

# Modelización y Simulación Numérica de Efectos de Confinamiento en el Grafeno

Edward Villegas  
evillega@eafit.edu.co

Ingeniería Física  
Departamento de Ciencias Básicas  
Universidad EAFIT  
Medellín, Colombia  
2011

# Modelización y Simulación Numérica de Efectos de Confinamiento en el Grafeno

Trabajo de Grado para optar al título de Ingeniero Físico

Asesor: Mario Elkin Vélez Ruiz  
Ingeniería Física  
Escuela de Ciencias y Humanidades  
Universidad EAFIT

Ingeniería Física  
Departamento de Ciencias Básicas  
Universidad EAFIT  
Medellín, Colombia  
2011

*"The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved."*

**Paul Dirac**



# Agradecimientos

Agradezco sobremanera el apoyo brindado por mi familia en este proceso de crecimiento personal y profesional que llega al final de una de sus etapas, por estar siempre conmigo y haber creído en mi. Particularmente un especial agradecimiento a mi madre *Rocio Pulgarin* y a mi padre *Jesus Villegas* en su memoria.

Agradezco a mis compañeros de *ingeniería física*, por los distintos momentos y experiencias compartidas que no solo nutrieron conocimiento sino también una amistad. Mencionarlos aquí a todos tal vez sea un poco extenso, y algunos de ellos de gran cercanía en los últimos momentos de la carrera como Nicolas Guarin, Santiago Echeverri, Leidy Giraldo y Juliana Bahena, no sin ello implicar que la no mención de otros sea que no lo amerite. Particularmente a los dos primeros agradezco por la participación en discusiones de interés para la realización de este trabajo.

Sobremanera, agradezco a mi asesor de trabajo de grado, *Mario Vélez*, que además de haber sido el guía en estos pasos finales fue también un amigo.

A todo el personal docente de ingeniería física y de los laboratorios de física, por su oportuna colaboración y acompañamiento en este proceso.

Y sin duda, distintas personas ajenas a este proceso que de una u otra manera contribuyeron para que continuara este camino y no desfalleciera.

# Tabla de Contenido

Resumen	xi
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos . . . . .	1
1.2 Justificación . . . . .	2
1.3 Definición del problema . . . . .	3
<b>I Estado del arte</b>	<b>4</b>
<b>2 Grafeno</b>	<b>5</b>
2.1 Primeros compuestos . . . . .	8
2.2 Descubrimiento del grafeno . . . . .	9
2.3 Tratamiento del grafeno . . . . .	11
2.4 Potenciales aplicaciones . . . . .	12
<b>3 Confinamiento cuántico</b>	<b>13</b>
3.1 Fermiones de Dirac . . . . .	13
3.2 Efecto Zitterbewegung . . . . .	14
3.3 Paradoja de Klein . . . . .	16
3.4 Efecto Hall cuántico . . . . .	17
<b>4 Modelos y métodos de simulación</b>	<b>19</b>
4.1 Modelización . . . . .	19
4.1.1 Potencial electrostático . . . . .	22

4.1.2	Aproximación de amarre fuerte . . . . .	22
4.2	Simulación . . . . .	24
4.2.1	Ondas planas . . . . .	24
4.2.2	Método espectral . . . . .	24
4.2.3	Operador de separación . . . . .	25
4.2.4	Elementos finitos . . . . .	26
4.2.5	Monte Carlo . . . . .	27
4.2.6	Funcionales de densidad . . . . .	28
4.2.7	Quantum walkers . . . . .	29
<b>5</b>	<b>Física computacional</b>	<b>30</b>
5.1	Algoritmos computacionales . . . . .	31
5.2	Lenguajes de programación . . . . .	32
5.2.1	Breve comparación de lenguajes . . . . .	32
5.3	Python . . . . .	34
5.3.1	Numpy y Scipy . . . . .	34
5.3.2	Matplotlib . . . . .	35
5.4	Paraview . . . . .	35
<b>II</b>	<b>Modelización y simulación</b>	<b>36</b>
<b>6</b>	<b>Hamiltoniano del grafeno</b>	<b>37</b>
6.1	Enlace químico del carbono . . . . .	37
6.2	Estructura cristalina . . . . .	38
6.3	Aproximación de amarre fuerte . . . . .	40
6.4	Hamiltoniano de Dirac . . . . .	43
<b>7</b>	<b>Efectos de confinamiento en el grafeno</b>	<b>47</b>
7.1	Efecto Zitterbewegung . . . . .	48
7.2	Paradoja de Klein . . . . .	49
7.2.1	Conductancia mínima . . . . .	51

<b>8 Simulación</b>	<b>54</b>
8.1 Método de operador de separación con FFT . . . . .	54
8.2 Unidades de variables . . . . .	57
8.3 Implementación . . . . .	57
8.3.1 Definiciones . . . . .	58
8.3.2 Discretización . . . . .	60
8.3.3 Propagación temporal . . . . .	61
8.3.4 Visualización . . . . .	62
<b>III Resultados y discusión</b>	<b>63</b>
<b>9 Resultados y discusión</b>	<b>64</b>
<b>10 Conclusiones</b>	<b>70</b>
10.1 Trabajo futuro . . . . .	71
<b>Bibliografía</b>	<b>73</b>
<b>A Código y módulos</b>	<b>xvi</b>
A.1 Código principal . . . . .	xvi
A.2 mshCreator . . . . .	xix
A.3 Evalmsh . . . . .	xx
A.4 Piecefun . . . . .	xxi
A.5 SplitOps . . . . .	xxii
A.6 Drawing . . . . .	xxv
A.6.1 bandstructdrawgraph . . . . .	xxvii



