





Estados ligados en el Grafeno en presencia de campo magnético en regiones finitas Bound states in graphene in the presence of a magnetic field in finite regions

Adaya Daniela Hernández Cerón ^a, V. E. Cerón-Angeles ^{c,*}, Nancy Y. López ^b, Omar Pedraza-Ortega ^c

^aÁrea Académica de Computación Y Electrónica, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México.

^bÁrea Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México.

^cÁrea Académica de Matemáticas y Física, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México.

Resumen

En este trabajo se estudia la obtención de soluciones analíticas para los estados ligados de un electrón de Dirac en grafeno bajo la influencia de un campo magnético externo con perfil exponencial y simetría traslacional, considerando dos escenarios distintos. En el primero, el campo magnético está definido en todo el espacio y la placa de grafeno se extiende infinitamente en todas las direcciones; en el segundo, la placa de grafeno se restringe a una región finita, lo que implica una modificación en las condiciones de frontera. En ambas configuraciones, la ecuación de Dirac–Weyl independiente del tiempo se resuelve mediante el Método de Iteración Asintótica. Finalmente, se analiza el comportamiento del espectro discreto del sistema.

Palabras Clave: Grafeno, Método de Iteración Asintótica, condiciones de frontera modificadas, soluciones analíticas.

Abstract

This work presents the derivation of analytical solutions for the bound states of a Dirac electron in graphene under the influence of an external magnetic field with an exponential profile and translational symmetry, considering two distinct scenarios. In the first case, the magnetic field is defined throughout space and the graphene sheet extends infinitely in all directions; in the second, the graphene sheet is confined to a finite region, which leads to a modification of the boundary conditions. In both configurations, the time-independent Dirac–Weyl equation is solved using the Asymptotic Iteration Method. Finally, the behavior of the discrete energy spectrum of the system is analyzed.

Keywords: Graphene, Asymptotic Iteration Method, modified boundary conditions, analytical solutions.

1. Introducción

El grafeno, una lámina bidimensional de átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal, ha despertado un notable interés debido a su potencial para el desarrollo de dispositivos electrónicos avanzados, como se muestran en los trabajos de Novoselov *et al.* (2004); Neto *et al.* (2009); Kotov *et al.* (2012). Uno de los principales retos en este contexto es lograr el confinamiento efectivo de los electrones dentro del material. Este desafío surge porque los electrones de Dirac en grafeno no pueden ser confinados mediante potenciales electrostáticos convencionales, como resultado del paradigma de Klein, como lo muestra el trabajo de Castro Neto *et al.* (2009). Ante esta limitación, se ha propuesto el uso de confinamiento magnético como una alternativa viable (para mayor referencia ver el trabajo de Kuru *et al.* (2009)).

En años recientes, se han realizado diversos estudios teóricos sobre la dinámica de electrones en grafeno sometidos a campos magnéticos perpendiculares a la superficie del material López-Juárez *et al.* (2023); Jiménez *et al.* (2025), así como a campos electrostáticos paralelos Peres y Castro (2007), con el objetivo de identificar mecanismos que permitan el confinamiento de los portadores de carga. En todos estos trabajos, el análisis se basa en la ecuación de Dirac–Weyl, que describe con precisión el comportamiento de los electrones en este tipo de sistemas.

Los resultados obtenidos muestran que es posible confinar portadores de carga sin masa utilizando combinaciones apropiadas de barreras eléctricas y magnéticas. Sin embargo, la mayoría de estos estudios considera campos definidos en todo el espacio y explora solo un conjunto limitado de configuraciones. Además, aún no se han reportado resultados experimentales.

* Autor para correspondencia: vceron@uaeh.edu.mx

Correo electrónico: he377119@uaeh.edu.mx (Adaya Daniela Hernández Cerón), vceron@uaeh.edu.mx (V. E. Cerón-Angeles), lo264098@uaeh.edu.mx (Nancy Y. López), omarp@uaeh.edu.mx (Omar Pedraza Ortega).

Historial del manuscrito: recibido el 10/12/2025, última versión-revisada recibida el 05/03/2026, aceptado el 09/03/2026, en línea (postprint) desde el 18/06/2026, publicado el 05/01/2027.

DOI: <https://doi.org/10.29057/icbi.v14i28.16820>



les que verifiquen estas predicciones, lo cual podría atribuirse a las dificultades técnicas que implica la implementación de tales configuraciones de campo en el laboratorio.

Con el propósito de acercar el análisis teórico al contexto experimental, en este trabajo se propone modificar el dominio espacial en el que se define el campo magnético externo, asumiendo que dicho campo se restringe a una región finita. Esta modificación implica una reformulación de las condiciones de frontera en la función de onda. Para abordar este nuevo problema, el Método de Iteración Asintótica en su versión perturbativa, desarrollado por Ciftci *et al.* (2005), permite obtener soluciones analíticas de la ecuación de Dirac–Weyl para ciertos perfiles de campo magnético, lo que posibilita describir de manera más realista el confinamiento de los portadores de carga en regiones espacialmente acotadas.

La estructura de este trabajo es la siguiente: en la Sección 2, se discute brevemente la ecuación de Dirac–Weyl, la cual se resolverá en presencia de campos magnéticos externos. En la Sección 3, se estudia un perfil exponencial de campo magnético en dos configuraciones: en la primera, el campo está definido en todo el espacio; en la segunda, se encuentra confinado a una región delimitada del espacio. Este análisis se realiza mediante el Método de Iteración Asintótica, en su forma estándar y su versión perturbativa, respectivamente. Finalmente, en la Sección 4, se discuten los resultados obtenidos.

2. Problema de eigenvalores

En el grafeno, el Hamiltoniano efectivo que describe la dinámica de un electrón de Dirac en las proximidades de un punto de Dirac se puede expresar como

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

donde $v_F \approx c/300 = 10^6$ m/s es la velocidad de Fermi, c la velocidad de la luz en el vacío, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ son las matrices de Pauli y $\mathbf{p} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$ es el operador momento en dos dimensiones.

Cuando un electrón de Dirac en el grafeno interactúa con un campo magnético externo $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, perpendicular al plano del material, es necesario aplicar la regla de acoplamiento mínimo. Esta regla implica sustituir el operador momento \mathbf{p} por $\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$, donde $-e$ representa la carga del electrón. El potencial vectorial asociado al campo magnético se define como

$$\mathbf{A} = A_x, A_y, 0. \quad (2)$$

En el caso particular de un campo magnético externo con simetría a lo largo del eje y , y adoptando la norma de Landau, el potencial vectorial puede escribirse como:

$$\mathbf{A} = 0, A_y(x), 0, \quad \mathbf{B} = 0, 0, \frac{dA_y}{dx}. \quad (3)$$

Debido a la invariancia traslacional en la dirección y , el Hamiltoniano de la ecuación (1) conmuta con el operador \mathbf{p}_y . Por lo tanto, sus funciones propias pueden representarse en la forma

$$\Psi(x, y) = e^{iky} (\psi_+(x), i\psi_-(x))^T, \quad (4)$$

donde k es el número de onda en la dirección y y T denota la transpuesta del vector columna.

Así, el problema de eigenvalores $\mathbf{H}\Psi = E\Psi$ conduce al siguiente par de ecuaciones:

$$\frac{d}{dx} \psi_+ + k + \frac{e}{c\hbar} A_y \psi_+ = E \psi_+, \quad (5)$$

$$-\frac{d}{dx} \psi_- + k + \frac{e}{c\hbar} A_y \psi_- = E \psi_-, \quad (6)$$

con $E = E/(\hbar v_F)$.

Al combinar las ecuaciones (5) y (6) se obtiene una ecuación tipo Schrödinger para ψ_+ y ψ_- :

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_{\pm} + V_{\pm}(x) \psi_{\pm} = \epsilon \psi_{\pm}(x). \quad (7)$$

donde

$$\epsilon = E^2 = \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2}, \quad (8)$$

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

$$V_{\pm}(x) = k + \frac{e}{c\hbar} A_y(x) \pm \frac{e}{c\hbar} \frac{dA_y(x)}{dx}. \quad (9)$$

En la siguiente sección se estudiarán casos particulares de campos magnéticos externos, analizando aquellos cuyos espectros de energía pueden determinarse mediante métodos perturbativos.

