

## Estados ligados en el Grafeno en presencia de campo magnético Bound states in graphene under the interaction of magnetic field

Nancy Y. López <sup>a,\*</sup>, Omar Pedraza-Ortega <sup>b</sup>, L. A. López <sup>b</sup>, R. Arceo Reyes <sup>c</sup>

<sup>a</sup> Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México.

<sup>b</sup> Área Académica de Matemáticas y Física, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México.

<sup>c</sup> Facultad de Ciencias en Física y Matemáticas, Universidad Autónoma de Chiapas, 29050, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México.

### Resumen

En este trabajo se estudian soluciones exactas para los estados ligados para un electrón de Dirac en Grafeno en presencia de varios campos magnéticos externos con simetría traslacional. Usando el Método de Iteración Asintótica, se resuelve la ecuación de Dirac-Weyl independiente del tiempo. Finalmente, se estudian los comportamientos del espectro discreto.

**Palabras Clave:** Grafeno, Método de Iteración Asintótica, Estados ligados, Niveles de Energía.

### Abstract

In this work we study exact solutions for the bound states for a Dirac electron in Graphene under the interaction of several external magnetic fields with translational symmetry. Using the Asymptotic Iteration Method, the time-independent Dirac-Weyl equation is solved. Finally, the behaviors of the discrete spectrum are studied.

**Keywords:** Graphene, Asymptotic Iteration Method, Bound states, Discrete spectrum.

## 1. Introducción

El Grafeno visto como una monocapa de átomos de carbono ha recibido una enorme atención en los últimos años debido a que puede llegar a ser un material apropiado para el desarrollo de dispositivos electrónicos (ver Kotov *et al.* (2012) para mayor referencia). Uno de los puntos cruciales para el diseño de dispositivos electrónicos, es el confinamiento de electrones en Grafeno. Es bien sabido que los electrones de Dirac no pueden ser confinados en el Grafeno por potenciales electrostáticos debido a la paradoja de Klein, como se puede ver en el trabajo de da Silva Leite *et al.* (2015), por ello se recurre a considerar el confinamiento magnético, como se muestran en los trabajos Castro Neto *et al.* (2009) y Miransky y Shovkovy (2015).

Recientemente, se han llevado a cabo una serie de estudios sobre la interacción de los electrones del grafeno que se muestran en campos magnéticos perpendiculares a la superficie del grafeno Ghosh (2008), Kuru *et al.* (2009), Eshghi y Mehraban (2017) y de Souza *et al.* (2014) o también pueden incluir campos electrostáticos paralelos a la superficie como se aborda en el trabajo de Peres y Castro (2007). Estos trabajos muestran las diferentes formas en las que se pueden confinar las cargas,

estudiando la ecuación de Dirac-Weyl para poder entender la dinámica de los electrones en el grafeno.

Los trabajos antes mencionados, muestran que los portadores de carga sin masa pueden ser confinados por barreras eléctricas y magnéticas apropiadas, para un número limitado de ejemplos. Estas configuraciones de campos eléctricos y magnéticos, aun no han sido reportado a nivel experimental, debido a que dichas configuraciones de campo no son fáciles de implementar en el laboratorio. Sin embargo, se ha mostrado que diferentes configuraciones de campos eléctricos y magnéticos conllevan a diferentes efectos en el confinamiento.

Por otra parte, los efectos combinados de los campos eléctricos y magnéticos, pueden usarse como filtros o interruptores de frecuencia controlados casi linealmente a través de diseños adecuados Song y Guo (2011). Por ejemplo, en el trabajo reportado por Silvestrov y Efetov (2007), las muestras de grafeno son cortadas de formas adecuada y considerando ciertos perfiles de campos magnéticos y campos eléctricos a través de puertas con un tamaño adecuado para superar el efecto Klein, lo que los convierte en posibles bloques de construcción de dispositivos nanoelectrónicos.

Las ideas mencionadas en los párrafos anteriores, muestran

\* Autor para correspondencia: lo264098@uaeh.edu.mx

**Correo electrónico:** lo264098@uaeh.edu.mx (Nancy Y. López), omarp@uaeh.edu.mx (Omar Pedraza Ortega), lalopez@uaeh.edu.mx (Luis A. López Suarez), roberto.arceo@unach.mx (Roberto Arceo Reyes)

que desde el punto de vista teórico, el Grafeno es una estructura ideal para estudiar la física de los sistemas bidimensionales, inmersos en campos eléctricos y magnéticos. En este trabajo se estudian dos perfiles específicos (un campo magnético constante y un campo magnético singular) de campo magnético. Resolviendo la ecuación de Dirac-Weyl para estos perfiles de campo magnético se obtienen soluciones exactas usando el Método de Iteración Asintótica. Cabe mencionar que las técnicas estándar para resolver este tipo de ecuaciones son el Método de Frobenius, el de Nikoforov-Uvarov (ver Eshghi y Mehraban (2017)) o técnicas de Teorías de Supersimetría (ver Kuru et al. (2009)).

El Método de Iteración Asintótica fue propuesto por Ciftci et al. (2003) para obtener los eigenvalores y eigenfunciones de ecuaciones diferenciales lineales homogéneas de segundo orden, el cual ha mostrado ser más eficiente en algunos casos. Por ejemplo en el trabajo desarrollado por Cho et al. (2012) se ha empleado para el cálculo de las frecuencias de los modos cuasi normales para una gran variedad de agujeros negros y más recientemente se han estudiado los modos cuasi normales de un agujero negro de Schwarzschild de Sitter rodeado de quintesencia (ver el trabajo de Jiménez-Camargo et al. (2022)).

La estructura de este trabajo es la siguiente, en la sección 2, se discute de forma breve la ecuación de Dirac-Weyl a resolver en presencia de campos magnéticos externos. En la sección 3 se estudian los dos perfiles de campo magnético: un campo constante y un perfil de campo magnético singular, usando el Método de Iteración Asintótica. Finalmente en la sección 4 se discuten los resultados obtenidos.