# Lista de Figuras

2.1	Calculo de los indices H y G para las publicaciones en investigación sobre grafeno. . . . .	6
2.2	Número total de artículos cubiertos por la <i>Science Citation Index</i> por año [1]. . . . .	7
2.3	2.3a Fondos de la NFS para desarrollo de investigaciones en grafeno [2]. 2.3b Numero de publicaciones segun corresponde a trabajos teóricos o experimentales. Base de datos INSPEC [1]. . . . .	7
2.4	Modelo $C_8K$ que muestra el apilamiento de capas de grafito y potasio. El arreglo del intercalamiento sigue la secuencia $A\alpha A\beta A\gamma$ donde $A$ es la capa de grafito y las letras griegas las capas de potasio [3]. . . . .	8
2.5	Ilustracion de formas alotrópicas del carbono [4]. . . . .	10
2.6	Línea de tiempo del grafeno. . . . .	10
3.1	Ilustración del efecto Zitterbewegung para distintas masas [5]. . . . .	15
3.2	Esquema del fenómeno de tunelamiento. Barrera de alto $V_0$ y ancho $D$ . Se acerca un fermión de Dirac de momento $k$ y energía $E$ [6]. . . . .	16
3.3	Probabilidad de transmisión para una barrera de ancho de 100nm para el grafeno monocapa en función del angulo de incidencia. La energía de Fermi del electrón incidente es 80meV, $\lambda = 50nm$ , y barrera de potencial $V_0$ de 200 y 285 meV (curva roja y azul respectivamente) [6]. . . . .	17
5.1	Representación de la naturaleza multidisciplinar de la física computacional como un solapamiento de la física, la matematica aplicada y las ciencias computacionales. . . . .	31
5.2	Nuevo paradigma del desarrollo de la ciencia. . . . .	31

6.1	Hibridización $sp^2$ del grafeno. . . . .	38
6.2	Determinación de los vectores de red del espacio directo. . . . .	39
6.3	Estructura hexagonal de la red del grafeno. La celda unitaria esta conformada por dos átomos, que identifican los sitios de red A y B. $a_1$ y $a_2$ son los vectores de red en el espacio directo. . . . .	39
6.4	Relación de dispersión del grafeno a partir de la aproximación de amarre fuerte. . . . .	43
6.5	Relación lineal de dispersión alrededor del punto K. . . . .	46
7.1	Esquema del fenómeno de tunelamiento. . . . .	50
7.2	Esquema ilustrativo del flujo de corriente en un cable con diferencia de niveles ocupados en los extremos conectados. . . . .	52
8.1	Diagrama de flujo del programa principal. . . . .	59
9.1	Test 3. Paquete de onda positivo, campo eléctrico y $W=0.01$ . . . . .	65
9.2	Test 6. Paquete de onda positivo, campo magnético y $W=0.01$ . . . . .	66
9.3	Test 12. Paquete de onda con dos componentes, campo eléctrico y $W=0.01$ . . . . .	67
9.4	Test 16. Paquete de onda con dos componentes, campo electrico y $W=0.05$ . . . . .	68
9.5	Manifestación del efecto Zitterbewegung. . . . .	69

# Resumen

El grafeno se ha convertido en el material revolucionario de esta década, no solo en el ámbito teórico sino también en áreas de desarrollo tecnológico por sus exóticas propiedades. Estas propiedades, surgen como resultado de la naturaleza de los electrones presentes bajo la red del grafeno, en la cual estos poseen comportamientos asociados a la mecánica cuántica relativista.

Para fin de su estudio teórico y concebir sus posibles aplicaciones mediante el calculo de sus propiedades se hace necesario recurrir a la ecuación de Dirac como aproximación a la ecuación de autovalores del hamiltoniano de amarre fuerte del grafeno.

Esta aproximación lleva a mostrarnos una serie fenómenos peculiares como lo son el efecto Zitterbewegung y la paradoja de Klein, que influyen en la presencia de una conductancia mínima en el grafeno y otros efectos de posible aplicación.

El estudio teórico de carácter netamente analítico puede tener limitaciones a condiciones muy particulares de potenciales externos y zonas de análisis, limitaciones que las herramientas numéricas de simulación no contienen, ampliando el panorama de condiciones posibles de analizar.

Este trabajo realiza una exploración del estado del arte en el estudio de grafeno, técnicas numéricas en mecánica cuántica y mecánica cuántica relativista, al igual que los desarrollos matemáticos que llevan a considerar los efectos relativistas en el grafeno, y un proceso exploratorio de la técnica del operador de separación con transformada de Fourier para la dinámica de paquetes de onda relativistas en 2D de fermiones sin masa.

**Palabras Claves:** *Grafeno, Ecuación de Dirac, Paradoja de Klein, Efecto Zitterbewegung, Estructura de bandas, Simulación Numérica.*

# Capítulo 1

## Introducción

A continuación se presenta el resumen de la propuesta de trabajo de grado entregada en el documento de anteproyecto.

### 1.1 Objetivos

#### Objetivo general

Modelizar y simular efectos de confinamiento en el grafeno con métodos de la física computacional.

#### Objetivos específicos

- Documentar los aspectos analíticos necesarios para el desarrollo de los efectos de confinamiento en el grafeno.
- Hacer uso de los métodos numéricos para simular el efecto Zitterbewegung en el grafeno.
- Hacer uso de los métodos numéricos para simular el tunelamiento de Klein en el grafeno.

## 1.2 Justificación

La elaboración del presente trabajo gira entorno a las tendencias actuales en investigación y desarrollo en las áreas de materiales, física y otras ciencias; en donde las técnicas y métodos de la *física teórica y computacional* se han convertido en una herramienta de alto impacto [7, 8], permitiendo la realización de *laboratorios virtuales* que eviten la realización de experimentos y pruebas de costo significativo o de difícil realización por limitaciones tecnológicas [9].

El grafeno es un arreglo hexagonal planar (monocapa) de átomos de carbono que componen las capas constitutivas del grafito [10, 11]. Este material exhibe propiedades electrónicas *exóticas* [12, 13] y aspira a propiciar un cambio importante en la electrónica y sus aplicaciones [14–16], lo anterior unido a sus extraordinarias propiedades mecánicas [17, 18] nos permiten pensar en este como el material del futuro [19, 20].

Es un material que sirve como escenario para el estudio teórico y experimental de algunos aspectos de la teoría cuántica de campos y de la mecánica cuántica relativista [20, 21] dada la presencia de efectos cuánticos como el efecto Hall cuántico y efectos de confinamiento relativistas como el efecto Zitterbewegung y el tunelamiento de Klein [14, 22, 23].

En años recientes, hay un creciente interés por la realización de simulaciones de los efectos cuánticos relativistas en sistemas físicos controlables, teniendo como ejemplo el efecto Unruh en las trampas de iones, el efecto Zitterbewegung para fermiones masivos en estado sólido, propiedades de condensados de Bose-Einstein y estados de excitación de electrones en sistemas 2D como el grafeno [5, 24] donde los parámetros de tunelabilidad permiten acceder a distintos regímenes físicos [5].