3. Campo magnético con perfil exponencial

A continuación, se estudiará un perfil exponencial para el campo magnético externo, descrito de la siguiente forma:

$$\mathbf{B} = 0, 0, B_0 e^{-\alpha x}, \quad (10)$$

$$\mathbf{A} = 0, -\frac{B_0}{\alpha} e^{-\alpha x}, 0. \quad (11)$$

A continuación, se estudiarán dos configuraciones espaciales: una en la que la placa de grafeno cubre todo el espacio, y otra en la que se encuentra localizada en una región bien delimitada.

Desde el punto de vista físico o experimental, en este trabajo no se pretende establecer una motivación específica para el estudio de un perfil exponencial; no obstante, desde el punto de vista matemático, dicho perfil constituye uno de los casos más sencillos y resulta útil como modelo teórico para explorar de manera analítica las propiedades espectrales del sistema cuando la placa de grafeno se encuentra localizada en una región finita del espacio.

3.1. Perfil exponencial definido en todo el espacio

De (10) y (9), los potenciales efectivos vienen dados por

$$V_{\pm}(x) = k^2 + D^2 e^{-2\alpha x} - 2D k \mp \frac{\alpha}{2} e^{-\alpha x}, \quad D = \frac{eB_0}{c\hbar}. \quad (12)$$

En este caso, la placa de grafeno se extiende infinitamente, por lo que el perfil del campo magnético está definido en todo el espacio. Es decir, el dominio de la variable x es $(-\infty, \infty)$ y, en consecuencia, el potencial efectivo $V_{\pm}(x)$ también queda definido en todo el dominio. En la Figura 1 se muestran los potenciales efectivos dados por la ecuación (12).

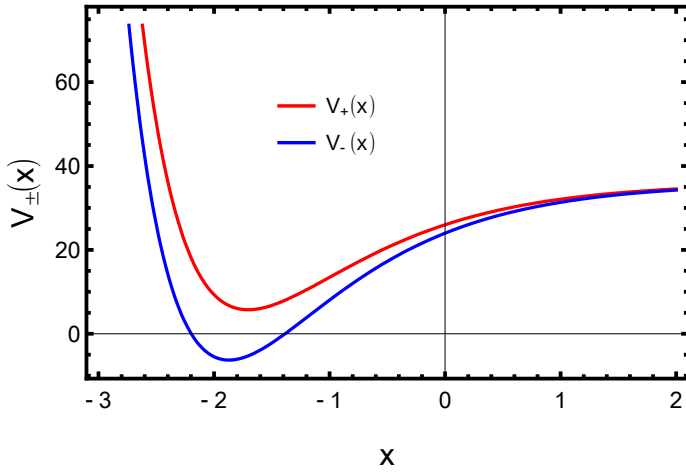


Figura 1: Gráfica de los potenciales efectivos $V_{\pm}(x)$, dados por (12), considerando $k = 6, D = 1$ y $\alpha = 1$.

Para este escenario, las ecuaciones a resolver son:

$$-\frac{d^2}{dx^2} + k^2 + D^2 e^{-2\alpha x} - 2Dk \mp \frac{\alpha}{2} e^{-\alpha x} \psi_{\pm} = \epsilon \psi_{\pm}. \quad (13)$$

Para proceder con el cálculo, se aplica el siguiente cambio de variable acompañado de una redefinición de la función

$$z = \frac{2D}{\alpha} e^{-\alpha x}, \quad z \in (0, \infty), \quad (14)$$

$$\psi_{\pm}(z) = \frac{\Phi_{\pm}(z)}{\sqrt{z}}. \quad (15)$$

Por lo que, implementando (14) y (15), las expresiones dadas por (13) se pueden escribir como

$$\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{4} - \frac{k \mp \frac{1}{2}}{z} - \frac{\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon}}{\alpha}}{z^2} \Phi_{\pm}(z) = 0. \quad (16)$$

Para aplicar el *Método de Iteración Asintótica* a la resolución de estas ecuaciones, es fundamental analizar primero el comportamiento asintótico de la ecuación (16) en el límite $z \rightarrow \infty$ (equivalentemente, $x \rightarrow -\infty$). Bajo estas condiciones, la ecuación (16) puede reescribirse en la siguiente forma:

$$-\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{4} \Phi_{\pm} = 0, \quad (17)$$

cuya solución es:

$$\Phi_{\pm}(z) = ae^{-z/2} + be^{z/2}, \quad (18)$$

con a y b constantes a determinar. Para satisfacer la condición de frontera $\psi_{\pm}(z \rightarrow \infty) = 0$ (condición de frontera tipo Dirichlet), se debe imponer $b = 0$.

El otro comportamiento asintótico que debe analizarse corresponde al límite $z \rightarrow 0$ ($x \rightarrow \infty$). En este caso, la ecuación (16) se puede expresar como:

$$\frac{d^2}{dz^2} - \frac{\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon}}{\alpha}}{z^2} \Phi_{\pm}(z) = 0. \quad (19)$$

La ecuación (19) admite la siguiente solución

$$\Phi_{\pm}(z) = Az^{\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon}}{\alpha}} + Bz^{\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon}}{\alpha}}, \quad (20)$$

aquí nuevamente A y B son constantes a determinar. Aplicando la condición de frontera tipo Dirichlet $\psi_{\pm}(z \rightarrow 0) = 0$, se requiere que $B = 0$.

Por lo tanto, considerando (18) y (20) se puede escribir la función de onda como

$$\Phi_{\pm}(z) = z^{\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon}}{\alpha}} e^{-z/2} f_{\pm}(z). \quad (21)$$

Sustituyendo la expresión (21) en la ecuación (16), se obtiene la siguiente ecuación diferencial para $f_{\pm}(z)$:

$$\frac{d^2 f_{\pm}(z)}{dz^2} = \lambda_{0\pm}(z) \frac{df_{\pm}(z)}{dz} + s_{0\pm}(z) f_{\pm}(z). \quad (22)$$

donde las funciones $\lambda_{0\pm}(z)$ y $s_{0\pm}(z)$ se definen como:

$$\lambda_{0\pm}(z) = \frac{(z-1)\alpha - 2\sqrt{k^2 - \epsilon}}{z\alpha}, \quad (23)$$

$$s_{0+}(z) = \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon} - k + \alpha}{z\alpha}, \quad (24)$$

$$s_{0-}(z) = \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon} - k}{z\alpha}. \quad (25)$$

El siguiente paso consiste en construir las funciones $\lambda_{n\pm}(z)$ y $s_{n\pm}(z)$, definidas en (A.11) y (A.12), respectivamente. A continuación, se muestra únicamente el cálculo de $\lambda_{1\pm}(z)$ y $s_{1\pm}(z)$, las cuales son:

$$\lambda_{1+}(z) = 1 + \frac{2\alpha \sqrt{k^2 - \epsilon} + \alpha + 4k^2 - 4\epsilon}{\alpha^2 z^2} - \frac{3\sqrt{k^2 - \epsilon} + \alpha + k}{z\alpha}, \quad (26)$$

$$s_{1+}(z) = \frac{-2\sqrt{k^2 - \epsilon}(2\alpha - k) - 2\alpha^2 + 2\alpha k - 2k^2 + 2\epsilon}{\alpha^2 z^2} + \frac{\alpha + \sqrt{k^2 - \epsilon} - k}{z\alpha}, \quad (27)$$

$$\lambda_{1-}(z) = 1 + \frac{2\alpha \sqrt{k^2 - \epsilon} + \alpha + 4k^2 - 4\epsilon}{\alpha^2 z^2} - \frac{3\sqrt{k^2 - \epsilon} + 2\alpha + k}{z\alpha}, \quad (28)$$

$$s_{1-}(z) = \frac{-2\sqrt{k^2 - \epsilon}(\alpha - k) + 2\alpha k - 2k^2 + 2\epsilon}{\alpha^2 z^2} + \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon} - k}{z\alpha}. \quad (29)$$

Empleando la condición de cuantización (A.20), es posible obtener los niveles de energía

$$\delta_{0+}(z) = \frac{(3\alpha - 2k)\sqrt{k^2 - \epsilon} + 2k^2 - 3k\alpha + 2\alpha^2 - \epsilon}{\alpha^2 z^2}, \quad (30)$$

$$\delta_{0-}(z) = \frac{(\alpha - 2k)\sqrt{k^2 - \epsilon} + 2k^2 - \alpha k - \epsilon}{\alpha^2 z^2}. \quad (31)$$