## 2. Ecuación de Dirac-Weyl

En el Grafeno, un electrón de Dirac se mueve con una velocidad de Fermi efectiva  $v_F \approx c/300 = 10^6 \text{ m/s}$ , siendo  $c$  la velocidad de la luz en el vacío y se comporta como una partícula sin masa. El Hamiltoniano efectivo alrededor de un punto de Dirac para un electrón de Dirac tiene la siguiente forma

$$\mathbf{H} = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}, \quad (1)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  son las matrices de Pauli y  $\mathbf{p} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$  es el operador de momento en dos dimensiones. Por lo tanto la ecuación de Dirac-Weyl en (2+1)-dimensiones toma la siguiente forma

$$v_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \Phi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Phi(x, y, t)}{\partial t}. \quad (2)$$

Aquí, únicamente se considerarán estados estacionarios, entonces sustituyendo  $\Phi(x, y, t) = \Psi(x, y)e^{-iEt/\hbar}$  en (2), se tiene la ecuación de Dirac-Weyl independiente del tiempo

$$v_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \Psi(x, y) = E\Psi(x, y), \quad (3)$$

donde

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} \psi_+(x, y) \\ \psi_-(x, y) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

es la función de onda de dos componentes, siendo  $\psi_{\pm}$  las componentes del vector columna.

Si el electrón de Dirac interactúa con un campo magnético externo ( $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ) perpendicular al plano del Grafeno, entonces es necesario reemplazar al operador  $\mathbf{p}$  por  $\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c$ , de

acuerdo a la regla de mínimo acoplamiento, siendo  $-e$  la carga del electrón y el vector potencia es dado por

$$\mathbf{A} = (A_x, A_y, 0). \quad (5)$$

Entonces (3) se puede reescribir como

$$v_F \left[ \boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] \Psi(x, y) = E\Psi(x, y). \quad (6)$$

De la ecuación (6), uno puede tener dos ecuaciones acopladas para las componentes  $\psi_+(x, y)$  y  $\psi_-(x, y)$ , dadas por

$$-i \left[ \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c\hbar} (iA_x + A_y) \right] \psi_- = \mathcal{E} \psi_+, \quad (7)$$

$$-i \left[ \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c\hbar} (iA_x - A_y) \right] \psi_+ = \mathcal{E} \psi_-, \quad (8)$$

donde  $\mathcal{E} = E/(\hbar v_F)$ . Particularmente considerando que el campo magnético externo posee una simetría a lo largo de una dirección en la cual el problema pueda ser resuelto de forma analítica, es decir, fijando el eje de simetría en la dirección  $y$  y usando la norma de Landau, el vector potencial puede escribirse como

$$\mathbf{A} = (0, A_y(x), 0), \quad \mathbf{B} = \left( 0, 0, \frac{dA_y}{dx} \right). \quad (9)$$

Con la norma de Landau, las expresiones (7) y (8) son independientes de la coordenada  $y$ , por lo que la función de onda puede ser parametrizada como

$$\Psi(x, y) = e^{iky} (\psi_+(x), i\psi_-(x))^T, \quad (10)$$

donde  $k$  es el número de onda en la dirección  $y$  y  $T$  denota la transpuesta del vector columna. Así, las expresiones (7) y (8) toman la siguiente forma

$$\left[ \frac{d}{dx} + k + \frac{e}{c\hbar} A_y \right] \psi_-(x) = \mathcal{E} \psi_+(x), \quad (11)$$

$$\left[ -\frac{d}{dx} + k + \frac{e}{c\hbar} A_y \right] \psi_+(x) = \mathcal{E} \psi_-(x). \quad (12)$$

Usando las ecuaciones (11) y (12), se obtiene una ecuación tipo Schrödinger para  $\psi_+$  y  $\psi_-$ , las cuales pueden escribirse como

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} + V_{\pm}(x) \right] \psi_{\pm} = \epsilon \psi_{\pm}(x). \quad (13)$$

Con

$$\epsilon = E^2/(\hbar^2 v_F^2), \quad (14)$$

y el potencial efectivo  $V_{\pm}(x)$  es dado por

$$V_{\pm}(x) = \left( k + \frac{e}{c\hbar} A_y(x) \right)^2 \pm \frac{e}{c\hbar} \frac{dA_y(x)}{dx}. \quad (15)$$

En la siguiente sección se estudiarán algunos casos especiales de campo magnético externo.

## 3. Perfiles de campo magnético

En esta sección se considerará el caso especial del vector potencial que produzca soluciones analíticas, particularmente se estudiará un campo magnético constante y un campo

magnético singular, es decir, estos campos toman la siguiente forma:

$$\mathbf{B}_1 = (0, 0, B_0), \quad \mathbf{A}_1 = (0, B_0 x, 0), \quad (16)$$

$$\mathbf{B}_2 = \left(0, 0, \frac{B_0}{x^2}\right), \quad \mathbf{A}_2 = \left(0, -\frac{B_0}{x}, 0\right). \quad (17)$$

Cabe mencionar que estos perfiles de campo magnético han sido obtenidos en el trabajo de Kuru *et al.* (2009), usando técnicas de Supersimetría. En este trabajo se estudian dichos perfiles usando el Método de Iteración Asintótica (ver apéndice Apéndice A), en las siguientes subsecciones.

### 3.1. Campo magnético constante

De (16) y (15), los potenciales efectivos vienen dados por

$$V_{\pm} = \frac{\omega^2}{4} \left(x + \frac{2k}{\omega}\right)^2 \pm \frac{\omega}{2}, \quad \omega = \frac{2eB_0}{c\hbar}. \quad (18)$$

En la figura 1 se muestran los potenciales efectivos dados por (18).

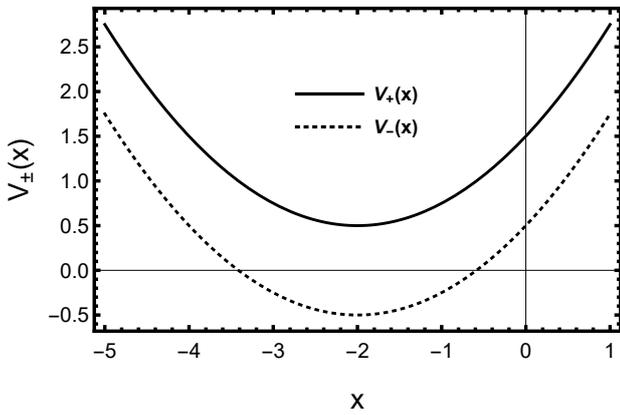


Figura 1: Gráfica de los potenciales efectivos  $V_+(x)$  y  $V_-(x)$ , dados por (18), para un campo magnético constante. Aquí  $\omega = k = 1$ .