El efecto Zitterbewegung relativista no ha sido observado aún experimentalmente, se ha observado este mismo efecto producido por el acoplamiento espín-órbita en estructuras semiconductores (teóricamente mostrado a partir de la solución de la ecuación de Dirac y su expansión no relativista) representa un gran interés de estudio para la emergente *espintrónica* en el desarrollo y modelización de nanoestructuras semiconductores [25].

El estudio y simulación de los efectos relativistas de confinamiento en grafeno [23, 26] en lo cual se basa este trabajo, se constituye en el estudio del comportamiento de fermiones de Dirac sin masa bajo las condiciones estructurales y energéticas que impone el grafeno tal como se encuentran asociados estos efectos en la literatura [23, 27].

### 1.3 Definición del problema

Se busca implementar algoritmos de simulación numérica para el análisis de los efectos de confinamiento relativistas *Zitterbewegung* y el *tunelamiento de Klein* presentes en el grafeno, en los cuales sea posible ajustar algunos parámetros, condiciones iniciales, la lectura y visualización de los resultados.

# Parte I

## Estado del arte

# Capítulo 2

## Grafeno

Con el descubrimiento del grafeno en el 2004, aislado de cristales de grafito, se ha convertido en un tema de gran interés para la comunidad científica, tanto de investigadores teóricos como de experimentalistas, relacionando un gran numero de publicaciones y citas en el medio académico, aumentando continuamente dichas publicaciones por año [1, 2]. El h-índice asociado al tema del grafeno es 149<sup>1</sup> (ver fig.2.1<sup>2</sup>), y tiene un promedio de 20 citas por artículo [2], lo que muestra el impacto científico que ha tenido el grafeno desde su descubrimiento.

En la figura 2.2 se aprecia el crecimiento de las publicaciones acerca del tema de nanoestructuras de carbono, cronológicamente (fig.2.2a) y desde el momento de su descubrimiento (fig.2.2b). En fig.2.2a podemos notar que el interés teórico por el grafeno surgió mucho antes de su descubrimiento, incluso unos 60 años antes [28]. Si bien el área de investigación en nanotubos se ha mostrado más fructífera, se observa que con base al año de descubrimiento el numero de publicaciones acerca de grafeno es mucho mayor, indicando la tendencia en investigación entre estas 3 formas alotrópicas de carbono nanoestructurado [1].

La *National Science Foundation* (NFS) es una de las mayores entidades en financiamiento de proyectos de investigación en grafeno. En el periodo 2004-2008 (ver fig.2.3a), la NFS aportó 28 millones de dólares para los investigadores en dicho tema,

---

<sup>1</sup>*H-index*, es un índice bibliométrico que indica el mayor número de artículos que tienen como mínimo *h* citas. En este caso, el tema del grafeno cuenta con 149 artículos

<sup>2</sup>Elaboración propia. Los datos para la construcción de este gráfico fueron extraídos de la base de datos *SCOPUS* en el mes de abril de 2011.



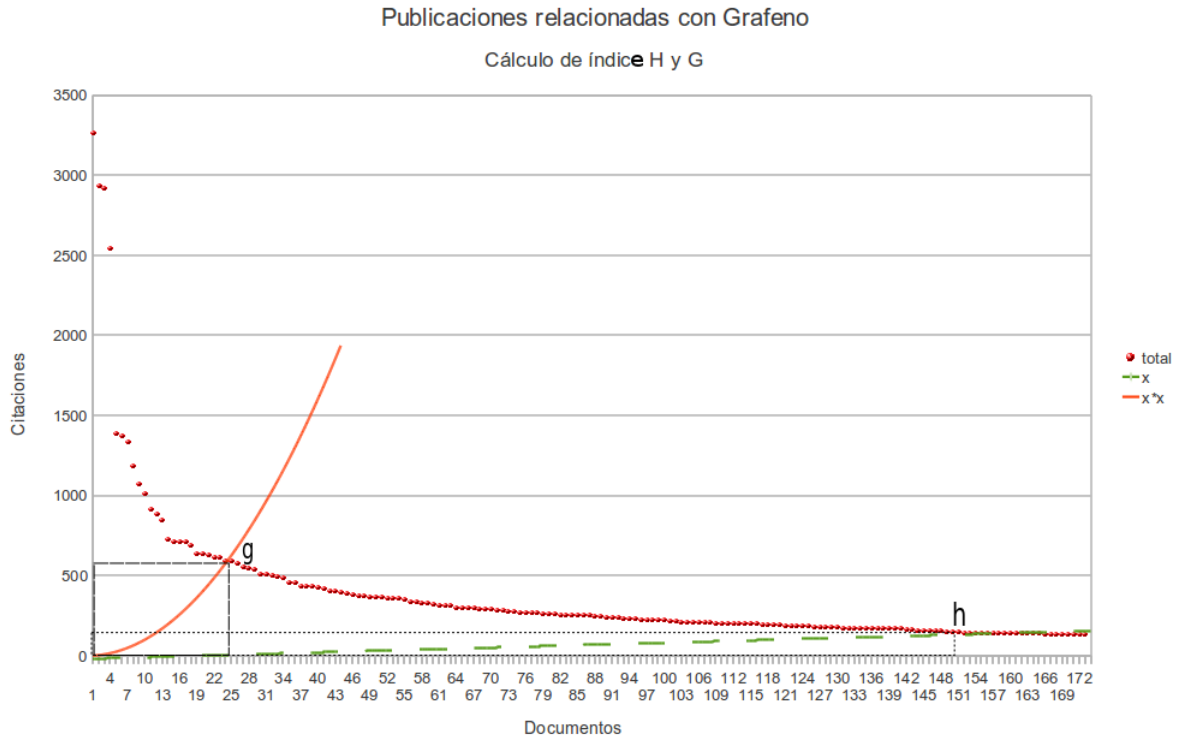


Figura 2.1: Cálculo de los índices H y G para las publicaciones en investigación sobre grafeno.

de los cuales, 12 millones de dólares fueron entregados en el año 2008 [2].