Las raíces de (30) y (31) proporcionan los eigenvalores, lo cuales son

$$\epsilon_{0+}(z) = k^2 - (k - \alpha)^2, \quad (32)$$

$$\epsilon_{1+}(z) = k^2 - (k - 2\alpha)^2, \quad (33)$$

$$\epsilon_{0-}(z) = 0, \quad (34)$$

$$\epsilon_{1-}(z) = \epsilon_{1+}(z). \quad (35)$$

En forma general se puede escribir a los eigenvalores como

$$\epsilon_{n+} = k^2 - (k - n\alpha)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (36)$$

$$\epsilon_{n-} = k^2 - (k - n\alpha)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (37)$$

Puede observarse que ambos espectros son los mismos, excepto que solo están corridos por un nivel, por que de acuerdo a (36), (37) y (8), los niveles de energía es dados por

$$E_n = \pm \hbar v_F \sqrt{k^2 - (k - n\alpha)^2}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (38)$$

Estos niveles de energía se conocen como niveles de Landau. Cabe mencionar que dichos niveles dependen únicamente de los parámetros k y α , y no de la intensidad del campo magnético D . En particular, la energía del estado fundamental es independiente de todos los parámetros del sistema. Los eigenvalores $E_n > 0$ están asociados a la *banda de conducción* del grafeno (como se muestra en la Figura 2), mientras que los valores $E_n < 0$ corresponden a su *banda de valencia*.

Es importante destacar que la energía (38) es independiente del índice de valle, debido a que los conos de Dirac presentan una orientación vertical en el plano de momentos del espacio recíproco.

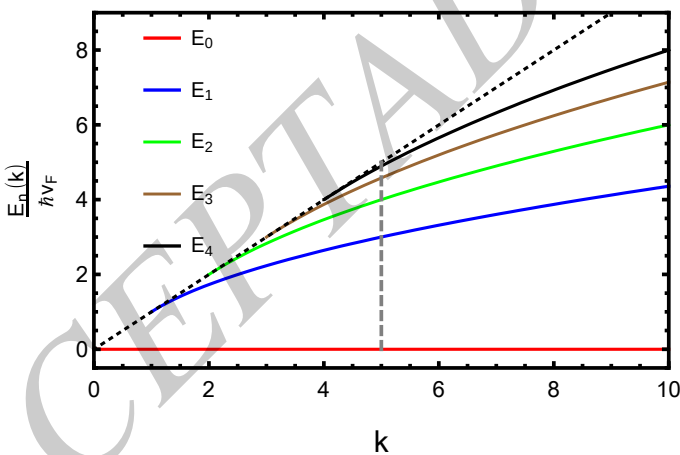


Figura 2: Representación de los primeros cinco niveles de energía de la banda de conducción en función de k , dados por la ecuación (38) para $\alpha = 1$. La figura muestra una línea punteada que actúa como envolvente de los estados ligados y sirve como guía visual para identificar que los niveles de energía no existen para todo valor de k , sino únicamente para aquellos comprendidos entre la envolvente y el eje horizontal.

Para calcular las eigenfunciones, de acuerdo al Método de Iteración Asintótico es necesario calcular las funciones auxilia-

res (ver (A.14))

$$\beta_{1+}(z) = \frac{s_{0+}(z)}{\lambda_{0+}(z)}_{\epsilon=\epsilon_{1+}} = 0, \quad (39)$$

$$\beta_{1-}(z) = \frac{s_{0-}(z)}{\lambda_{0-}(z)}_{\epsilon=\epsilon_{1-}} = 0, \quad (40)$$

$$\beta_{2+}(z) = \frac{s_{1+}(z)}{\lambda_{1+}(z)}_{\epsilon=\epsilon_{2+}} = \frac{\alpha}{2k - \alpha(z + 3)}, \quad (41)$$

$$\beta_{2-}(z) = \frac{s_{1-}(z)}{\lambda_{1-}(z)}_{\epsilon=\epsilon_{2-}} = \frac{\alpha}{2k - \alpha(z + 1)}. \quad (42)$$

Para determinar las eigenfunciones correspondientes al estado fundamental y al primer estado excitado, se emplea la ecuación (A.19) junto con las expresiones (39)–(42), de modo que

$$f_{0+}(z) = \exp - \int \beta_{1+}(z') dz' = 1, \quad (43)$$

$$f_{0-}(z) = \exp - \int \beta_{1-}(z') dz' = 1, \quad (44)$$

$$f_{1+}(z) = \exp - \int \beta_{1+}(z') dz' = 2k - \alpha(z + 3), \quad (45)$$

$$f_{1-}(z) = \exp - \int \beta_{1-}(z') dz' = 2k - \alpha(z + 1). \quad (46)$$

En el caso general, las funciones $f_{0,1+}(z)$ y $f_{0,1-}(z)$ corresponden a los polinomios asociados de Laguerre. Así, las funciones de onda del estado fundamental, del primer estado excitado y del n -ésimo estado se expresan como

$$f_{0+}(z) = c_{1+} L_0^{\frac{2k}{\alpha}-2}(z), \quad (47)$$

$$f_{0-}(z) = c_{1-} L_0^{\frac{2k}{\alpha}}(z), \quad (48)$$

$$f_{1+}(z) = c_{2+} L_1^{\frac{2k}{\alpha}-4}(z), \quad (49)$$

$$f_{1-}(z) = c_{2-} L_1^{\frac{2k}{\alpha}-2}(z), \quad (50)$$

$$f_{n+}(z) = c_{n+} L_n^{\frac{2k}{\alpha}-2(n+1)}(z), \quad (51)$$

$$f_{n-}(z) = c_{n-} L_n^{\frac{2k}{\alpha}-2n}(z), \quad (52)$$

con c_{n+} y c_{n-} constantes de normalización por determinar.

Es preciso señalar que los polinomios asociados de Laguerre $L_n^m(z)$ deben cumplir la condición $m > 0$. Al imponer dicha condición en las expresiones (51) y (52), se obtiene la siguiente restricción

$$k > n\alpha, \quad (53)$$

Esta condición garantiza la cuadrado-integrabilidad de las soluciones, debido a los factores funcionales que las acompañan. La condición (53) implica que no cualquier valor de k está permitido en la expresión de la energía (38), como se puede observar en la Figura 2. En dicha figura se muestra que, para $k = 5$, la línea vertical punteada de color gris interseca a las curvas de energía en cinco puntos, lo que indica que para este valor de k solo existen cinco estados ligados, correspondientes a las energías E_0, E_1, E_2, E_3 y E_4 .

Sustituyendo las expresiones (51) y (52) en la ecuación (21) y luego usando (15), se obtiene

$$\Psi_{n+}(z) = c_{n+} z^{\frac{k}{\alpha}-(n+1)} e^{-z/2} L_n^{\frac{2k}{\alpha}-2(n+1)}(z), \quad (54)$$

$$\Psi_{n-}(z) = c_{n-} z^{\frac{k}{\alpha}-n} e^{-z/2} L_n^{\frac{2k}{\alpha}-2n}(z). \quad (55)$$

Finalmente, cabe mencionar que los valores de energía dados en (38), derivados en el marco de un campo magnético con perfil exponencial mediante el Método de Iteración Asintótica, reproducen aquellos reportados por Kuru *et al.* (2009). De igual manera, las eigenfunciones obtenidas, presentadas en (54) y (55), coinciden con las informadas en dicho trabajo.

3.2. Perfil exponencial definido en una región finita del espacio

En el caso en que se considere que la placa de grafeno ocupa únicamente una región finita del espacio (ver Figura 3). Para este caso se impone que la función de onda esté definida solo en el dominio $x \in [x_0, \infty)$ (aquí sin pérdida de generalidad se considerará que $x_0 < 0$), y sujeta a las siguientes condiciones de frontera:

$$\Psi_{\pm}(x \rightarrow x_0) = 0, \quad (56)$$

$$\Psi_{\pm}(x \rightarrow \infty) = 0. \quad (57)$$

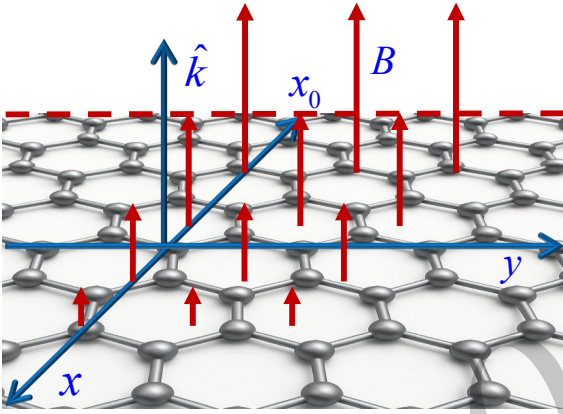


Figura 3: Representación esquemática de una placa de grafeno delimitada por la recta $x = x_0$ (línea punteada), bajo la influencia de un campo magnético externo B (flechas en color rojo) en la dirección \hat{k} , perpendicular al plano xy .