En este caso, las ecuaciones a resolver son:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\omega^2}{4} \left(x + \frac{2k}{\omega}\right)^2 \pm \frac{\omega}{2}\right] \psi_{\pm} = \epsilon \psi_{\pm}. \quad (19)$$

Es conveniente realizar el siguiente cambio de variable

$$z = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x + \frac{2k}{\omega}\right). \quad (20)$$

Así, implementando (20), las expresiones dadas por (19) se pueden escribir como

$$\left[-\frac{d^2}{dz^2} + z^2\right] \psi_{\pm}(z) = \left(\frac{2\epsilon}{\omega} \mp 1\right) \psi_{\pm}(z). \quad (21)$$

Para resolver estas ecuaciones con el Método de Iteración Asintótica, es importante primer estudiar el comportamiento asintótico de (21) cuando  $z \rightarrow \pm\infty$  ( $x \rightarrow \pm\infty$ ). Entonces las ecuaciones (21) se pueden reescribir como

$$\left[-\frac{d^2}{dz^2} + z^2\right] \psi_{\pm} = 0, \quad (22)$$

cuyas soluciones son:

$$\psi_{\pm} \approx a e^{-z^2/2} + b e^{z^2/2}. \quad (23)$$

Para satisfacer condición de frontera  $\psi_{\pm}(z \rightarrow \pm\infty) = 0$ , entonces  $b = 0$ , es decir, (23) define el comportamiento de la función de onda en  $z \rightarrow \pm\infty$  ( $x \rightarrow \pm\infty$ ). Por lo tanto, uno puede escribir a la función de onda como

$$\psi_{\pm} = e^{-z^2/2} f_{\pm}(z). \quad (24)$$

Donde  $f_{\pm}(z)$  es una nueva función de onda a determinar. Introduciendo (24) en (21), se tiene

$$\frac{d^2 f_{\pm}(z)}{dz^2} = \lambda_{0\pm}(z) \frac{d f_{\pm}(z)}{dz} + s_{0\pm}(z) f_{\pm}(z). \quad (25)$$

Donde

$$\lambda_{0+}(z) = \lambda_{0-}(z) = 2z, \quad (26)$$

$$s_{0+}(z) = \frac{2}{\omega} (\omega - \epsilon), \quad (27)$$

$$s_{0-}(z) = -\frac{2\epsilon}{\omega}. \quad (28)$$

De acuerdo a (A.3) y (A.4), se pueden calcular las siguientes funciones auxiliares:

$$\lambda_{1+}(z) = \frac{2}{\omega} (2\omega - \epsilon + 2\omega z^2), \quad (29)$$

$$\lambda_{1-}(z) = \frac{2}{\omega} (\omega - \epsilon + 2\omega z^2), \quad (30)$$

$$s_{1+}(z) = \frac{4z}{\omega} (\omega - \epsilon), \quad (31)$$

$$s_{1-}(z) = -\frac{4z\epsilon}{\omega}, \quad (32)$$

$$\lambda_{2+}(z) = \frac{4z}{\omega} (5\omega - 2\epsilon + 2\omega z^2), \quad (33)$$

$$\lambda_{2-}(z) = \frac{4z}{\omega} (3\omega - 2\epsilon + 2\omega z^2), \quad (34)$$

$$s_{2+}(z) = \frac{4}{\omega^2} (\omega - \epsilon) (3\omega - \epsilon + 2\omega z^2), \quad (35)$$

$$s_{2-}(z) = -\frac{4\epsilon}{\omega^2} (2\omega - \epsilon + 2\omega z^2). \quad (36)$$

Con la ayuda de las ecuaciones (26)-(36), se pueden encontrar los niveles de energía. Aplicando (A.17), se tiene:

$$\delta_{1+}(z) = 4(\omega - \epsilon)(2\omega - \epsilon) = 0, \quad m = 1, \quad (37)$$

$$\delta_{2+}(z) = 8(\omega - \epsilon)(2\omega - \epsilon)(3\omega - \epsilon) = 0, \quad m = 2. \quad (38)$$

Aquí los niveles de energía son obtenidos de las raíces de las expresiones anteriores. De esta forma se tiene que las raíces de (37) son:  $\epsilon_{1+} = \omega$  y  $\epsilon_{2+} = 2\omega$ , mientras que las raíces de (38) son:  $\epsilon_{1+} = \omega$ ,  $\epsilon_{2+} = 2\omega$  y  $\epsilon_{3+} = 3\omega$ . En el caso general, los niveles de energía son

$$\epsilon_{n+} = n\omega, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (39)$$

En el cálculo de las eigenfunciones, se emplea (A.16), así primero se deben de calcular las funciones  $\alpha_{1+}(z)$  y  $\alpha_{2+}(z)$ , evaluándolas en las energías correspondientes. De esta forma se tiene que

$$\alpha_{1+}(z) = \left. \frac{s_{0+}(z)}{\lambda_{0+}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{1+}} = \left. \frac{s_{1+}(z)}{\lambda_{1+}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{1+}} = 0, \quad (40)$$

$$\alpha_{2+}(z) = \left. \frac{s_{1+}(z)}{\lambda_{1+}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{2+}} = \left. \frac{s_{2+}(z)}{\lambda_{2+}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{2+}} = -\frac{1}{z}. \quad (41)$$

