . Sustituyendo (A.5) en (A.4) se obtiene.

$$\Phi''(y) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\left(E + \frac{\mu\sigma}{s} B - \frac{p_z^2}{2m} \right) - \frac{m\omega_B^2}{2} (y - y_0)^2 \right] \Phi = 0,$$
(A.6)

identificando a $y_0 = -\frac{cp_x}{eB}$ y $\omega_B = \frac{|e|B}{mc}$. La ecuación (A.6) la reconocemos como una ecuación tipo oscilador armónico lineal en la dirección y con frecuencia ω_B . Entonces se sabe que el espectro de energías de este sistema tiene que estar cuantizado, obteniendo la siguiente expresión para el espectro de energías de una partícula en un campo magnético constante

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_B + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\mu\sigma}{s}B.$$
(A.7)

El primer término indica los valores discretos de la energía que corresponden al movimiento en el plano perpendicular al campo; ellos son llamados *niveles de Landau*, realizado por L. D. Landau en 1930 [10]. Para un electrón, $\mu/s = (|e|\hbar)/mc$ y la fórmula (A.7) se convierte en:

$$E = (n + \frac{1}{2} + \sigma)\hbar\omega_B + \frac{p_z^2}{2m}.$$
(A.8)

Las funciones propias Φ_n correspondientes a los niveles de energía de (A.7):

$$\Phi_n(y) = \frac{1}{\pi^{1/4} a_B^{1/2} \sqrt{2^n n}} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2a_B^2}} H_n\left(\frac{y-y_0}{a_B}\right),\tag{A.9}$$

donde $a_B = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_B}}$ y H_n son los polinomios de Hermite, los cuales pueden ser representados con las funciones parabólicas cilíndricas (ver apéndice B).

Apéndice B

Funciones Parabólicas Cilíndricas

Las funciones parabólicas cilíndricas son una clase de funciones llamadas funciones de Weber. Existe una variedad de definiciones ligeramente diferentes usadas por varios autores [11].

Whittaker and Watson (1990) definen las funciones parabólicas cilíndricas $D_{\nu}(z)$ como las soluciones de la ecuación diferencial de Weber.

$$y''(z) + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{1}{4}z^2\right)y(z) = 0.$$
 (B.1)

Las dos soluciones independientes están dadas por $y = D_{\nu}(z)$ y $y = D_{-\nu-1}(iz)$ donde

$$D_{\nu}(z) = 2^{\nu/2 + 1/4} z^{-1/2} W_{\nu/2 + 1/4, -1/4} \left(\frac{1}{2} z^2\right)$$
(B.2)

$$= \frac{2^{\nu/2}e^{-z^2/4}(-iz)^{1/4}(iz)^{1/4}}{\sqrt{z}}U\left(-\frac{1}{2}\nu,\frac{1}{2},\frac{1}{2}z^2\right),\tag{B.3}$$

la cual en la mitad del plano real $\mathbb{R}[z] > 0$, es equivalente a

$$D_{\nu}(z) = 2^{\frac{\nu}{2}} e^{\frac{-z^2}{4}} U\left(-\frac{1}{2}\nu, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}z^2\right),\tag{B.4}$$

donde $W_{k,m}$ es la función de Whittaker y U(a, b, z) es la función hipergeométrica confluente.

Para un entero no negativo n, la solución D_n se reduce a

$$D_n(x) = 2^{-n/2} e^{-x^2/4} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)$$
(B.5)

donde H_n son los polinomios de Hermite.

Para el caso del Apéndice anterior A de los niveles de Landau $x \to (y - y_0)/(\sqrt{2}a_B)$.

Como propiedades particulares, observese que la derivada de la función parabólica cilíndrica $D_n(x)$ es:

$$\frac{dD_n(x)}{dx} = \frac{1}{2}xD_n(x) - D_{n+1}(x).$$
(B.6)

Apéndice C

Límite no relativista de la ecuación de Dirac

En esta parte se mostrará que la ecuación de Dirac en una aproximación no relativista se reduce a la teoría de espín de Pauli en dos componentes.

La ecuación de Pauli, también conocida como la ecuación de Schrödinger-Pauli, es la formulación cuántica para una partícula con espín 1/2 que interacciona con un campo electromagnético. Fue formulada por Wolfgang Pauli en 1927, ya que los experimentos de Stern-Gerlach realizados en 1922, mostraron que era fundamental el considerar que las partículas tienen propiedades cuánticas intrínsecas.