La evolución de las áreas exploradas en la investigación en grafeno se han tornado más teóricas sobre los últimos años como puede apreciarse en fig.2.3b [1]. Un gran número de publicaciones se han enfocado en el estudio de estructuras y propiedades físicas de varias formaciones de grafeno. Estas estructuras incluyen nanocintas, apilamientos, hojas y capas bidimensionales. Algunas de las propiedades físicas que han sido exploradas son la estructura de bandas, defectos atómicos, transporte de carga, ferromagnetismo y propiedades de semiconductor. Publicaciones más recientes se han enfocado en sus potenciales aplicaciones como dispositivos de efecto de campo, semiconductores y resonadores electromecánicos, así como aplicaciones en teoría de la información y sistemas de cómputo y almacenamiento avanzado de información como computación cuántica y espintrónica [1, 29].

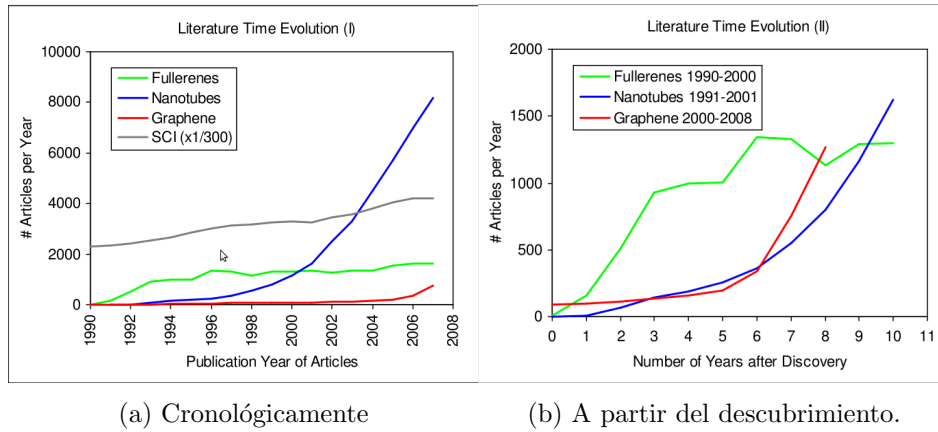


Figura 2.2: Número total de artículos cubiertos por la *Science Citation Index* por año [1].

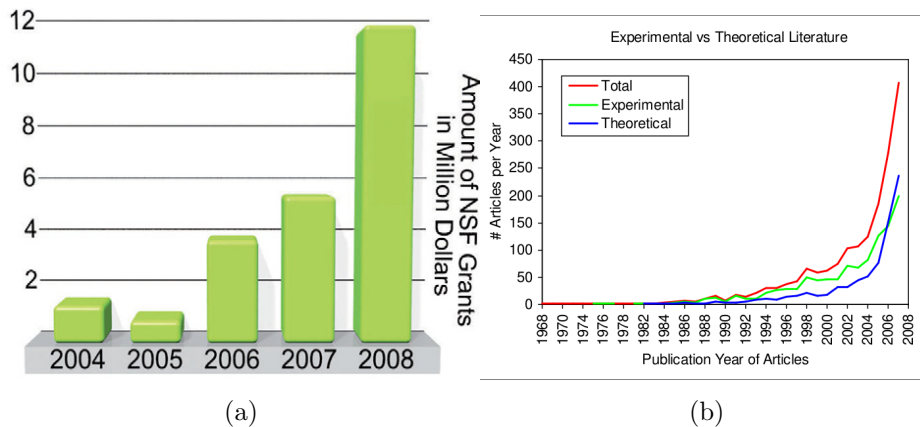


Figura 2.3: 2.3a Fondos de la NFS para desarrollo de investigaciones en grafeno [2]. 2.3b Numero de publicaciones segun corresponde a trabajos teóricos o experimentales. Base de datos INSPEC [1].

## 2.1 Primeros compuestos

La historia del grafeno, inicia con los óxidos de grafito y óxidos de grafeno (por exfoliación del óxido de grafito), los cuales han sido estudiados desde hace más de 170 años. Las primeras preparaciones de exfoliación de óxido de grafito fueron reportadas hacia 1840 por el alemán Schafhaeutil, quien hace mención del procedimiento asistido por ácido sulfúrico y por ácido nítrico [30].

En lo posterior, otra familia de compuestos, denominados Compuestos Intercalados de Grafito (GIC, por su sigla en inglés - *Graphite Intercalation Compounds* -) fueron desarrollados y estudiados. La estructura apilada de grafito es sostenida por los GIC's pero los espacios entre capas son ampliados a varios angstroms conduciendo a un desacople electrónico de las capas individuales y produciendo efectos de superconductividad en algunos casos, también observado en capas individuales de grafeno [30]. Esta separación entre los planos atómicos se logra mediante la técnica de exfoliación química, en la cual entre los distintos planos atómicos es ubicada una molécula de gran tamaño teniendo así capas de grafeno aisladas en una matriz tridimensional [3].

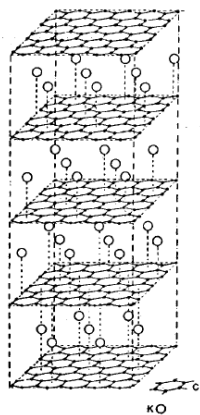


Figura 2.4: Modelo  $C_8K$  que muestra el apilamiento de capas de grafito y potasio. El arreglo del intercalamiento sigue la secuencia  $A\alpha A\beta A\gamma$  donde  $A$  es la capa de grafito y las letras griegas las capas de potasio [3].

En 1961, Boehm encuentra que la reducción química de óxidos de grafito en un medio alcalino diluido con hidrazina, sulfito de hidrógeno y sales de hierro lleva a la formación de delgadas capas de carbono que tienen pocas cantidades de hidrógeno y oxígeno. Boehm en esta observación concluye que las delgadas capas están constituidas de una

única capa de carbono [30,31].

## 2.2 Descubrimiento del grafeno

En 1968 Morgan y Somorjai obtienen por medio de caracterización LEED (Low-Energy Electron Diffraction) patrones producidos por absorción de pequeñas moléculas orgánicas en Pt(100). En 1969 después del análisis de estos patrones, podría interpretarse de los datos que posiblemente había presencia de monocapas de grafito en la superficie del platino [30].

Los fulerenos, los primeros de esta familia nanoestructurada, son descubiertos en 1985 por los químicos Harold Kroto, James Heath, Sean O'brien, Robert Curl y Richard Smalley [32]. Los fulerenos son moléculas de carbono esféricas que aproximan un cuerpo de cero dimensiones [22].