Por lo que las eigenfunciones para el estado base y el primer estado excitado toman las siguiente forma

$$f_{1+}(z) = \exp\left[-\int^z \alpha_{1+}(z')dz'\right] = 1, \quad (42)$$

$$f_{2+}(z) = \exp\left[\int^z \frac{dz'}{z'}\right] = z. \quad (43)$$

Donde nuevamente, en el caso general las funciones  $f_+(z)$  son los polinomios de Hermite ( $f_{n+}(z) = H_n(z)$ ). De esta forma, las funciones de onda del estado base, el primer estado excitado y el estado  $n$ -esimo son

$$\psi_{1+}(z) = c_1 e^{-z^2/2} H_0(z) = c_1 e^{-z^2/2}, \quad (44)$$

$$\psi_{2+}(z) = c_2 e^{-z^2/2} H_1(z) = c_2 e^{-z^2/2} 2z. \quad (45)$$

$$\psi_{n+}(z) = c_n e^{-z^2/2} H_n(z) \quad (46)$$

con  $c_1, c_2$  y  $c_n$  constantes de normalización a determinar. En el caso  $f_-(z)$ , se procede de forma similar que en caso anterior. Así se tiene

$$\delta_{1-}(z) = 4\epsilon(\omega - \epsilon) = 0, \quad m = 1, \quad (47)$$

$$\delta_{2-}(z) = 4\epsilon(\omega - \epsilon)(2\omega - \epsilon) = 0 \quad m = 2. \quad (48)$$

Las raíces de (47) son:  $\epsilon_{0-} = 0$  y  $\epsilon_{1-} = \omega$ , y las raíces de (48) son:  $\epsilon_{0-} = 0, \epsilon_{1-} = \omega$  y  $\epsilon_{2-} = 2\omega$ . En el caso general, los niveles de energía son

$$\epsilon_{n-} = n\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (49)$$

Es posible obtener las funciones:

$$\alpha_{0-}(z) = \left. \frac{s_{0-}(z)}{\lambda_{0-}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{0-}} = \left. \frac{s_{1-}(z)}{\lambda_{1-}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{0-}} = 0, \quad (50)$$

$$\alpha_{1-}(z) = \left. \frac{s_{1-}(z)}{\lambda_{1-}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{1-}} = \left. \frac{s_{2-}(z)}{\lambda_{2-}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{1-}} = -\frac{1}{z}. \quad (51)$$

Por lo que para el estado base y el primer estado excitado se tiene:

$$f_{0-}(z) = \exp\left[-\int^z \alpha_{0-}(z')dz'\right] = 1, \quad (52)$$

$$f_{1-}(z) = \exp\left[\int^z \frac{dz'}{z'}\right] = z. \quad (53)$$

Nuevamente las funciones  $f_-(z)$  son los polinomios de Hermite ( $f_{n-}(z) = H_n(z)$ ).

Por lo tanto, se obtienen las siguientes funciones:

$$\psi_{0-}(z) = c_0 e^{-z^2/2} H_0(z) = c_0 e^{-z^2/2}, \quad (54)$$

$$\psi_{1-}(z) = c_1 e^{-z^2/2} H_1(z) = c_1 e^{-z^2/2} 2z. \quad (55)$$

$$\psi_{n-}(z) = c_n e^{-z^2/2} H_n(z), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (56)$$

con  $c_0, c_1$  y  $c_n$  constantes a determinar. Insertando (56) y (46) en (10), se tiene

$$\Psi_0(x, y) = e^{-\frac{\omega}{4}(x+\frac{2k}{\omega})^2 + iky} \left( i c_0 H_0 \left[ \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( x + \frac{2k}{\omega} \right) \right] \right), \quad (57)$$

$$\Psi_n(x, y) = e^{-\frac{\omega}{4}(x+\frac{2k}{\omega})^2 + iky} \left( c_{n-1} H_{n-1} \left[ \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( x + \frac{2k}{\omega} \right) \right] \right), \quad (58)$$

con  $n = 1, 2, 3, \dots$ , mientras que usando (39) y (49) en (14), las energías en cada caso son

$$E_{n\pm} = \pm \sqrt{\frac{2neB_0\hbar v_F^2}{c}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (59)$$

Estos niveles de energía son llamados lo *niveles de Landau*, donde la energía del estado base no depende de  $B_0$ , mientras que los niveles de los estados excitados depende del campo magnético como  $\sqrt{B_0}$ . Los eigenvalores  $E_{n+} > 0$  corresponden a la banda de conducción del Grafeno, mientras que  $E_{n-} < 0$  corresponden a la banda de valencia de Grafeno.

Los valores de energía (59) considerando un campo magnético constante encontrados aquí usando el Método de Iteración Asintótica, coinciden con los que fueron reportados por Kuru *et al.* (2009), así como las eigenfunciones dadas por (57) y (58).

### 3.2. Campo magnético singular

Nuevamente, insertando de (17) en (15), se tiene

$$V_{\pm} = k^2 + \frac{D(D \pm 1)}{x^2} - \frac{2kD}{x}, \quad D = \frac{eB_0}{c\hbar}. \quad (60)$$

Cabe mencionar que  $D > 1$  en  $V_-$ . A diferencia del campo magnético constante, aquí el sistema esta definido únicamente en la mitad del intervalo ( $x \in (0, +\infty)$ ). También a diferencia del caso anterior, el campo magnético diverge en el origen de coordenadas y se anula cuando  $x \rightarrow +\infty$ . La gráfica de los potenciales (60) se muestran en la figura 2.

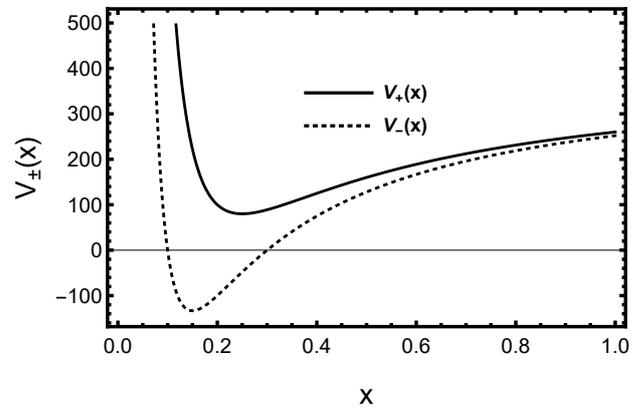


Figura 2: Gráfica de los potenciales efectivos  $V_+(x)$  y  $V_-(x)$ , dados por (60), para un campo magnético singular. Aquí  $D = 3$  y  $k = 20$ .