Se introducirá una interacción con un campo electromagnético externo descrito por un cuadripotencial $A^{\mu} = (\Phi, \vec{A})$ mediante el acoplamiento mínimo $p^{\mu} \rightarrow p^{\mu} - \frac{e}{c}A^{\mu}$. Por lo que la ecuación de Dirac queda de la siguiente forma:

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = \left(c\alpha \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + \beta mc^2 + e\Phi\right)\psi \tag{C.1}$$

La ecuación (C.1) expresa la interacción de una partícula de Dirac con carga con un campo electromagnético. Separando las componentes en dos términos espinoriales de dos componentes:

$$\psi = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} \tag{C.2}$$

por lo que la ecuación (C.1) queda como:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left(\begin{array}{c}\tilde{\varphi}\\\tilde{\chi}\end{array}\right) = c\alpha \cdot \pi\left(\begin{array}{c}\tilde{\chi}\\\tilde{\varphi}\end{array}\right) + e\Phi\left(\begin{array}{c}\tilde{\varphi}\\\tilde{\chi}\end{array}\right) + mc^{2}\left(\begin{array}{c}\tilde{\varphi}\\-\tilde{\chi}\end{array}\right) \tag{C.3}$$

En el límite no relativista la energía en repos
o mc^2 es la energía más grande, por lo que el problema se puede escribir como,

$$\begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = e^{-(imc^2/\hbar)t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$
(C.4)

donde ahora φ y χ son relativamente pequeñas variaciones en el tiempo que son soluciones de la ecuación matricial,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\begin{array}{c}\varphi\\\chi\end{array}\right) = c\alpha \cdot \pi\left(\begin{array}{c}\chi\\\varphi\end{array}\right) + e\Phi\left(\begin{array}{c}\varphi\\\chi\end{array}\right) - 2mc^2\left(\begin{array}{c}0\\\chi\end{array}\right). \tag{C.5}$$

El último término de la ecuación (C.5) se obtiene de la derivada temporal del espinor (C.4), entonces el sistema acoplado resultante de (C.1) es,

$$i\hbar \frac{d\varphi}{dt} = c\alpha \cdot \hat{\pi}\chi + e\Phi\varphi \tag{C.6}$$

$$i\hbar\frac{d\chi}{dt} = c\alpha \cdot \hat{\pi}\varphi + e\Phi\chi - 2mc^2\chi \tag{C.7}$$

En la segunda componente espinorial, la ecuación (C.7), se considera que la interacción de campo Φ y del cambio temporal de la componente χ del espinor ψ son despreciables en comparación del término mc^2 , entonces se puede despejar χ de la siguiente manera

$$\chi = \frac{\sigma \cdot \hat{\pi}}{2mc}\varphi \tag{C.8}$$

donde χ son las componentes pequeñas de la función de onda mientras que a las componentes φ son las componentes grandes.

Sustituyendo la ecuación (C.8) en la primera componente de la ecuación (C.5),

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \left(\frac{\sigma\cdot\hat{\pi}\sigma\cdot\hat{\pi}}{2m}\right)\varphi \tag{C.9}$$

Siguiendo la identidad para las matrices de espín de Pauli:

$$\sigma \cdot \mathbf{a} \, \sigma \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i \sigma \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b}$$

para este caso

$$\sigma \cdot \hat{\pi} \sigma \cdot \hat{\pi} = \hat{\pi}^2 + i\sigma \cdot \hat{\pi} \times \hat{\pi}$$
$$= \hat{\pi}^2 - \frac{e\hbar}{c} \sigma \cdot \vec{B}$$
(C.10)

Sustituyendo la ecuación (C.10) en la ecuación (C.5) junto con la sustitución mínima sale

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \left[\frac{(p - (e/c)A)^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\sigma \cdot \vec{B} + e\Phi\right]\varphi \tag{C.11}$$

que es reconocida como la ecuación de Pauli. La ecuación (C.11) confirma que la ecuación de Dirac es una buena descripción de un electrón relativista inmerso en un campo magnético uniforme. Las dos componentes de φ son suficientes para acomodar los dos grados de libertad del espín para un electrón que tiene valor de espín 1/2 y el momento magnético del electrón emerge automáticamente correspondiente a la razón giromagnética g = 2. Se puede observar como la ecuación (C.11) se reduce solo guardando los términos de primer orden en la interacción débil del campo magnético uniforme $\vec{B} = \nabla \times \hat{A}$; $\hat{A} = 1/2\vec{B} \times \vec{r}$