Por supuesto, cuando $x_0 \rightarrow -\infty$ ($z_0 \rightarrow \infty$), debe recuperarse el caso estudiado en la sección 3.1. En la variable z , las condiciones de frontera (56) y (57), se escriben como

$$\Psi_{\pm}(z \rightarrow z_0) = 0, \quad \text{con } z_0 = \frac{2D}{\alpha} e^{-\alpha x_0} \quad (58)$$

$$\Psi_{\pm}(z \rightarrow 0) = 0. \quad (59)$$

Cabe mencionar que el dominio de la variable z en este escenario es $z \in (0, z_0]$. De la segunda parte de la ecuación (58) se observa que $z_0 \rightarrow \infty$ únicamente cuando D (con $D > 0$), así como la norma $|x_0|$, tienden a infinito, o bien cuando el parámetro α toma valores muy pequeños (aunque distintos de cero). Más adelante se analizará con mayor detalle esta dependencia.

De (58), se observa que, matemáticamente, la diferencia entre una placa infinita de grafeno interactuando con un campo magnético y una placa de grafeno limitada en una sola dirección (como se muestra en la Figura 3) bajo la acción de un campo magnético externo radica en la modificación de una de las condiciones de frontera.

Dado que la condición de frontera (59) no se modifica (véase la ecuación (19)), la solución de (16) sigue siendo la expresada en (20), sujeta a la condición $\Psi_{\pm}(z \rightarrow 0) = 0$. Por lo

tanto, se debe imponer $B = 0$, de modo que, en este límite, la función de onda se expresa como

$$\Phi_{\pm}(z) \sim z^{\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon}}{\alpha}}. \quad (60)$$

Para estudiar el comportamiento asintótico de la función de onda $\Phi_{\pm}(z)$ cuando $z \rightarrow z_0$, primero se debe considerar que, en el límite $z_0 \rightarrow \infty$, la función de onda debe recuperar el caso analizado en la sección previa:

$$\Phi_{\pm}(z) \sim e^{-z/2}. \quad (61)$$

Teniendo en cuenta este punto, la ecuación (16) cuando $z \rightarrow z_0$, toma la siguiente forma

$$\frac{d^2}{dz^2} - \xi_{\pm}^2 \Phi_{\pm}(z) = 0, \quad \xi_{\pm} = \frac{1}{4} - \frac{\frac{k}{\alpha} \mp \frac{1}{2}}{z_0} - \frac{\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon}}{\alpha}}{z_0^2}. \quad (62)$$

La solución de esta ecuación es una combinación lineal de $e^{\xi_{\pm} z}$ y $e^{-\xi_{\pm} z}$. Para satisfacer la condición de Dirichlet en z_0 , la solución debe tener la siguiente forma:

$$\Phi_{\pm}^{\pm}(z) \approx e^{-\xi_{\pm} z} - e^{\xi_{\pm}(z - 2z_0)}. \quad (63)$$

No obstante, al examinar el comportamiento de la solución (63) en el límite $z \rightarrow z_0$ y, de manera simultánea, cuando $z_0 \rightarrow \infty$, se identifica un comportamiento anómalo. Para resolver dicha inconsistencia, se plantea una forma modificada. Así, con el fin de asegurar un comportamiento físico aceptable, se propone la siguiente función de onda

$$\Phi_{\pm}(z) \sim e^{-\xi_{\pm} z} - e^{-\xi_{\pm} z_0}. \quad (64)$$

Aquí se puede observar que esta propuesta cumple inmediatamente con la condición de frontera (58). Siguiendo la idea del Método de Iteración Asintótica, a partir de (60) y (64), se puede expresar a $\Phi_{\pm}(z)$ como

$$\Phi_{\pm}(z, z_0) = z^{\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{k^2 - \epsilon}}{\alpha}} e^{-\xi_{\pm} z} - e^{-\xi_{\pm} z_0} g_{\pm}(z). \quad (65)$$

Al sustituir (65) en la ecuación (16), se obtiene la siguiente ecuación diferencial para $g_{\pm}(z)$:

$$\frac{d^2 g_{\pm}(z, z_0)}{dz^2} = \lambda_{0\pm}(z, z_0) \frac{dg_{\pm}(z, z_0)}{dz} + s_{0\pm}(z, z_0) g_{\pm}(z, z_0). \quad (66)$$

con $\lambda_{0\pm}(z, z_0)$ y $s_{0\pm}(z, z_0)$ definidas como

$$\lambda_{0\pm}(z, z_0) = -\frac{2\sqrt{k^2 - \epsilon} + \alpha}{\alpha z} + \frac{2\xi_{\pm} e^{-\xi_{\pm} z}}{e^{-\xi_{\pm} z} - e^{-\xi_{\pm} z_0}}, \quad (67)$$

$$s_{0+}(z, z_0) = -\frac{4k - (z + 2)\alpha}{4z\alpha} + \frac{\xi_{+} \alpha - \alpha \xi_{+} z + 2\sqrt{k^2 - \epsilon} e^{-\xi_{+} z}}{z\alpha e^{-\xi_{+} z} - e^{-\xi_{+} z_0}}, \quad (68)$$

$$s_{0-}(z, z_0) = -\frac{4k - (z - 2)\alpha}{4z\alpha} + \frac{\xi_{-} \alpha - \alpha \xi_{-} z + 2\sqrt{k^2 - \epsilon} e^{-\xi_{-} z}}{z\alpha e^{-\xi_{-} z} - e^{-\xi_{-} z_0}}. \quad (69)$$

El siguiente paso consiste en resolver (66). Una vía adecuada para obtener su solución es utilizar el Método de Iteración Asintótica en su versión perturbativa. Si bien aquí no se dispone

de un potencial perturbativo definido, las ecuaciones (66)–(69) presentan la misma estructura matemática que (B.5)–(B.7), con z_0 desempeñando el rol del parámetro λ . Esta analogía permite recurrir a los argumentos desarrollados en la sección Apéndice B.

Usando $\lambda_{0\pm}(z, z_0)$ y $s_{0\pm}(z, z_0)$, es posible obtener las expresiones para $\lambda_{k\pm}(z, z_0)$ y $s_{k\pm}(z, z_0)$ y, a partir de ellas, calcular las funciones $\delta_k(z, z_0)$ definidas en (B.9). No obstante, por razones prácticas de cálculo, aquí únicamente se muestra el procedimiento para obtener los dos primeros niveles de energía a primer orden en la variable z_0 .