Las ecuaciones a resolver para este campo magnético singular son:

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} + k^2 + \frac{D(D \pm 1)}{x^2} - \frac{2kD}{x} \right] \psi_{\pm} = \epsilon \psi_{\pm}. \quad (61)$$

Para implementar el Método de Iteración Asintótico, estudie-mos el comportamiento asintótico de las ecuaciones anteriores cuando  $x \rightarrow +\infty$  (particularmente se realiza un desarrollo de Taylor de los potenciales  $V_{\pm}$  cuando  $x \rightarrow +\infty$ ). Así se tiene

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] \psi_{\pm} = \epsilon \psi_{\pm}. \quad (62)$$

Implementando el cambio de variable  $z = 2\rho x$ , (con  $\rho = \sqrt{k^2 - \epsilon}$ ), la expresión anterior se transforma en

$$\left[ -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{4} \right] \psi_{\pm}(z) = 0. \tag{63}$$

Este par de ecuaciones, tiene las siguiente solución

$$\psi_{\pm} = Ae^{z/2} + Be^{-z/2}. \tag{64}$$

Nuevamente, se debe de satisfacer la condición de frontera  $\psi_{\pm}(x \rightarrow +\infty) = 0$  ( $\psi_{\pm}(z \rightarrow +\infty) = 0$ ), por lo que  $A = 0$ . El otro comportamiento que se debe de analizar de (61) es cuando  $x \rightarrow 0$ . Esto conlleva a

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{D(D \pm 1)}{x^2} \right] \psi_{\pm} = 0, \tag{65}$$

que en la variable  $z$ , se puede expresar como

$$\left[ -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{D(D \pm 1)}{z^2} \right] \psi_{\pm}(z) = 0, \tag{66}$$

Donde las soluciones de estas ecuaciones son

$$\psi_+ = a' z^{D+1} + b' z^{-D}, \tag{67}$$

$$\psi_- = A' z^D + B' z^{1-D}. \tag{68}$$

Aquí, las funciones  $\psi_{\pm}$  deben de estar bien definidas cuando  $x \rightarrow 0$  ( $z \rightarrow 0$ ), por lo que aplicando estas condiciones de frontera, se tiene que  $b' = B' = 0$ .

De acuerdo a los comportamientos asintóticos de las funciones  $\psi_{\pm}$  estudiadas alrededor de infinito y cero (ver ecuaciones (64), (67) y (68)), estas se implementan de la siguiente forma en la función de onda, como

$$\psi_+(x) = z^{D+1} e^{-z/2} f_+(z), \tag{69}$$

$$\psi_-(x) = z^D e^{-z/2} f_-(z), \tag{70}$$

donde  $f_{\pm}(x)$  son funciones a determinar. Introduciendo (69) y (70) en (61), se tiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden para las funciones  $f_{\pm}(x)$

$$\frac{d^2 f_{\pm}(z)}{dz^2} = \lambda_{0\pm}(z) \frac{df_{\pm}(z)}{dz} + s_{0\pm}(z) f_{\pm}(z). \tag{71}$$

con

$$\lambda_{0+}(z) = \frac{z - 2(D + 1)}{z}, \tag{72}$$

$$s_{0+}(z) = \frac{(4k^2 - \rho^2 - 4\epsilon)z + 4(D + 1)\rho^2 - 8Dk\rho}{4\rho^2 z}, \tag{73}$$

$$\lambda_{0-}(z) = \frac{z - 2D}{z}, \tag{74}$$

$$s_{0-}(z) = \frac{(4k^2 - \rho^2 - 4\epsilon)z + 4D\rho^2 - 8Dk\rho}{4\rho^2 z}. \tag{75}$$

Introduciendo (72)-(75) en (A.3), (A.4), se calculan  $\lambda_{n\pm}(x)$  y  $s_{n\pm}(x)$  y usando (A.17), la solución de  $\delta_m(z, \epsilon) = 0$ , permite obtener los niveles de energía. Así, para  $m = 1$  se tiene

$$\delta_{1+} = (Dk - \rho[D + 2])(Dk - \rho[D + 1]), \tag{76}$$

cuyas soluciones son

$$\epsilon_{1+} = \frac{k^2(2D + 1)}{(D + 1)^2}, \quad \epsilon_{2+} = \frac{2k^2(2D + 2)}{(D + 2)^2}. \tag{77}$$

Para  $m = 2$ , se tiene

$$\delta_{2+} = (Dk - \rho[D + 1])(Dk - [D + 3]\rho)(Dk - [D + 2]\rho). \tag{78}$$

Las raíces de la ecuación anterior son

$$\epsilon_{1+} = \frac{k^2(2D + 1)}{(D + 1)^2}, \quad \epsilon_{2+} = \frac{2k^2(2D + 2)}{(D + 2)^2}, \quad \epsilon_{3+} = \frac{3k^2(2D + 3)}{(D + 3)^2}. \tag{79}$$

En el caso general se obtiene

$$\epsilon_{n+} = \frac{k^2 n(2D + n)}{(n + D)^2} = k^2 D^2 \left( \frac{1}{D^2} - \frac{1}{(n + D)^2} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \tag{80}$$

Para  $f_-(x)$ , los niveles de energía de la primera iteración ( $m = 1$ ) conduce a

$$\delta_{1-} = (\rho - k)(\rho[D + 1] - Dk) = 0, \tag{81}$$

cuyas soluciones son

$$\epsilon_{-0} = 0, \quad \epsilon_{-1} = \frac{k^2(2D + 1)}{(D + 1)^2}. \tag{82}$$

Mientras que para  $m = 2$ , se tiene

$$\delta_{2-} = (\rho - k)(\rho[D + 1] - Dk)(\rho[D + 2] - Dk), \quad m = 2. \tag{83}$$

Las raíces de  $\delta_{2-}$  son

$$\epsilon_{0-} = 0, \quad \epsilon_{1-} = \frac{k^2(2D + 1)}{(D + 1)^2}, \quad \epsilon_{2-} = \frac{2k^2(2D + 2)}{(D + 2)^2}. \tag{84}$$