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \vec{B}\right]\varphi \tag{C.12}$$

aquí $L = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ el momento angular orbital, $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\sigma$ es el espín del electrón, con valores propios $\pm \hbar/2$.
Apéndice D

Código

(*Se limpian las variables que se usaran en el programa*)

Clear[a, d, s, p, solu, probar, hamil, e, ondacero, norm, normuno, normdos, normtres, normcuatro, anorm, auno, ados, atres, acuatro, bnorm, buno, bdos, f, btres, cmas, cmasuno, cmasdos, cmastres, cmascuatro, cnos, cnosuno, cnosdos, cnostres, cnoscuatro, u, v, funond, grafab, estrob, ener, e2, e1, e3, soluno, soldos, soltres, solcuatro, u1, u2, u3, u4, v1, v2, v3, v4, prue, r, pefect1]

(*Se definen los potenciales efectivos, uno para cada valor de pseudo-espín*)

```
(*Se introducen los parámetros adimensionales: d (equivalente a d
tilde), p (equivalente p tilde) y s (equivalente a sigma)*)
```

```
d = 2.5;
s = 1;
p = 0;
(*Se grafica el potencial efectivo*)
Plot[pefec[x], {x, -1.2*d, 1.2*d}, AxesLabel ->
    {OverTilde[x], OverTilde[V]*OverTilde[x]}]
Clear[e, aa, u, v, cnos, cmas, normuno, kmas, knos, w, buno, bprima]
(*Se definen todas las funciones y constantes necesarias para escribir
    la solución completa del espinor de Dirac, todas ellas se encuentran
```

```
descritas en el capítulo 4, estas funciones y constantes dependen de
 la energia e*)
estro = Array[ener, 5, 0];
grafa = Array[funond, 5, 0];
kmas = Sqrt[(p + d)^2 - e];
knos = Sqrt[(p - d)^2 - e];
aa = s/2 - e/2;
u[x_] := ParabolicCylinderD[-aa - 1/2, Sqrt[2]*(p + x)];
v[x_] := ParabolicCylinderD[-aa + 1/2, Sqrt[2]*(p - x)];
cnos = (auno*((knos/Sqrt[2] + d/2)*u[-d] + v[-d]))/E^(knos*d)/
    (d*u[d]*u[-d] + v[-d]*u[d] - u[-d]*v[d]);
cmas = (auno/E^(knos*d) - cnos*u[d])/u[-d]; TextCell[""]
buno = ((Sqrt[2]*E^(kmas*d))/(2*kmas))*
    ((cmas/auno)*(u[d]*(kmas/Sqrt[2] + d/2) - v[d]) +
     (cnos/auno)*(u[-d]*(kmas/Sqrt[2] - d/2) + v[-d]));
bprima = ((Sqrt[2]*E^(kmas*d))/(2*kmas))*
    ((cmas/auno)*(u[d]*(kmas/Sqrt[2] - d/2) - v[d]) +
     (cnos/auno)*(u[-d]*(kmas/Sqrt[2] + d/2) + v[-d]));
sol = (u[-d]*(-(d/2) + kmas/Sqrt[2]) - v[-d])/(u[d]*(d/2 + kmas/Sqrt[2]) - v[-d])/(u[d]*(d/2 + kmas/Sqrt[2])) - v[-d])/(u[d]*(d/2 + kmas/Sqrt[2]))
     v[d]);
(*Para resolver la ecuación trascendental de las energías, se grafican
 dos funciones, las intersecciones de dichas funciones son los valores
propios de la energía permitidos para nuestras condiciones*)
Plot[{cmas/cnos, -sol}, {e, 0, (p + d)^2 + s}, PlotRange -> Automatic]
wsol = Array[w, 4, 0];