Así para $k = 0$

$$\delta_{0+} = \delta_{0+}^{(0)} + \frac{\delta_{0+}^{(1)}}{z_0} + \dots$$

$$\frac{(3\alpha - 2k) \sqrt{k^2 - \epsilon + 2k^2 - 3\alpha k + 2\alpha^2 - \epsilon}}{\alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}^2}$$

$$- \frac{h \frac{7}{4}\alpha - k \sqrt{k^2 - \epsilon} + k^2 - \frac{7}{4}\alpha k + \frac{5}{4}\alpha^2 - \frac{\epsilon}{2}}{\alpha \alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}^2 z_0} i \quad k - \frac{\alpha}{2}$$

$$+ \dots \tag{70}$$

Mientras que para δ_{0-} , se tiene

$$\delta_{0-} = \delta_{0-}^{(0)} + \frac{\delta_{0-}^{(1)}}{z_0} + \dots$$

$$\frac{(\alpha - 2k) \sqrt{k^2 - \epsilon + 2k^2 - \alpha k - \epsilon}}{\alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}^2}$$

$$- \frac{h \frac{3}{2}\alpha - k \sqrt{k^2 - \epsilon} + k^2 - \frac{3}{4}\alpha k - \frac{\epsilon}{2}}{\alpha \alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}^2 z_0} i \quad k + \frac{\alpha}{2}$$

$$+ \dots \tag{71}$$

Para $k = 1$

$$\delta_{1+} = \delta_{1+}^{(0)} + \frac{\delta_{1+}^{(1)}}{z_0} + \dots$$

$$\frac{\Delta_{1+}}{\alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}^3} - \frac{\Delta_{2+}}{\alpha \alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}^3 z_0}$$

$$+ \dots \tag{72}$$

Con

$$\Delta_{1+} = -11\alpha^2 + 12\alpha k - 4k^2 + \epsilon \sqrt{k^2 - \epsilon}$$

$$+ 4(-2\alpha + k) k^2 - \alpha k + \frac{3}{4}\alpha^2 - \frac{3}{4}\epsilon, \tag{73}$$

$$\Delta_{2+} = 24 k - \frac{\alpha}{2} - k^2 + \frac{7}{2}\alpha k - \frac{7}{2}\alpha^2 + \frac{\epsilon}{4} \sqrt{k^2 - \epsilon}$$

$$- 2\alpha^3 + \frac{7}{2}\alpha^2 k + -\frac{7}{2}k^2 + \frac{7}{4}\epsilon \alpha + k k^2 - \frac{3}{4}\epsilon \tag{74}$$

Por otro lado, para δ_{1-} el resultado es

$$\delta_{1-} = \delta_{1-}^{(0)} + \frac{\delta_{1-}^{(1)}}{z_0} + \dots$$

$$\frac{\Delta_{1-}}{\alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}^3} - \frac{\Delta_{2-}}{\alpha \alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}^3 z_0}$$

$$+ \dots \tag{75}$$

Con

$$\Delta_{1-} = -2\alpha^2 + 6\alpha k - 4k^2 + \epsilon \sqrt{k^2 - \epsilon}$$

$$+ 4(-\alpha + k) k^2 - \frac{1}{2}\alpha k - \frac{3}{4}\epsilon, \tag{76}$$

$$\Delta_{2-} = 24 k + \frac{\alpha}{2} - k^2 + 2\alpha k - \frac{3}{4}\alpha^2 + \frac{\epsilon}{4} \sqrt{k^2 - \epsilon}$$

$$- 2k^2 + \epsilon \alpha + k k^2 - \frac{3}{4}\epsilon. \tag{77}$$

Es importante mencionar que las funciones $\delta_{0\pm}$ y $\delta_{1\pm}$ fueron evaluadas en $z = z_1$, con

$$\alpha - 2\alpha W \frac{\alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}}{2\alpha} e^{-\xi_{\pm} z_0 + \frac{\alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}}{2\alpha} z_0} + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}$$

$$z_1 = \frac{\alpha - 2\alpha W \frac{\alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}}{2\alpha} e^{-\xi_{\pm} z_0 + \frac{\alpha + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}}{2\alpha} z_0} + 2 \sqrt{k^2 - \epsilon}}{2\xi_{\pm}\alpha}, \tag{78}$$

donde $W(z)$ denota la función de Lambert. En este contexto, z_1 representa el cero de $\lambda_{0\pm}(z, z_0)$, y se selecciona de modo que el proceso iterativo converja hacia los valores de energía con la mayor rapidez posible.

Para calcular el espectro de energía en este caso, se calculan los ceros de las funciones $\delta_{0+}^{(0)}$, $\delta_{0+}^{(1)}$, $\delta_{1+}^{(0)}$ y $\delta_{1+}^{(1)}$, obteniendo

$$\delta_{0+}^{(0)} = 0, \Rightarrow \begin{cases} \epsilon_{0+}^{(0)} = k^2 - (k - \alpha)^2 \\ \epsilon_{1+}^{(0)} = k^2 - (k - 2\alpha)^2 \end{cases}, \tag{79}$$

$$\delta_{0-}^{(0)} = 0, \Rightarrow \begin{cases} \epsilon_{0-}^{(0)} = 0 \\ \epsilon_{1-}^{(0)} = k^2 - (k - \alpha)^2 \end{cases}. \tag{80}$$

Mientras que las correcciones a la energía son

$$\delta_{0+}^{(1)} = 0, \Rightarrow \begin{cases} \epsilon_{0+}^{(1)} = k^2 - k - \frac{5}{2}\alpha^2 \\ \epsilon_{1+}^{(1)} = k^2 - (k - \alpha)^2 \end{cases}, \tag{81}$$

$$\delta_{0-}^{(1)} = 0, \Rightarrow \begin{cases} \epsilon_{0-}^{(1)} = k^2 - k - \frac{3}{2}\alpha^2 \\ \epsilon_{1-}^{(1)} = 0 \end{cases}. \tag{82}$$

Siguiendo con el cálculo de las energías

$$\delta_{1+}^{(0)} = 0, \Rightarrow \begin{cases} \epsilon_{0+}^{(0)} = k^2 - (k - \alpha)^2 \\ \epsilon_{1+}^{(0)} = k^2 - (k - 2\alpha)^2 \\ \epsilon_{2+}^{(0)} = k^2 - (k - 3\alpha)^2 \end{cases}, \tag{83}$$

$$\delta_{1-}^{(0)} = 0, \Rightarrow \begin{cases} \epsilon_{0-}^{(0)} = 0 \\ \epsilon_{1-}^{(0)} = k^2 - (k - \alpha)^2 \\ \epsilon_{2-}^{(0)} = k^2 - (k - 2\alpha)^2 \end{cases}. \tag{84}$$

Nuevamente, del cálculo de las correcciones, se tiene

$$\delta_{1+}^{(1)} = 0, \Rightarrow \begin{cases} \epsilon_{0+}^{(1)} = k^2 - (k - 4\alpha)^2 \\ \epsilon_{1+}^{(1)} = k^2 - (k - \alpha)^2 \\ \epsilon_{2+}^{(1)} = k^2 - (k - 2\alpha)^2 \end{cases}, \tag{85}$$

$$\delta_{1-}^{(1)} = 0, \Rightarrow \begin{cases} \epsilon_{0-}^{(1)} = k^2 - (k - 3\alpha)^2 \\ \epsilon_{1-}^{(1)} = 0 \\ \epsilon_{2-}^{(1)} = k^2 - (k - \alpha)^2 \end{cases}. \tag{86}$$

Al analizar (79), (80), (83) y (84), se obtiene que la primera contribución a los eigenvalores de energía, viene dada por

$$\epsilon_{n+}^{(0)} = k^2 - (k - n\alpha)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \tag{87}$$

$$\epsilon_{n-}^{(0)} = k^2 - (k - n\alpha)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{88}$$

El análisis de (87) y (88) permite recuperar la primera contribución a los niveles de energía, que coincide con la dada en (38); así se tiene

$$E_n^{(0)} = \pm \hbar v_F \sqrt{k^2 - (k - n\alpha)^2}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (89)$$

Por otro lado, a partir de (81), (82), (85) y (86), la primera corrección a los eigenvalores de energía, a primer orden, se expresa como

$$\epsilon_{n+}^{(1)} = k^2 - k - \frac{3n+2}{2}\alpha^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (90)$$

$$\epsilon_{n-}^{(1)} = k^2 - k - \frac{3(n+1)}{2}\alpha^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (91)$$

Aquí se aprecia que ambos espectros, (90) y (91), resultan equivalentes, salvo por un corrimiento de un nivel. En particular, usando (8), la corrección a primer orden de los niveles de energía se expresa como

$$E_n^{(1)} = \begin{cases} \hbar v_F \sqrt{k^2 - k - \frac{3(m+1)}{2}\alpha^2} & n = 2m + 1 \\ \hbar v_F \sqrt{k^2 - k - \frac{3m+2}{2}\alpha^2} & n = 2m \end{cases}, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (92)$$

De esta forma, los niveles de energía a primer orden, bajo condiciones de frontera modificadas se expresan como

$$E_n = E_n^{(0)} + \frac{E_n^{(1)}}{z_0} = E_n^{(0)} + \frac{\alpha E_n^{(1)}}{2D} e^{\alpha x_0} \quad (93)$$

A partir del resultado (93), se observa la aparición de una corrección a la energía, dada por

$$\Delta E_n = E_n - E_n^{(0)} = \frac{\alpha E_n^{(1)}}{2D} e^{\alpha x_0} \quad (94)$$

De (94) se puede deducir que el término ΔE_n presenta una dependencia en cuatro parámetros, D , x_0 , α y k . Esta corrección ΔE_n resulta más relevante cuando la intensidad del campo magnético D o la norma de x_0 ($x_0 < 0$) disminuyen; sin embargo, en este régimen los términos de segundo orden y de orden superior también adquieren importancia y, por lo tanto, deben ser considerados. En contraste, cuando la intensidad del campo magnético D o la norma de x_0 aumentan, esta corrección se vuelve pequeña y constituye la contribución dominante, mientras que los términos de segundo orden pueden ser despreciados. Por otra parte, independientemente de si el parámetro α aumenta o disminuye, ΔE_n permanece siempre como una cantidad pequeña.