El nombre de grafeno fue acuñado por primera vez por Boehm en 1986 [33], y tiene su origen en la necesidad de la descripción de las capas intercaladas de grafito en los GIC's [30]. Este término fue oficializado por la IUPAC en 1997 afirmando que "*The term graphene should be used only when the reactions, structural relations or other properties of individual layers are discussed*" [34].

Los nanotubos de carbono fueron descubiertos por S. Iijima en 1991 durante el desarrollo de una investigación en fulerenos [32]. Estos primeros nanotubos de carbono fueron multipared, teniendo diámetros exteriores en el rango de 4 a 30  $\mu m$ , y fue hasta 1993 que el nanotubo de carbono de pared sencilla fue obtenido mediante arco de descarga en grafito [35].

Recientemente se han observado formas mixtas entre nanotubos de carbono y fulerenos [35].

En 2004, Novoselov y Geim, de la Universidad de Manchester, descubren el Grafeno. Hasta este momento, se concebía que estructuras 2D no podían existir ya que serian termodinámicamente inestables. La teoría de Landau indicaba que las contribuciones térmicas en cristales de baja dimensionalidad introducirían desplazamientos en los átomos comparables a las distancias inter-atómicas [10] y llevarían al cristal de grafeno a tomar una forma 3D mas estable, como nanotubos o fulerenos<sup>3</sup> [36,37].

---

<sup>3</sup>Si bien los nanotubos y fulerenos en su modelización se conciben como estructuras 1D y 0D,

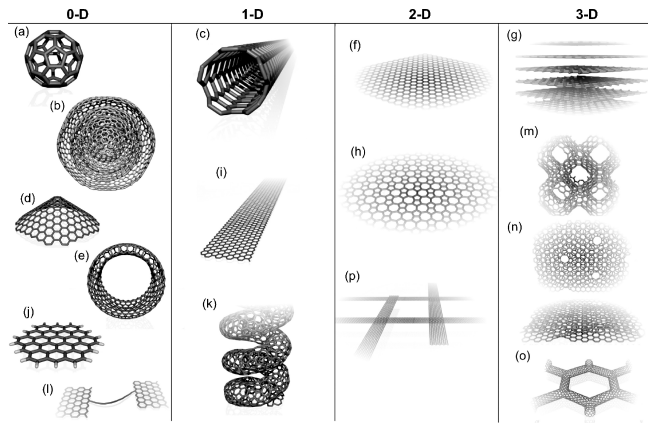


Figura 2.5: Ilustración de formas alotrópicas del carbono [4].

La técnica para su obtención en 2004 era de tipo mecánico. Se trata del método de exfoliación mecánica del grafito. Se usa una cinta adhesiva sucesivamente para separar los cristales de grafito en piezas cada vez más delgadas. Posteriormente la cinta se disuelve en acetona, y el material es sedimentado sobre una oblea de silicio. En 2005, los investigadores simplificaron la técnica usando el método de deposición en seco evitando las etapas en las que el grafeno quedase suspendido en líquido [37].

Posterior a ello, técnicas de distinta naturaleza, química, físico-química, mecánica, eléctrica o catalítica, comenzaron a desarrollarse con éxito para la obtención de hojas de grafeno [4, 30].

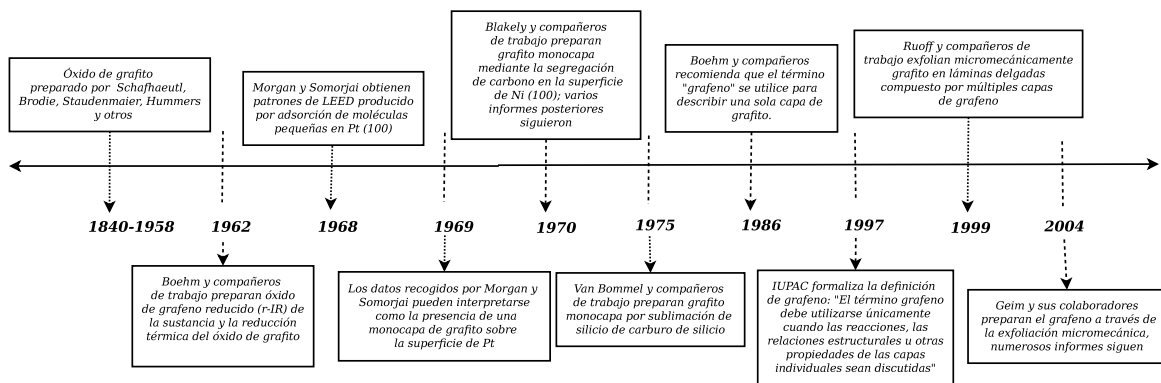


Figura 2.6: Línea de tiempo del grafeno.

realmente son estructuras 3D al ser estructuras con diámetros distintos a una capa atómica.

## 2.3 Tratamiento del grafeno

El grafeno es un arreglo hexagonal planar (monocapa) de átomos de carbono que componen las capas constitutivas del grafito formado por una red hexagonal (dos redes triangulares opuestas) [10, 11, 21, 27], cuyos átomos presentan hibridización  $sp^2$  [10, 21]. Sin embargo, es posible extender esta definición al caso de grafeno bicapa, ambos con un espectro electrónico simple presentando un gap cero de semiconductor con un tipo de electrones y un tipo de huecos. La estructura electrónica evoluciona rápidamente acercándose al límite de cristal 3D en 10 capas [4, 10]. La cantidad de portadores carga incrementa con las capas, y las bandas de conducción y valencia comienzan a solaparse notablemente. Esto conduce a distinguir incluso entre 3 tipos de redes cristalinas bidimensionales de grafeno, monocapa, bicapa y pocas capas (3 a 10 capas) [10].

En un modelo de primeros vecinos, el grafeno es un semiconductor con separación de banda nula entre los electrones de valencia y los electrones de conducción, y el comportamiento de su estructura de bandas en cercanía de los puntos  $K$  en las esquinas de la primera zona de Brillouin es lineal [15, 27, 28, 36]. El grafeno contiene dos átomos por celda unitaria que resulta en dos puntos cónicos (puntos  $K$ ) por zona de Brillouin [38].

Antes de su descubrimiento, el grafeno era intensamente estudiado a nivel teórico como un camino previo al análisis de las propiedades de los nanotubos de carbono y de los fullerenos, y hoy día podría considerarse el material más estudiado teóricamente [4, 36].