(*Se calculcan los distintos valores de las energías para los parámetros dados.*)
For[i = 0, i < 5, i++, w[i] = FindRoot[cmas/cnos == -sol, {e, 2*i + 2}];</pre>
   ener[i] = w[i][[1,2]]]
estro
wsol;
(*Aquí toman valores las funciones y constante ya que se saben los
valores de energía, se guardan en vectores antes definidos*)
ue[x_, e_] := ParabolicCylinderD[-(s/2) + e/2 - 1/2, Sqrt[2]*(p + x)];
ve[x_, e_] := ParabolicCylinderD[-(s/2) + e/2 + 1/2, Sqrt[2]*(p - x)];
cnose[e_] := (anorm*((Sqrt[(p - d)^2 - e]/Sqrt[2] + d/2)*ue[-d, e] +
```

```
ve[-d, e]))/E^(Sqrt[(p - d)^2 - e]*d)/(d*ue[d, e]*ue[-d, e] +
     ve[-d, e]*ue[d, e] - ue[-d, e]*ve[d, e]);
cmase[e_] := (anorm/E^(Sqrt[(p - d)^2 - e]*d) - cnose[e]*ue[d, e])/ue[-d, e];
  TextCell[""]
bunoe[e_] := ((Sqrt[2]*E^(Sqrt[(p + d)^2 - e]*d))/(2*Sqrt[(p + d)^2 - e]))*
    (cmase[e]*(ue[d, e]*(Sqrt[(p + d)^2 - e]/Sqrt[2] + d/2) - ve[d, e]) +
     cnose[e]*(ue[-d, e]*(Sqrt[(p + d)^2 - e]/Sqrt[2] - d/2) + ve[-d, e]));
bprimae[e_] := ((Sqrt[2]*E^(Sqrt[(p + d)^2 - e]*d))/(2*Sqrt[(p + d)^2 - e]))*
    (cmase[e]*(ue[d, e]*(Sqrt[(p + d)^2 - e]/Sqrt[2] - d/2) - ve[d, e]) +
     cnose[e]*(ue[-d, e]*(Sqrt[(p + d)^2 - e]/Sqrt[2] + d/2) + ve[-d, e]));
(*Se calculan las constantes de normalización según sea el valor de la
energía y se calculan la norma al cuadrado de la función de onda*)
centro[e_] := Integrate[((cnose[e]/anorm)*ue[x, e] +
     (cmase[e]/anorm)*ue[-x, e])^2, {x, -d, d}]
normal[e_] := N[centro[e]] + 1/(E^(2*Sqrt[(p - d)^2 - e]*d)*
      (2*Sqrt[(p - d)<sup>2</sup> - e])) - (bprimae[e]/anorm)<sup>2</sup>*
     (1/(E^{2*Sqrt}[(p + d)^2 - e]*d)*(2*Sqrt[(p + d)^2 - e])));
aunoe[e_] := 1/N[normal[e]];
f[x_, e_] := Piecewise[{E^(Sqrt[(p - d)^2 - e]*x), x < -d},
     \{N[(cmase[e]/anorm)*ue[x, e] + (cnose[e]/anorm)*ue[-x, e]], d > x > -d\},\
     bprimae[e]/anorm/E^(Sqrt[(p + d)^2 - e]*x), x > d}];
funciones[x_, e_] := Piecewise[{\{E^{(2*Sqrt[(p - d)^2 - e]*x), x < -d\},
     \{N[((cmase[e]/anorm)*ue[x, e] + (cnose[e]/anorm)*ue[-x, e])^2],
      d > x > -d, {(bprimae[e]/anorm)^2/E^(2*Sqrt[(p + d)^2 - e]*x),
      x > d}];
normalizando[e_] := 1/Integrate[N[funciones[x, e]], {x, -Infinity, Infinity}]
(*Se grafican las funciones de onda obtenidas para cada uno de los
valores de la energía*)
{Plot[funciones[x, ener[0]], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
   Plot[funciones[x, ener[1]], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
   Plot[funciones[x, ener[2]], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
   Plot[funciones[x, ener[3]], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
   Plot[funciones[x, ener[4]], {x, -1.3*d, 1.3*d}]};
```