Con el fin de analizar la dependencia de ΔE_n respecto a k , la Figura 4 presenta la diferencia de energías como función de k , obtenida a partir de (94).

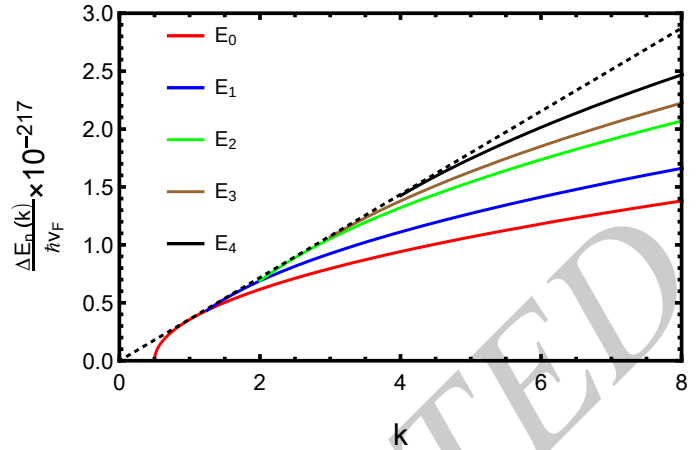


Figura 4: Representación de la diferencia de energías $\frac{\Delta E_n}{\hbar v_F} \times 10^{-217}$, dada por (94), para los primeros cinco niveles de energía de la banda de conducción en función de k , obtenidos a partir de (93) con $D = 1$, $\alpha = 1$ y $x_0 = -500$. La línea punteada actúa como envolvente de los estados ligados y permite identificar que los niveles de energía no existen para todo valor de k , sino únicamente para aquellos valores comprendidos entre dicha envolvente y el eje horizontal.

Es importante mencionar que el análisis mostrado en el cálculo de las energías se realizó únicamente a primer orden, con el propósito de ejemplificar la técnica empleada. Sin embargo, dicho análisis puede extenderse al orden deseado sin ningún inconveniente, salvo que, en algunos casos, el tratamiento debe llevarse a cabo de forma numérica.

El siguiente paso consiste en calcular las funciones de onda. Con el fin de ilustrar la aplicación del Método de Iteración Asintótica en su versión perturbativa, se mostrará únicamente el procedimiento para determinar el estado base.

Siguiendo el mismo procedimiento descrito en la subsección 3.1, se determinan inicialmente las funciones $\beta^{(j)}(x)$ (véase (B.13)). Entonces, la primera contribución es dada por

$$\beta_{1+}^{(0)}(z) = \frac{s_{0+}(z)}{\lambda_{0+}(z)} \Big|_{\epsilon \in \epsilon_{1+}, z_0 \rightarrow \infty} = 0, \quad (95)$$

$$\beta_{1-}^{(0)}(z) = \frac{s_{0-}(z)}{\lambda_{0-}(z)} \Big|_{\epsilon \in \epsilon_{1-}, z_0 \rightarrow \infty} = 0, \quad (96)$$

mientras que la contribución a primer orden es dado por

$$\beta_{1+}^{(1)}(z) = \frac{d}{dz} \frac{s_{0+}(z)}{\lambda_{0+}(z)} \Big|_{\epsilon \in \epsilon_{1+}, z_0 \rightarrow \infty} = \frac{4k - \frac{\alpha}{2} \left(\frac{1}{4}z^2 + \frac{5}{4}z + 4 \right) \alpha^2 - k(z+4)\alpha + k^2}{\alpha(-\alpha z - 4\alpha + 2k)^2} \quad (97)$$

$$\beta_{1-}^{(1)}(z) = \frac{d}{dz} \frac{s_{0-}(z)}{\lambda_{0-}(z)} \Big|_{\epsilon \in \epsilon_{1-}, z_0 \rightarrow \infty} = \frac{4k + \frac{\alpha}{2} \left(\frac{1}{4}z^2 + \frac{1}{4}z + 1 \right) \alpha^2 - k(z+2)\alpha + k^2}{\alpha(-\alpha z - 2\alpha + 2k)^2} \quad (98)$$

El siguiente paso es integrar los resultados obtenidos

$$g_{0+}^{(0)}(z, z_0) = c_{0+} \exp - \int_{z_0}^z \beta_{1+}^{(0)}(z') dz' = 1, \quad (99)$$

$$g_{0-}^{(0)}(z, z_0) = c_{0-} \exp - \int_{z_0}^z \beta_{1-}^{(0)}(z') dz' = 1, \quad (100)$$

$$g_{0+}^{(1)}(z, z_0) = c_{1+} \exp - \int_{z_0}^z \beta_{1+}^{(1)}(z') dz',$$

$$= [(z - 1)\alpha - 2k + 5] \frac{(2\alpha - 5)(\alpha - 2k)}{2\alpha^2 - z_0} \times e^{-\frac{2(k - \frac{\alpha}{2}) - \frac{z^2}{2} + \frac{z}{2} + 1}{z_0} \alpha^2 + [(z+2)k - \frac{5z}{2} - \frac{15}{2}] \alpha - 5k + \frac{25}{2}}, \quad (101)$$

$$g_{0-}^{(1)}(z, z_0) = c_{1-} \exp - \int_{z_0}^z \beta_{1-}^{(1)}(z') dz',$$

$$= [(z + 2)\alpha - 2k] \frac{3(2k + \alpha)}{2\alpha z_0} \times e^{-\frac{4[(-\frac{1}{2}z^2 - z + 3)\alpha + k(-3)](k + \frac{\alpha}{2})}{z_0 [(-2z - 4)\alpha^2 + 4k\alpha]}}. \quad (102)$$

donde c_{0+} , c_{0-} , c_{1+} y c_{1-} representan constantes de normalización a determinar. En consecuencia, empleando (65) y (15) junto con los resultados previos, la función de onda correspondiente al primer estado excitado se expresa como

$$\psi_{0\pm}(z, z_0) = z^{\frac{1}{2} + \frac{k^2 - \epsilon_0}{\alpha}} e^{-\xi_{\pm}z} - e^{-\xi_{\pm}z_0} g_{0\pm}^{(0)}(z, z_0) g_{0\pm}^{(1)}(z, z_0). \quad (103)$$

En la Figura 5 se presentan las funciones (54) y (55) para $n=0$, así como la función (103). Puede apreciarse que, para $x_0 = -40$, las curvas punteadas dadas por (103) se aproximan a las soluciones correspondientes. En el límite $x_0 \rightarrow -\infty$, las líneas punteadas coinciden con sus análogos correspondientes (líneas continuas).

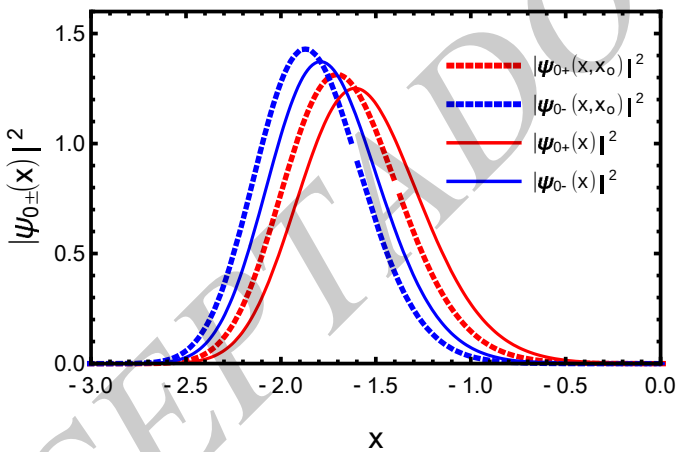


Figura 5: Representación del cuadrado de las funciones de onda en función de x , obtenidas a partir de (54), con $D = 1$, $k = 6$, $\alpha = 1$ y $x_0 = -40$.