A través de la detección del efecto Hall cuántico anómalo se confirma la presencia de partículas/fermiones de Dirac en su espectro electrónico. Dado que en estos sistemas la densidad de estados se desvanece sobre los puntos de Dirac, este semimetal se desvía considerablemente de la teoría de Landau de líquidos de Fermi, siendo muy similar a modelos de física de partículas, en particular electrodinámica cuántica relativista [23].

Dado su comportamiento, la ecuación de Schrödinger no muestra de manera natural el comportamiento de las cargas en el grafeno, sin embargo no implica su imposibilidad de uso para el estudio de ciertas propiedades [28, 39–41], y se observa que el comportamiento de estos es mejor descrito por la ecuación de Dirac reflejando naturalmente el carácter lineal de su relación de dispersión a bajas energías (límite hasta  $1\text{eV}$ ) [40, 42]. Su relación lineal alrededor de los puntos  $K$  conduce a un tratamiento equivalente de fermiones de Dirac sin masa [38, 42].

## 2.4 Potenciales aplicaciones

Este material exhibe propiedades electrónicas *exóticas* [12, 13] y aspira a propiciar un cambio importante en la electrónica y sus aplicaciones [14–16], lo anterior unido a sus extraordinarias propiedades mecánicas [17, 18] nos permiten pensar en este como el material del futuro [19, 20].

Es un material que sirve como escenario para el estudio teórico y experimental de algunos aspectos de la teoría cuántica de campos y de la mecánica cuántica relativista [20, 21] dada la presencia de efectos cuánticos como el efecto Hall cuántico y efectos de confinamiento relativistas como el efecto Zitterbewegung y el tunelamiento de Klein [14, 22, 23].

En años recientes, hay un creciente interés por la realización de simulaciones de los efectos cuánticos relativistas en sistemas físicos controlables, teniendo como ejemplo el efecto Unruh en las trampas de iones, el efecto Zitterbewegung para fermiones masivos en estado sólido, propiedades de condensados de Bose-Einstein y estados de excitación de electrones en sistemas 2D como el grafeno citeLamata2007, Gerritsma2010 donde los parámetros de tunelabilidad permiten acceder a distintos regímenes físicos [5].

Debido a las restricciones experimentales, usualmente las muestras de grafeno corresponden a escalas mesoscópicas que conducen a una situación en la que los fermiones de Dirac son confinados tanto por las estructuras de borde tipo zigzag como por las estructuras brazo de silla. Este confinamiento es particularmente importante para la producción de guías de ondas para electrones que son el elemento principal para la producción de dispositivos electrónicos como los transistores de carbono (*all-carbon transistors*) [16, 23].

Los transistores basados en grafeno serían más rápidos y pequeños, consumiendo menos energía y disipando más rápidamente el calor que el silicio. Potenciaría nuevas tecnologías en celdas solares y dispositivos de cristal líquido. Los sensores químicos basados en grafeno pueden ser aplicados para la detección de moléculas gaseosas, tales como amoníaco y dióxido de nitrógeno. La alta relación de superficie-masa permitiría la fabricación de nuevos ultracapacitores y baterías [2].

# Capítulo 3

## Confinamiento cuántico

Por confinamiento se entiende la acción que producen los potenciales de la estructura y/o externos a los cuales se encuentran sometidos los electrones en su dinámica, restringiendo estos a una determinada zona en el espacio directo o en el dual.

La ecuación de Dirac como una versión relativista de la ecuación de Schrödinger para fermiones (incorporando el grado de libertad de espín de manera *ab initio*), describe de manera precisa el espectro del átomo de hidrógeno y posee gran importancia en la teoría de campos cuánticos, en donde los operadores de creación y aniquilación son permitidos. Sin embargo, la solución de la ecuación de Dirac para un solo fermión predice dos extraños efectos, la paradoja de Klein y el efecto Zitterbewegung [24].

Estos efectos de confinamiento corresponden a casos en los cuales los fermiones de Dirac son confinados a regiones finitas [23]. Dado que estos efectos de confinamiento relacionan la interacción con antipartículas de los fermiones, estos efectos de confinamiento no se presentan para casos de bosones [43]. El motivo por el cual a esta escala espacial se observan comportamientos cuánticos es porque la zona de confinamiento es del orden de la longitud de Compton del electrón,

$$\frac{h}{m_e c} = 0.024 \text{Å}.$$

### 3.1 Fermiones de Dirac

Los fermiones de Dirac son fermiones que no son sus propias antipartículas y que responden a la descripción de la ecuación de Dirac, distinguiéndose de los fermiones de



Majorana (fermiones que son sus propias antipartículas y responden a la descripción de la ecuación de este nombre); los fermiones de Dirac en este caso corresponden a estados de excitación del grafeno a bajas energías alrededor de los puntos de Dirac (de ahí su nombre), en donde su energía es linealmente dependiente de  $\mathbf{k}$  y su masa efectiva es nula.

$$m^* = \hbar^2 \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} \right)^{-1}. \quad (3.1)$$

La masa efectiva se obtiene a partir de la relación de dispersión según la ecuación 3.1. La masa efectiva es un escalar para los fermiones ubicados cerca de un mínimo de energía, en este caso en los alrededores de los puntos de Dirac [44, 45].

## 3.2 Efecto Zitterbewegung

El efecto *Zitterbewegung* fue observado por primera vez por Schrödinger al analizar los resultados de partícula libre para electrones de la ecuación de Dirac. Fue el mismo Schrödinger quien acuñaría el término de *Zitterbewegung* [46].

El efecto *Zitterbewegung* corresponde a un movimiento de oscilación alrededor de una trayectoria en línea recta del movimiento del electrón, al observar la evolución de un paquete de onda en el tiempo [5, 24, 46, 47].

Este resultado corresponde al valor esperado del operador  $\alpha$  (matriz de Dirac) que da cuenta del operador velocidad a través del teorema de Ehrenfest [46, 47] de la forma que sigue:

$$\hat{\alpha}(t) = \left( \hat{\alpha}(0) - \frac{c\hat{\mathbf{p}}}{\hat{H}_f} \right) \exp \left( \frac{-2i\hat{H}_f t}{\hbar} \right).$$

Esta oscilación en el operador de velocidad a pesar de la ausencia de perturbaciones externas lleva a una ruptura con el caso clásico de causalidad ante la presencia de una variación de la velocidad sin causa aparente [47]. Este efecto es interpretado como la interacción entre los fermiones y sus respectivas antipartículas<sup>1</sup> [5, 24, 46–48]. Sin embargo, estas interpretaciones son discutidas, y en particularmente en las estructuras periódicas se considera como un efecto de la conservación de la energía [49].