Plot[f[x, ener[3]], {x, -1.3*d, 1.3*d}], Plot[f[x, ener[4]],

```
\{x, -1.3*d, 1.3*d\}\}
(*Se vuelven a calcular las contantes de normalización y se grafican
 las funciones de onda normalizadas*)
For[i = 0, i < 5, i++, wt[i] = Integrate[funciones[x, ener[i]],</pre>
     {x, -Infinity, Infinity}]; wt[i]]
wt[0]
wt[1]
wt[2]
wt[3]
wt[4];
{Plot[funciones[x, ener[0]]/wt[0], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
  Plot[funciones[x, ener[1]]/wt[1], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
  Plot[funciones[x, ener[2]]/wt[2], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
  Plot[funciones[x, ener[3]]/wt[3], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
  Plot[funciones[x, ener[4]]/wt[4], {x, -1.3*d, 1.3*d}]}
{Plot[f[x, ener[0]]/Sqrt[wt[0]], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
  Plot[f[x, ener[1]]/Sqrt[wt[1]], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
  Plot[f[x, ener[2]]/Sqrt[wt[2]], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
  Plot[f[x, ener[3]]/Sqrt[wt[3]], {x, -1.3*d, 1.3*d}],
  Plot[f[x, ener[4]]/Sqrt[wt[4]], {x, -1.3*d, 1.3*d}]}
(*Se definen los vectores necesarios para graficar juntas las
 funciones de la norma al cuadrado de la función de onda. Y se
 verifican que la integral sobre todo el espacio de esta última sea uno.*)
grafos = {funciones[x, ener[0]], funciones[x, ener[1]], funciones[x, ener[2]],
    funciones[x, ener[3]], funciones[x, ener[4]]};
wgraf = grafos + estro;
granda = {f[x, ener[0]], f[x, ener[1]], f[x, ener[2]], f[x, ener[3]],
    f[x, ener[4]]};
wgrr = granda + estro;
Plot[{wgrr, pefec[x]}, {x, -1.2*d, 1.2*d},
  Filling -> {{1 -> ener[0]}, {2 -> ener[1]}, {3 -> ener[2]}, {4 -> ener[3]},
    {5 -> ener[4]}}, AxesLabel -> {OverTilde[x], OverTilde[V]*OverTilde[x]}]
For[i = 0, i < 5, i++, wtnor[i] = Integrate[funciones[x, ener[i]]/wt[i],</pre>
    {x, -Infinity, Infinity}]]
graf = {funciones[x, ener[0]]/wt[0], funciones[x, ener[1]]/wt[1],
    funciones[x, ener[2]]/wt[2], funciones[x, ener[3]]/wt[3],
    funciones[x, ener[4]]/wt[4]};
wgraf = graf + estro;
```

```
Plot[{wgraf, pefec[x]}, {x, -1.2*d, 1.2*d},
  Filling -> {{1 -> ener[0]}, {2 -> ener[1]}, {3 -> ener[2]}, {4 -> ener[3]},
    \{5 -> ener[4]\}\}
wtnor[0]
wtnor[1]
wtnor[2]
wtnor[3]
wtnor[4];
(*A partir de aquí se empieza a calcular la otra componente del
 espinor de Dirac con la supersimetría de la mecánica cuántica.*)
(*Se empieza limpiando las variable a ocupar.*)
Clear[chuper, nueva, esca, trans, susycero, susyuno, susydos, susytres]
(*Se define la transformación supersimétrica a ocupar y se calcula una
por una las funciones de onda transformadas a la otra componente del
 espinor de onda de Dirac.*)
funciones[x, ener[1]]/wt[1];
esca[x_] = Piecewise[\{\{-d, x < -d\}, \{d, x > d\}, \{x, -d < x < d\}\}];
Plot[f[x, ener[1]]/Sqrt[wt[1]], {x, -1.2*d, 1.2*d}]
trans = p + esca[x];
deruno = D[f[x, ener[1]]/Sqrt[wt[1]], x];
susymenos = trans*(f[x, ener[1]]/Sqrt[wt[1]]) + D[f[x, ener[1]]/Sqrt[wt[1]],
     x];
Plot[susyuno, \{x, -1.2*d, 1.2*d\}]
Plot[f[x, ener[0]]/Sqrt[wt[0]], {x, -1.2*d, 1.2*d}]
trans = p + esca[x];
dercero = D[f[x, ener[0]]/Sqrt[wt[0]], x];
susycero = trans*(f[x, ener[0]]/Sqrt[wt[0]]) - D[f[x, ener[0]]/Sqrt[wt[0]],
     x];
Plot[susycero, \{x, -1.2*d, 1.2*d\}]
Plot[f[x, ener[1]]/Sqrt[wt[1]], {x, -1.2*d, 1.2*d}]
trans = p + esca[x];
deruno = D[f[x, ener[1]]/Sqrt[wt[1]], x];
susyuno = trans*(f[x, ener[1]]/Sqrt[wt[1]]) - D[f[x, ener[1]]/Sqrt[wt[1]], x];
Plot[susyuno, \{x, -1.2*d, 1.2*d\}]
Plot[f[x, ener[2]]/Sqrt[wt[2]], {x, -1.2*d, 1.2*d}]
trans = p + esca[x];
derdos = D[f[x, ener[2]]/Sqrt[wt[2]], x];
```

```
susydos = trans*(f[x, ener[2]]/Sqrt[wt[2]]) - D[f[x, ener[2]]/Sqrt[wt[2]], x];
Plot[susydos, {x, -1.2*d, 1.2*d}]
Plot[f[x, ener[3]]/Sqrt[wt[3]], {x, -1.2*d, 1.2*d}]
trans = p + esca[x];
dertres = D[f[x, ener[3]]/Sqrt[wt[3]], x];
susytres = trans*(f[x, ener[3]]/Sqrt[wt[3]]) - D[f[x, ener[3]]/Sqrt[wt[3]],
     x];
Plot[susytres, \{x, -1.2*d, 1.2*d\}]
susyonda = {susymenos^2/Sqrt[ener[1]], susycero^2/Sqrt[ener[1]],
    susyuno^2/Sqrt[ener[2]], susydos^2/Sqrt[ener[3]],
    susytres^2/Sqrt[ener[4]]};
newestro = estro - 2;
susy = susyonda + newestro;
Plot[{susy, pefec1[x]}, {x, -1.2*d, 1.2*d},
  Filling -> {{1 -> ener[0] - 2}, {2 -> ener[1] - 2}, {3 -> ener[2] - 2},
    \{4 \rightarrow \text{ener}[3] - 2\}, \{5 \rightarrow \text{ener}[4] - 2\}\},\
  AxesLabel -> {OverTilde[x], OverTilde[V]*OverTilde[x]}]
nueva = Integrate[susyonda, {x, -Infinity, Infinity}]
chuper = susyonda/nueva + newestro;
(*Se grafican los cuadrados de las normas de las funciones de onda
 obtenidas con la supersimetría que corresponden al valor de
pseudo-espín sigma =-1 con las componentes sigma=+1*)
Plot[{chuper, pefec1[x]}, {x, -1.2*d, 1.2*d},
  Filling -> {{1 -> ener[0] - 2}, {2 -> ener[1] - 2}, {3 -> ener[2] - 2},
    \{4 \rightarrow \text{ener}[3] - 2\}, \{5 \rightarrow \text{ener}[4] - 2\}\},\
  AxesLabel -> {OverTilde[x], OverTilde[V]*OverTilde[x]}]
Integrate[susyonda/nueva, {x, -Infinity, Infinity}]
```