Como comentario final, es importante señalar que el problema abordado en esta sección consiste en implementar una modificación en la condición de frontera de la función de onda en el punto x_0 , con el fin de delimitar la placa de grafeno a una región finita definida en el dominio $[x_0 < x < \infty)$. No obstante, surge de manera natural la pregunta de si también es posible imponer una condición de frontera sobre la función de onda en el punto x'_0 cuando el dominio se restringe al intervalo $(-\infty < x \leq x'_0]$.

Resultados preliminares muestran que, al trabajar en el dominio $(-\infty < x \leq x'_0]$, es posible implementar una modificación en la condición de frontera de la función de onda en el punto x'_0 , así como obtener las funciones λ_0 y s_0 . Sin embargo, el problema que surge en este caso es la imposibilidad de encontrar una solución analítica para el espectro de energías, debido a la complejidad de las expresiones resultantes. Cabe señalar que el tratamiento numérico de este problema parece ser viable; no obstante, este análisis se deja como material para un trabajo futuro.

4. Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado un perfil exponencial decreciente para el campo magnético, en el cual las funciones de onda de los electrones en una capa de grafeno pueden obtenerse de manera analítica en dos escenarios: el primero, donde el campo magnético está definido en todo el espacio, y el segundo, donde dicho campo se restringe a una región finita.

El análisis del sistema en el que la placa de grafeno se encuentra confinada a una región acotada revela comportamientos cualitativamente distintos con respecto al caso en el que la placa no presenta confinamiento.

Si bien es cierto que los estados electrónicos en nanocintas de grafeno sin la presencia de un campo magnético externo han sido ampliamente estudiados por Beneventano *et al.* (2018) y Brey y Fertig (2006) para bordes de tipo zig-zag y armchair, en dichos casos las condiciones de frontera impuestas sobre la función de onda consisten en que esta se anule en una sola subred en cada borde, lo cual modifica el espectro de energía en cada configuración. Por otro lado, Schnez *et al.* (2008) mostró que cuando se considera el acoplamiento del operador de Dirac sin masa con un potencial de masa nulo dentro del punto cuántico e infinito en el resto del sistema, las condiciones de contorno resultantes se conocen como condiciones de frontera de masa infinita.

No obstante, en este trabajo las condiciones de frontera utilizadas (de tipo Dirichlet) para considerar regiones finitas de grafeno inmerso en un campo magnético externo deben entenderse como una primera aproximación al problema físico, y no necesariamente como las más adecuadas para describir de manera completa este tipo de sistemas. En este sentido, sería de gran interés implementar en trabajos futuros las condiciones de frontera descritas en el párrafo anterior en el sistema aquí tratado y analizar las diferencias en el espectro energético resultante en comparación con el obtenido en este caso.

Los resultados obtenidos para los niveles de energía muestran que ambos espectros presentan un comportamiento análogo. Asimismo, de (93) se deduce que, en el límite $x_0 \rightarrow -\infty$ (o de forma equivalente $z_0 \rightarrow \infty$), el sistema recupera las propiedades del caso sin modificación de las condiciones de frontera, conforme a (38).

Cabe destacar que la modificación de las condiciones de frontera o confinamiento propuesta en este trabajo constituye un paso importante para vincular el análisis teórico con el entorno experimental. Esta reformulación ofrece una base teórica útil para explorar configuraciones factibles en laboratorio y permite estudiar cómo la geometría del confinamiento y los parámetros

del sistema influyen en las propiedades electrónicas, energéticas y otros aspectos del comportamiento físico del sistema.

Referencias

Beneventano, C. G., Fialkovsky, I. V., Nieto, M., y Santangelo, E. M. (2018). Mass distortions and edge modes in graphene armchair nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 97:155406.

Brey, L. y Fertig, H. A. (2006). Electronic states of graphene nanoribbons studied with the dirac equation. *Phys. Rev. B*, 73:235411.

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.

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

Ciftci, H., Hall, R. L., y Saad, N. (2005). Perturbation theory in a framework of iteration methods. *Physics Letters A*, 340(5):388–396.

Jiménez, M., López, N. Y., Pedraza, O., y López, L. A. (2025). Método de iteración asintótica: átomo de hidrógeno, grafeno, modos cuasi normales. *Revista Mexicana de Física E*, 22(2):020202–1.

Kotov, V. N., Uchoa, B., Pereira, V. M., Guinea, F., y Neto, A. H. C. (2012). Electron-electron interactions in graphene: Current status and perspectives. *Reviews of Modern Physics*, 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):45305.

López-Juárez, N. Y., Pedraza-Ortega, O., López-Suarez, L. A., y Arceo-Reyes, R. (2023). Estados ligados en el grafeno en presencia de campo magnético. *Páidi Boletín Científico De Ciencias Básicas E Ingenierías Del ICBI*, 11(Especial5):161–168.

Neto, A. H. C., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., y Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81:109–162.

Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Dubonos, S. V., y Grigorieva, I. V. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669.

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.

Schnez, S., Ensslin, K., Sigrist, M., e Ihn, T. (2008). Analytic model of the energy spectrum of a graphene quantum dot in a perpendicular magnetic field. *Phys. Rev. B*, 78:195427.

Apéndice A. Método de Iteración Asintótica

El Método de Iteración Asintótica, presentado por Ciftci et al. (2003), se puede emplear para resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x). \tag{A.1}$$

Para implementar el Método de Iteración Asintótica en (A.1), se introduce la siguiente redefinición

$$\psi(x) = f(x) \chi(x). \tag{A.2}$$

Al sustituir (A.2) en (A.1), se obtiene una ecuación diferencial lineal homogénea de segundo orden para $\chi(x)$

$$\frac{d^2 \chi(x)}{dx^2} = \lambda_0(x) \frac{d\chi(x)}{dx} + s_0(x) \chi(x), \tag{A.3}$$

donde

$$\lambda_0(x) = -2 \frac{f'(x)}{f(x)}, \tag{A.4}$$

$$s_0(x) = E - V(x) - \frac{f''(x)}{f(x)}. \tag{A.5}$$

Es importante enfatizar que la determinación de $\lambda_0(x)$ y $s_0(x)$ requiere, en primer lugar, encontrar a $f(x)$. Para ello, es común analizar el comportamiento asintótico de (A.1) y así obtener $f(x)$. Aquí, $\lambda_0(x)$ ($\lambda_0 \neq 0$) y $s_0(x)$ son funciones $C_\infty(a, b)$.

Para resolver (A.3), se aprovecha la simetría presente en el lado derecho de la ecuación. Derivando respecto de x , se obtiene

$$\frac{d^3 \chi(x)}{dx^3} = \lambda_1(x) \frac{d\chi(x)}{dx} + s_1(x) \chi(x), \tag{A.6}$$

donde

$$\lambda_1(x) = \lambda_0'(x) + s_0(x) + [\lambda_0(x)]^2, \tag{A.7}$$

$$s_1(x) = s_0'(x) + s_0(x) \lambda_0(x). \tag{A.8}$$

Comparando (A.3) y (A.6), se observa una estructura similar en el lado derecho, lo cual es la base del método.

Aplicando inducción matemática a (A.3), se obtiene:

$$\chi^{(n+1)}(x) = \lambda_{n-1}(x) \chi'(x) + s_{n-1}(x) \chi(x), \tag{A.9}$$

$$\chi^{(n+2)}(x) = \lambda_n(x) \chi'(x) + s_n(x) \chi(x), \tag{A.10}$$

con las siguientes relaciones recursivas

$$\lambda_n(x) = \lambda_{n-1}'(x) + s_{n-1}(x) + \lambda_0(x) \lambda_{n-1}(x), \tag{A.11}$$

$$s_n(x) = s_{n-1}'(x) + s_0(x) \lambda_{n-1}(x). \tag{A.12}$$

Aquí, la tilde indica derivada respecto de x y los superíndices $(n + 1)$, $(n + 2)$ representan derivadas de orden superior.