Para el caso general se tiene

$$\epsilon_{n'-} = \frac{k^2 n'(2D + n')}{(n' + D)^2} = k^2 D^2 \left( \frac{1}{D^2} - \frac{1}{(n' + D)^2} \right), \quad n' = 0, 1, 2, \dots \tag{85}$$

Usando el resultado obtenido para  $\epsilon_{n\pm}$ , la variable  $\rho$  toma la siguiente forma

$$\rho_+ = \frac{kD}{n + D}, \quad \rho_- = \frac{kD}{n' + D}. \tag{86}$$

Combinado (80) y (85) se puede escribir la energía como

$$E_n = \pm \hbar v_F k D \sqrt{\frac{1}{D^2} - \frac{1}{(n + D)^2}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{87}$$

Aquí, cabe mencionar que la energía del estado base no tiene dependencia de  $B_0$ , pero los niveles de Landau de los estados excitados tiene dependencia de  $B_0$  de forma no trivial, donde la dependencia con  $k$  es una relación lineal, dando un número infinito de niveles de energía. De la figura 3, se aprecia que si  $n$  crece, la separación entre los niveles de energía se van reduciendo.

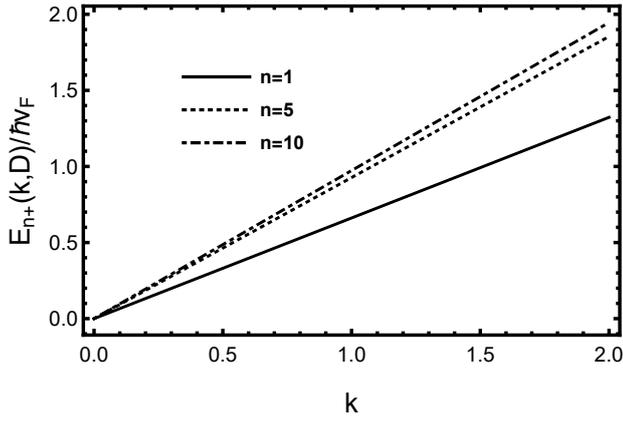


Figura 3: Gráfica de los niveles de energía  $\frac{E_{n+}}{\hbar v_F}$  como función de  $k$ , dados por (87), para diferentes valores de  $n$ , con  $D = 3$ .

Para calcular las funciones  $f_{\pm}$ , primero se deben de hallar las siguientes funciones auxiliares

$$\alpha_{1+} = \left. \frac{s_{0+}(z)}{\lambda_{0+}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{1+}} = \left. \frac{s_{1+}(z)}{\lambda_{1+}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{1+}} = 0. \quad (88)$$

$$\alpha_{2+} = \left. \frac{s_{1+}(z)}{\lambda_{1+}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{2+}} = \left. \frac{s_{2+}(z)}{\lambda_{2+}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{2+}} = \frac{1}{2D+2-z}, \quad (89)$$

$$\alpha_{0-} = \left. \frac{s_{0-}(z)}{\lambda_{0-}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{0-}} = \left. \frac{s_{1-}(z)}{\lambda_{1-}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{0-}} = 0, \quad (90)$$

$$\alpha_{1-} = \left. \frac{s_{1-}(z)}{\lambda_{1-}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{1-}} = \left. \frac{s_{2-}(z)}{\lambda_{2-}(z)} \right|_{\epsilon=\epsilon_{1-}} = \frac{1}{2D-z}. \quad (91)$$

De esta forma, se tiene

$$f_{1+} = \exp \left[ - \int \alpha_{1+}(z') dz' \right] = 1, \quad (92)$$

$$f_{2+} = \exp \left[ - \int \frac{dz'}{2D+2-z'} \right] = 2D+2-z, \quad (93)$$

$$f_{0+} = \exp \left[ - \int \alpha_{0-}(x') dx' \right] = 1, \quad (94)$$

$$f_{1-} = \exp \left[ \frac{k dx'}{-kx' + D + 1} \right] = 2D - z. \quad (95)$$

En el caso general  $f_{n+}(z) = L_{n-1}^{2D+1}(z)$  y  $f_{n-}(z) = L_n^{2D-1}(z)$ , con  $L_n^s(z)$  los polinomios asociados de Laguerre. Introduciendo  $f_{1+}$ ,  $f_{2+}$ ,  $f_{0-}$  y  $f_{1-}$  en (69) y (70), se tiene

$$\psi_{1+} = c_1 z^{D+1} e^{-z/2} = c_1 z^{D+1} e^{-z/2} L_0^{2D+1}(z), \quad (96)$$

$$\begin{aligned} \psi_{2+} &= c_2 z^{D+1} e^{-z/2} [2D+2-z] \\ &= c_2 z^{D+1} e^{-z/2} L_1^{2D+1}(z), \end{aligned} \quad (97)$$

$$\psi_{0-} = c'_0 z^D e^{-z/2} = c'_0 z^D e^{-z/2} L_0^{2D-1}(z), \quad (98)$$

$$\psi_{1-} = c'_1 z^D e^{-z/2} [2D-z] = c'_1 z^D e^{-z/2} L_1^{2D-1}(z). \quad (99)$$

Con  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $c'_0$  y  $c'_1$  constantes de normalización a determinar. Que en el caso general

$$\psi_{n+} = c_n z^{D+1} e^{-z/2} L_{n-1}^{2D+1}(z), \quad (100)$$

$$\psi_{n-} = c'_n z^D e^{-z/2} L_n^{2D-1}(z). \quad (101)$$

Nuevamente, introduciendo (100) y (101) en (10), se obtienen

$$\Psi_0(x, y) = e^{iky} \left( ic_0 [2kx]^D e^{-kx} L_0^{2D-1} [2kx] \right), \quad (102)$$

$$\Psi_n(x, y) = e^{iky} \left( c_{n-1} \left[ \frac{2kDx}{n+D} \right]^{D+1} e^{-\frac{kDx}{n+D}} L_{n-1}^{2D+1} \left[ \frac{2kDx}{n+D} \right] \right. \\ \left. ic_n \left[ \frac{2kDx}{n+D} \right]^D e^{-\frac{kDx}{n+D}} L_n^{2D-1} \left[ \frac{2kDx}{n+D} \right] \right). \quad (103)$$

Aquí  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Cabe mencionar que los resultados hallados aquí para la energía y las funciones de onda para los portadores de carga en presencia de un campo magnético singular, coinciden con los reportados por Kuru *et al.* (2009).