Bibliografía

- A. H. Castro, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *The electronic propieties of graphene* Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
- [2] E. D. Reyes, (2007). El factor de llenado en el efecto Hall cuántico a campo cero, Tesis de Licenciatura.
- H. P. Boehm, R. Setton, E. Stumpp (1994). "Nomenclature and terminology of graphite intercalation compounds". Pure and Applied Chemistry 66 (9): 1893. doi:10.1351/pac199466091893.
- [4] P. R. Wallace, The Band Theory of Graphite, Phys Rev 71 622 (1947)
- [5] J. D. Bjorken, S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Publishing Company, (1964).
- [6] R. Jackiw, Fractional charge and zero model for planar system in a magnetic fields, Phys. Rev. D 29 2375 (1984).
- [7] F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme, *Supersymmetry in Quantum Mechanics*, World Scientific (2001).
- [8] G. Junker, Supersymmetric Methods in Quantum and Statistical Physics, Springer (1996).
- [9] S. Hernandez, G. Murguía, A. Raya, Hard and Soft Supersymemtry Breaking for "Graphinos" in Uniform Magnetic Fields. Enviado a publicación.
- [10] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics Non-relativistic Theory, Vol.3, Pergamon Press, 3a ed. (1977).
- [11] M. Abramowitz, I. Stegun, Handbook of Mathematical Function with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, Dover Publications (1972).
- [12] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons (1977).
- [13] A. De Martino, L. Dell'Anna, R. Egger Magnetic confinement of massless Dirac fermions in graphene, Phycs Rev. Lett. Vol 98 066802 (2007).