Tomando el cociente entre (A.9) y (A.10), se obtiene:

$$\frac{d}{dx} \ln \chi^{(n+1)} = \frac{\chi^{(n+2)}}{\chi^{(n+1)}} = \frac{\lambda_n \chi' + \frac{s_n}{\lambda_n} \chi}{\lambda_{n-1} \chi' + \frac{s_{n-1}}{\lambda_{n-1}} \chi}. \tag{A.13}$$

El comportamiento asintótico del método establece que, para n dada, se requiere que se satisfaga la siguiente condición

$$\frac{s_n}{\lambda_n} = \frac{s_{n-1}}{\lambda_{n-1}} \equiv \beta(x). \tag{A.14}$$

Sustituyendo (A.14) en (A.13), se llega a

$$\frac{d}{dx} \ln \chi^{(n+1)} = \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}}, \tag{A.15}$$

cuya solución es

$$\chi^{(n+1)}(x) = C_1 \exp \int_x^{\#} \frac{\lambda_n(t)}{\lambda_{n-1}(t)} dt, \tag{A.16}$$

donde C_1 es una constante de integración. Usando (A.14) y (A.11), se reescribe como

$$\chi^{(n+1)}(x) = C_1 \lambda_{n-1}(x) \exp \int_x^{\#} \{\beta(t) + \lambda_0(t)\} dt. \tag{A.17}$$

Al sustituir (A.17) en (A.9), se obtiene:

$$\chi'(x) + \beta(x) \chi(x) = C_1 \lambda_{n-1}(x) \exp \int_x^{\#} \{\beta(t) + \lambda_0(t)\} dt. \tag{A.18}$$

Aplicando el método del factor integrante, es posible obtener la siguiente expresión

$$\chi(x) = e^{-\int_x^{\#} \beta(t) dt} \left(C_2 + C_1 \int_x^{\#} e^{\int_x^{\#} [\lambda_0(t) + 2\beta(t)] dt} dt \right), \tag{A.19}$$

donde C_2 es otra constante de integración. En problemas con soluciones exactas, es usual tomar $C_1 = 0$.

De forma equivalente, (A.14) puede expresarse como:

$$\delta_k(x) = s_{k+1}(x)\lambda_k(x) - s_k(x)\lambda_{k+1}(x) \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (\text{A.20})$$

donde k es el número de iteraciones. La condición $\delta_k(x) = 0$, denominada *condición de cuantización*, determina los eigenvalores de (A.1).

Para potenciales $V(x)$ simples, la ecuación de cuantización puede resolverse analíticamente sin fijar un valor específico de x . En cambio, para potenciales no triviales con solución exacta, es necesario elegir un punto x_1 adecuado (máximo, mínimo de $V(x)$ o cero de $\lambda_0(x)$) para resolver $\delta_k(x) = 0$ y así encontrar los valores de energía.

Apéndice B. Método de Iteración Asintótica en su formulación perturbativa

Existen sistemas en los cuales no es posible obtener soluciones exactas para un potencial $V(x)$ considerado en (A.1). En tales casos, es posible encontrar soluciones aproximadas empleando teoría de perturbaciones, como se muestra en el trabajo desarrollado por Ciftci *et al.* (2005). Si $V(x)$ puede expresarse como

$$V(x) = V_1(x) + \lambda V_2(x), \quad (\text{B.1})$$

donde $V_1(x)$ representa un potencial exactamente soluble, $V_2(x)$ actúa como una perturbación del sistema y λ es un parámetro perturbativo. Para un potencial de la forma (B.1), la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que describe el sistema es

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_1(x) + \lambda V_2(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (\text{B.2})$$

La teoría de perturbaciones, asume que los eigenvalores E de (B.2), pueden expresarse como una serie de potencias en el parámetro perturbativo λ :

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \lambda^3 E^{(3)} + \dots \quad (\text{B.3})$$

Aquí, el objetivo de la teoría de perturbaciones es determinar los coeficientes $E^{(j)}$ con $j = 0, 1, 2, \dots$. Siguiendo la idea expresada en (A.2), se propone la siguiente expresión

$$\psi(x) = y_0(x) y(x), \quad (\text{B.4})$$

aquí $y_0(x)$ también puede ser determinado del comportamiento asintótico de (B.2) en sus puntos singulares. Sustituyendo (B.4) en (B.2), se obtiene la siguiente ecuación para $y(x)$

$$y''(x) = \lambda_0(x, \lambda) y'(x) + s_0(x, \lambda) y(x), \quad (\text{B.5})$$

con

$$\lambda_0(x, \lambda) = -\frac{2y_0'(x)}{y_0(x)}, \quad (\text{B.6})$$

$$s_0(x, \lambda) = E - V_1(x) - \lambda V_2(x) - \frac{y_0''(x)}{y_0(x)}. \quad (\text{B.7})$$

Siguiendo el Método de Iteración Asintótica, se retoman las definiciones de (A.11) y (A.12) para construir recursivamente

$\lambda_k(x, \lambda)$ y $s_k(x, \lambda)$. De igual forma, a partir de (A.20) es posible calcular la condición de cuantización en su forma perturbativa, dada por

$$\delta_k(x, \lambda) = s_k(x, \lambda)\lambda_{k+1}(x, \lambda) - s_{k+1}(x, \lambda)\lambda_k(x, \lambda) = 0. \quad (\text{B.8})$$

Aquí, el Método de Iteración Asintótica en su formulación perturbativa indica que la función $\delta_k(x, \lambda)$ debe desarrollarse en una serie de Taylor alrededor de $\lambda = 0$

$$\delta_k(x, \lambda) = \sum_{l=0}^{\infty} \lambda^l \delta_k^{(l)}(x), \quad (\text{B.9})$$

donde

$$\delta_k^{(l)}(x) = \frac{1}{l!} \frac{\partial^l \delta_k(x, \lambda)}{\partial \lambda^l} \Big|_{\lambda=0}. \quad (\text{B.10})$$

De la condición (B.8), es claro que se debe de satisfacer las siguientes condiciones:

$$\delta_k^{(0)}(x) = 0, \quad \delta_k^{(1)}(x) = 0, \quad \delta_k^{(2)}(x) = 0, \quad \dots \quad (\text{B.11})$$

De cada condición dada en (B.11), se puede obtener los eigenvalores: $E^{(0)}, E^{(1)}, E^{(2)}, \dots$

Nuevamente, cabe mencionar que para ciertos potenciales $V(x)$, la ecuación (B.8) puede resolverse analíticamente sin necesidad de fijar un valor específico de x . Sin embargo, para otros tipos de potenciales es necesario seleccionar un punto x_1 adecuado (por ejemplo, un máximo o mínimo de $V(x)$, o un cero de $\lambda_0(x)$) para resolver $\delta_k(x) = 0$ y, de este modo, determinar los valores de energía.

El siguiente paso consiste en determinar las eigenfunciones. Para ello, siguiendo la idea de la expresión (A.14), es necesario definir la siguiente función:

$$\beta(x, \lambda) = \frac{s_k(x, \lambda)}{\lambda_k(x, \lambda)} = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j \beta^{(j)}(x), \quad (\text{B.12})$$

con

$$\beta^{(j)}(x) = \frac{1}{j!} \frac{\partial^j}{\partial \lambda^j} \frac{s_k(x, \lambda)}{\lambda_k(x, \lambda)} \Big|_{\lambda=0}. \quad (\text{B.13})$$

Sustituyendo (B.13) en (A.19), se obtiene

$$y(x) = C_2 \exp \left[- \int \left(\beta^{(0)}(t) + \lambda \beta^{(1)}(t) + \lambda^2 \beta^{(2)}(t) + \dots \right) dt \right]. \quad (\text{B.14})$$

Esta expresión puede factorizarse como un producto

$$y(x) = C_2 \exp \left[- \int \beta^{(0)}(t) dt \right] \exp \left[-\lambda \int \beta^{(1)}(t) dt \right] \times \exp \left[-\lambda^2 \int \beta^{(2)}(t) dt \right] \dots \quad (\text{B.15})$$

Simplificando (B.15), se tiene

$$y(x) = C_2 \sum_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(x), \quad (\text{B.16})$$

con

$$f^{(k)}(x) = \exp \left[-\lambda \int \eta^{(k)}(t) dt \right]. \quad (\text{B.17})$$