Es bien sabido que si el Hamiltoniano de Dirac-Weyl, no depende explícitamente de la coordenada y el momento canónico  $p_y = \hbar k$  es una constante. Por otra parte, si la partícula cargada  $-e$  esta bajo la influencia de un campo magnético  $B_z$  con un vector potencial  $A_y(x)$ , entonces la componente del momento ahora es  $p_y = \pi_y - eA_y/c$ , donde  $\pi_y$  es el momento cinemático en la dirección  $y$ , es decir,  $\pi_y = \hbar k + eA_y/c$  define el movimiento en la dirección  $y$ .

Para entender a  $\pi_y$ , consideremos un ejemplo muy particular, es decir, tomemos  $k = 0$  y  $A_y = B_0 x$ , por lo que

$$\pi_y = eB_0 x/c, \quad (104)$$

si los valores de  $\pi_y$  son positivos (lo cual implica que  $x > 0$ ), entonces la partícula situada en algún punto  $(x, y)$  se moverá hacia  $y > 0$ , mientras que si  $\pi_y < 0$  para alguna  $x'$  ( $x' < 0$ ), entonces la partícula localizada en  $(x', y)$  se moverá en la dirección en la que  $y < 0$ .

Finalmente, como se menciona en los párrafos anteriores, los resultados hallados para las energías y las funciones de onda usando el Método de Iteración Asintótica coinciden con los reportados por Kuru *et al.* (2009) usando técnicas de Teorías de Supersimetría.

#### 4. Conclusiones

En este trabajo se han estudiado dos casos específicos donde la función de onda de electrones en una capa de Grafeno puede ser hallada de forma exacta bajo la presencia de un campo magnético perpendicular a la superficie del Grafeno. La intención principal de este trabajo es mostrar como el uso del Método de Iteración Asintótica permite resolver la ecuación de Dirac-Weyl de forma exacta, brindando así una técnica adicional a las ya empleadas, como lo son el Método de Frobenius, el de Nikoforov-Uvarov o técnicas de Teorías de Supersimetría.

De esta forma se han estudiado dos perfiles de campo magnético que han podido ser resueltos de forma exacta, es decir, se han obtenido las funciones de onda y las energías para un electrón de Dirac.

De los resultados obtenidos para las configuraciones de campo magnético que se consideraron, los estados ligados corresponden únicamente al movimiento de los portadores de carga en la dirección  $x$  y en el caso de campo magnético singular los niveles de Landau presentan una dependencia explícita del número de onda  $k$ .

Se ha mostrado en este trabajo, que el Método de Iteración Asintótica ha probado ser útil para resolver la ecuación de Dirac-Weyl, por lo que eventualmente podrían estudiarse otras

configuraciones de campo magnético usando este método para hallar soluciones exactas.

Cabe mencionar también que la mayor parte de los potenciales magnéticos que conllevan a soluciones exactas, son difíciles de implementarlos en el laboratorio. Usualmente uno asume que el material es infinito y que se puede implementar algún perfil de campo magnético en todo el espacio.

En esta dirección, sería interesante definir algún perfil de campo magnético en una región finita del espacio. El problema de este escenario es implementar adecuadamente las condiciones de frontera para hallar soluciones.

Finalmente, los estados ligados hallados en este trabajo corresponden únicamente al movimiento en la dirección  $x$ , sin embargo, como el problema es bidimensional, entonces la velocidad promedio en la dirección  $y$  de esos estados ligados pueden ser calculados al tomar la derivada respecto de  $k$  a los niveles de energía. De la figura 3 y de la ecuación (87), se puede ver que existe una envolvente que toca los puntos finales de los niveles de energía y dicha envolvente se obtiene cuando  $n$  se incrementa considerablemente. Esto significa que, en estos puntos, es donde los estados desaparecen como estados ligados y se transforman en estados de dispersión, con una velocidad promedio  $\pm v_F$ .

### Agradecimientos

Los autores agradecen al SNI-CONAHCYT. Nancy Y. López agradece al CONAHCYT por la beca otorgada 822768.

### Referencias

Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., y Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162.

Cho, H. T., Cornell, A. S., Doukas, J., Huang, T. R., y Naylor, W. (2012). A New Approach to Black Hole Quasinormal Modes: A Review of the Asymptotic Iteration Method. *Adv. Math. Phys.*, 2012:281705.

Ciftci, H., Hall, R. L., y Saad, N. (2003). Asymptotic iteration method for eigenvalue problems. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 36(47):11807–11816.

da Silva Leite, L., Filgueiras, C., Cogollo, D., y Silva, E. O. (2015). Influence of spatially varying pseudo-magnetic field on a 2d electron gas in graphene. *Physics Letters A*, 379(10):907–911.

de Souza, J., de Lima Ribeiro, C., y Furtado, C. (2014). Bound states in disclinated graphene with coulomb impurities in the presence of a uniform magnetic field. *Physics Letters A*, 378(30):2317–2324.

Eshghi, M. y Mehraban, H. (2017). Exact solution of the dirac-weyl equation in graphene under electric and magnetic fields. *Comptes Rendus Physique*, 18(1):47–56. Prizes of the French Academy of Sciences 2015 Prix de l'Académie des sciences 2015.

Ghosh, T. K. (2008). Exact solutions for a dirac electron in an exponentially decaying magnetic field. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(4):045505.

Jiménez-Camargo, M., Pedraza-Ortega, O., y López-Suarez, L. A. (2022). Modos cuasi normales para un agujero negro schwarzschild de sitter rodeado de quintaesencia: Método de iteración asintótica. *Pädi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías del ICBI*, 10(Especial):29–35.

Kotov, V. N., Uchoa, B., Pereira, V. M., Guinea, F., y Castro Neto, A. H. (2012). Electron-electron interactions in graphene: Current status and perspectives. *Rev. Mod. Phys.*, 84:1067–1125.