---

<sup>1</sup>La ecuación de Dirac conduce a soluciones de energía positiva y negativa a la vez, cuya interpretación corresponde a la existencia de las partículas y antipartículas.

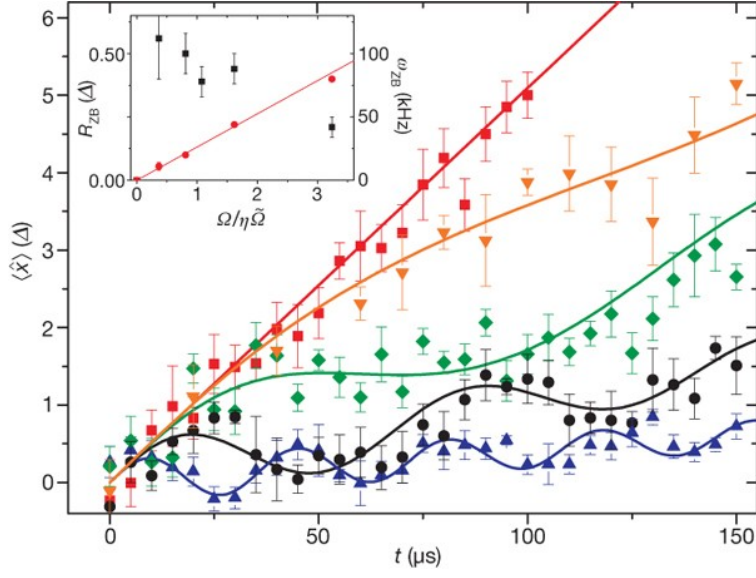


Figura 3.1: Ilustración del efecto Zitterbewegung para distintas masas [5].

Si bien en el vacío su observación y definición experimental y en simulación es compleja debido al orden de magnitud de la frecuencia de oscilación ( $\hbar\omega_z \approx 1\text{MeV}$ ), al estudiar el fenómeno los medios semiconductores nanoestructurados se vuelven un escenario ideal para mejorar las condiciones de los parámetros característicos del fenómeno [25, 50].

El grafeno, se ha presentado como una estructura ideal para acercarse al estudio de los efectos cuánticos-relativistas desde la experimentación y simulación a escalas menos exigentes en términos de resolución de la medida [21]. Una de las implicaciones de este efecto en el grafeno es la presencia de un mínimo finito de conductividad definido por  $e^2/h$  [21]. Efectos de segunda cuantización pueden hacerse necesarios para considerar efectos más finos ante la presencia de confinamientos por campos magnéticos externos [25, 50].

El grafeno, como estructura periódica, podría notar el efecto Zitterbewegung como un efecto de conservación de energía tal como lo propone Zawadzki para sólidos cristalinos [50], siendo así un fenómeno común de la propagación de paquetes de onda en el medio, y que no requiere la presencia de un campo externo para su aparición.

### 3.3 Paradoja de Klein

La paradoja de Klein hace referencia a un efecto relativista poco intuitivo en el fenómeno de tunelamiento a través de barreras de potencial. Este corresponde a que fermiones con energías superadas incluso en un factor de dos por la barrera de potencial, pueden pasar a través de esta con probabilidad 1 [21, 47, 48, 51]. Así, la probabilidad de tunelamiento depende muy poco de la altura de la barrera, siendo esta casi transparente a medida que se acerca a  $m_0c^2$ , contrario al decaimiento clásico de la probabilidad con el aumento de la altura de la barrera de potencial [40].

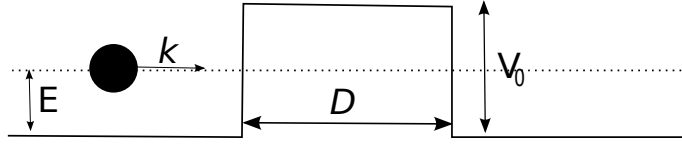


Figura 3.2: Esquema del fenómeno de tunelamiento. Barrera de alto  $V_0$  y ancho  $D$ . Se acerca un fermión de Dirac de momento  $k$  y energía  $E$  [6].

Debido a la presencia de los efectos relativistas en el grafeno, este material presenta interés para el estudio del paradoja de Klein y de sus consecuencias [20, 52].

Distintos tipos de potenciales son analizados para observar características particulares de confinamiento para posibles aplicaciones, dadas las implicaciones que posee el efecto de tunelamiento en el grafeno para el transporte de electrones [20, 38, 52].

La alineación de estados de positrones al interior de la barrera de potencial es lo que posibilita la probabilidad de transmisión del electrón a través de la barrera [6, 21, 38], ya que mientras que los estados electrónicos resultan repulsivos a barreras de mayor energía, esta resulta atractiva para estados positrónicos [6, 21, 40].

Este elemento resulta importante debido a que los fermiones en el grafeno son insensibles a la aplicación de potenciales electrostáticos (no sufren efectos de localización de los electrones clásicos) y pueden viajar sin dispersión largas distancias en grafeno del orden de micrometros [52]. Así, los fermiones de Dirac resultan no ser confinados por potenciales electrostáticos pero pueden ser confinados mediante la aplicación de campos magnéticos [52].

Dado que los fermiones de Dirac en el grafeno no tiene masa no existe un requerimiento teórico de campo eléctrico mínimo para formar estados positrónicos bajo la barrera.

Para crear barreras bien definidas realistas en grafeno con desorden, campos electrostáticos de  $\epsilon = 10^5 Vcm^{-1}$  son comúnmente usados en experimentos [6].

La variación de la probabilidad de tunelamiento no solo es función de la altura de la barrera de potencial y de la energía del fermión, sino también del ángulo de incidencia de este frente a la barrera, como se ilustra en la figura 3.3.

Una importante consecuencia asociada a la paradoja de Klein presente en el grafeno, es la existencia de un mínimo de conductividad aun en ausencia de portadores de cargas.