Kuru, S., Negro, J., y Nieto, L. M. (2009). Exact analytic solutions for a dirac electron moving in graphene under magnetic fields. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(45):455305.

Miransky, V. A. y Shovkovy, I. A. (2015). Quantum field theory in a magnetic field: From quantum chromodynamics to graphene and dirac semimetals. *Physics Reports*, 576:1–209. Quantum field theory in a magnetic field: From quantum chromodynamics to graphene and Dirac semimetals.

Peres, N. M. R. y Castro, E. V. (2007). Algebraic solution of a graphene layer in transverse electric and perpendicular magnetic fields. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 19(40):406231.

Silvestrov, P. G. y Efetov, K. B. (2007). Quantum dots in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 98:016802.

Song, Y. y Guo, Y. (2011). Electrically induced bound state switches and nonlinearly tunable optical transitions in graphene under a magnetic field. *Journal of Applied Physics*, 109(10):104306.

### Apéndice A. Método de Iteración Asintótica

En este apéndice se muestra la estructura del Método de Iteración Asintótica presentado por Ciftci *et al.* (2003). El punto de partida es la ecuación diferencial homogénea lineal de segundo orden

$$\frac{d^2\chi(x)}{dx^2} = \lambda_0(x)\frac{d\chi(x)}{dx} + s_0(x)\chi(x), \quad (\text{A.1})$$

donde  $\lambda_0(x)$  y  $s_0(x)$  son funciones  $C_\infty(a, b)$ . Para hallar una solución a esta ecuación, se aprovecha la estructura simétrica del lado derecho. Derivando (A.1) respecto de  $x$ , se tiene

$$\frac{d^3\chi(x)}{dx^3} = \lambda_1(x)\frac{d\chi(x)}{dx} + s_1(x)\chi(x), \quad (\text{A.2})$$

con

$$\lambda_1(x) = \frac{d\lambda_0(x)}{dx} + s_0(x) + [\lambda_0(x)]^2, \quad s_1(x) = \frac{ds_0(x)}{dx} + s_0(x)\lambda_0(x). \quad (\text{A.3})$$

Tomando nuevamente la segunda derivada a (A.1), se obtiene

$$\frac{d^4\chi(x)}{dx^4} = \lambda_2(x)\frac{d\chi(x)}{dx} + s_2(x)\chi(x), \quad (\text{A.4})$$

donde

$$\lambda_2(x) = \frac{d\lambda_1(x)}{dx} + s_1(x) + \lambda_0(x)\lambda_1(x), \quad s_2(x) = \frac{ds_1(x)}{dx} + s_0(x)\lambda_1(x). \quad (\text{A.5})$$

Así, para la derivada de orden  $n + 1$  y de orden  $n + 2$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ), se pueden obtener las siguientes expresiones

$$\chi^{(n+1)}(x) = \lambda_{n-1}(x)\chi'(x) + s_{n-1}(x)\chi(x), \quad (\text{A.6})$$

$$\chi^{(n+2)}(x) = \lambda_n(x)\chi'(x) + s_n(x)\chi(x), \quad (\text{A.7})$$

aquí, la tilde ' y los super índices indican derivada respecto de  $x$ . Las funciones  $\lambda_n(x)$  y  $s_n(x)$  son definidas como

$$\lambda_n(x) = \lambda'_{n-1}(x) + s_{n-1}(x) + \lambda_0(x)\lambda_{n-1}, \quad (\text{A.8})$$

$$s_n(x) = s'_{n-1}(x) + s_0(x)\lambda_{n-1}(x). \quad (\text{A.9})$$

Tomando el cociente de (A.6) y (A.7)

$$\frac{d}{dx} \ln(\chi^{n+1}) = \frac{\chi^{n+2}}{\chi^{n+1}} = \frac{\lambda_n(\chi' + \frac{s_n}{\lambda_n})}{\lambda_{n-1}(\chi' + \frac{s_{n-1}}{\lambda_{n-1}})}. \quad (\text{A.10})$$

Para una  $n$  suficientemente grande, el aspecto asintótico del método establece que

$$\frac{s_n}{\lambda_n} = \frac{s_{n-1}}{\lambda_{n-1}} \equiv \alpha(x). \quad (\text{A.11})$$

De la definición dada por (A.11), la ecuación (A.10), puede escribirse como

$$\frac{d}{dx} \ln(\chi^{n+1}) = \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}}. \quad (\text{A.12})$$

Cuya solución es

$$\chi^{n+1}(x) = C_1 \exp \left[ \int^x \frac{\lambda_n(t)}{\lambda_{n-1}(t)} dt \right]. \quad (\text{A.13})$$

Siendo  $C_1$  una constante de integración. Usando nuevamente (A.11) y (A.8) en (A.13), se puede expresar a  $\chi^{n+1}(x)$  como

$$\chi^{n+1}(x) = C_1 \lambda_{n-1}(x) \exp \left[ \int^x \{ \alpha(t) + \lambda_0(t) \} dt \right]. \quad (\text{A.14})$$

Ahora, sustituyendo (A.14) en (A.6) se obtiene la siguiente ecuación

$$\chi'(x) + \alpha(x)\chi(x) = C_1 \lambda_{n-1}(x) \exp \left[ \int^x \{ \alpha(t) + \lambda_0(t) \} dt \right], \quad (\text{A.15})$$

donde la solución a la ecuación anterior es dado por

$$\begin{aligned} \chi(x) = & \exp \left[ - \int^x \alpha(t) dt \right] \{ C_2 \\ & + C_1 \int^x \exp \left( \int^\tau [\lambda_0(t) + 2\alpha(t)] dt \right) d\tau \}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Con  $C_2$  es una constante. Es importante mencionar que el primer término de esta expresión en general es una solución polinomial, la cual es convergente, mientras que el segundo término en general produce una solución que no converge. Por lo que para generar soluciones exactas  $C_1 = 0$ .

Los niveles de energía son obtenidos de las raíces de la condición de cuantización dada por la condición (A.11). La cual puede expresarse como

$$\delta_m(x) = \lambda_m(x)s_{m-1}(x) - \lambda_{m-1}(x)s_m(x) = 0, \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad (\text{A.17})$$

con  $m$  el número de iteraciones.