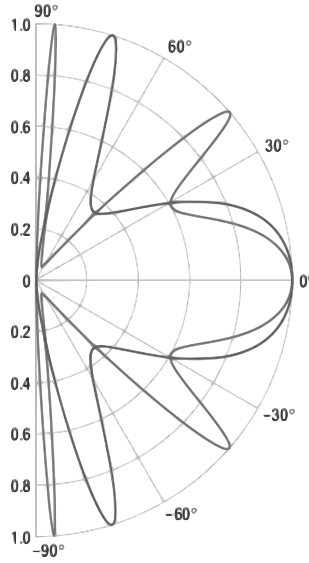


Figura 3.3: Probabilidad de transmisión para una barrera de ancho de 100nm para el grafeno monocapa en función del ángulo de incidencia. La energía de Fermi del electrón incidente es 80meV,  $\lambda = 50nm$ , y barrera de potencial  $V_0$  de 200 y 285 meV (curva roja y azul respectivamente) [6].

### 3.4 Efecto Hall cuántico

El efecto Hall cuántico es uno de los fenómenos más peculiares en sistemas electrónicos bidimensionales. La cuantización de la conductancia Hall  $\sigma_{xy}$  ha sido ampliamente aceptada como una cantidad topológica. Cuando un potencial químico es localizado con un gap de energía, se tiene

$$\sigma_{xy} = \frac{-e^2}{h} c_f, \tag{3.2}$$

donde  $c_f$  es un entero topológico definido para estados ocupados. En el grafeno, debido a la presencia de fermiones de Dirac sin masa, se presenta el efecto Hall cuántico anómalo en el que la discretización de la conductancia Hall [53] es dada como

$$\sigma_{xy} = \frac{2N + 1}{2} \frac{e^2}{h}.$$

En presencia de un campo constante  $\mathbf{B}$  perpendicular al plano del sistema, el espectro de energía es discreto (discretización de Landau). Para el caso de fermiones de Dirac sin masa, el espectro viene dado por

$$E_{\nu\sigma} = \sqrt{2|e|B\hbar v_F^2 \left( \nu + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)}, \quad (3.3)$$

donde  $\nu$  es el número cuántico,  $v_F$  es la velocidad del electrón (velocidad de Fermi) y el término  $\pm 1/2$  está relacionado con la quiralidad, en oposición al caso usual de dispersión parabólica relacionada con los niveles de Landau  $E = \hbar\omega_c(\nu \pm \frac{1}{2})$  donde  $\omega_c$  es la frecuencia de ciclotrón [21].

# Capítulo 4

## Modelos y métodos de simulación

El efecto *Zitterbewegung* es difícil observación tanto en el espacio vacío como en sólidos, sin embargo las condiciones presentes en los sólidos semiconductores son más favorables al considerar posibilidades de experimentación [50].

Al considerar el análisis, conviene tener en cuenta que seguir un electrón individual posee dificultades y sería más útil seguir un grupo de electrones en fase [50].

Debido a la magnitud de la amplitud de oscilación asociada al efecto *Zitterbewegung*, muchos de los esquemas de simulación usados para el análisis de este efecto consideran sistemas de trampas iónicas en interacción con luz láser o la modificación de los parámetros  $mc^2$  y  $c$  con el fin de aumentar la amplitud de oscilación [24, 50]. Las trampas iónicas igualmente sirven de escenario favorable para el análisis y simulación del tunelamiento de Klein [24].

### 4.1 Modelización

Como primera aproximación para la modelización de sistemas cuánticos es posible partir de la ecuación de Schrödinger (modelo no relativista) [54]. Una referencia clásica en el estudio teórico del grafeno es el trabajo de Wallace en 1947 que estudia las propiedades del grafito a partir del estudio de capas individuales de este sin consideraciones relativistas, concibiendo esto como una aproximación inicial y aclarando que una estructura

bidimensional de este tipo no sería posible [28].

$$E\psi(\vec{r}) = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + V_G(\vec{r}). \quad (4.1)$$

Al considerar la ecuación de Schrödinger en el grafeno, se hace necesario representar el potencial de la red triangular de forma explícita [40]. En la ecuación 4.1 se observan dos términos de potencial, que corresponden a la aplicación de un potencial externo  $V_{ext}$  y el potencial debido a los átomos de carbono que constituyen la red con sus respectivas nubes electrónicas  $V_G$ . Este último potencial es de naturaleza electrostática. El potencial asociado a la red del grafeno surge del potencial electrostático de los átomos según las dos redes triangulares presentes [41]

La presencia de dos tipos de portadores de cargas en el grafeno (electrones y huecos) hace necesario que al usar la ecuación de Schrödinger sean tratados en ecuaciones independientes, sin conexión alguna como una consecuencia de la regla de suma de Seitz (además de involucrar cada ecuación una masa efectiva diferente) [6].

Sin embargo, dado el comportamiento observado en el grafeno experimentalmente y consideraciones sobre la simetría presente por la presencia de las dos redes triangulares, la literatura enfatiza fuertemente en que la descripción del grafeno se realiza adecuadamente a través de la ecuación de Dirac [6, 55–57].

Al definir la masa efectiva es posible simplificar el hamiltoniano del sistema (ver ec.4.2) [6], validando la expresión alrededor de un punto de interés, en este caso los puntos de Dirac. La masa efectiva generalmente tiene interés en los mínimos de la relación de dispersión en los cuales la masa efectiva puede ser expresada como un escalar (independiente de la dirección de la relación de dispersión evaluada) según la expresión 3.1 [44, 45].

$$\hat{H}_0 = -i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla}. \quad (4.2)$$

La ecuación 4.2 es la ecuación de Dirac para fermiones sin masa. Alrededor de los puntos de Dirac, la masa efectiva de los electrones es nula. Esta aproximación es solo válida para bajas energías [40, 42, 55].  $\boldsymbol{\sigma}$  corresponde a las matrices de Pauli y  $v_F$  la velocidad de Fermi.

Sin embargo, a altas energías el perfil no lineal no se reproduce, y la masa efectiva de los electrones puede ser negativa. Para tener en cuenta estos efectos se hace necesario

tomar la forma completa del hamiltoniano de Dirac expresado en la ecuación 4.3 [40].

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)\psi, \quad (4.3)$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz,  $\boldsymbol{\alpha}$  el vector de matrices de Dirac,  $\mathbf{p}$  es el operador de momento y  $\beta$  es la matriz identidad.

La ecuación de Dirac (ec.4.2 y ec.4.3) a diferencia de la ecuación de Schrödinger incluye los efectos de spin  $\pm\frac{1}{2}$  que no eran naturales en esta última, y reflejan de manera general un sistema de 3+1 dimensiones (3 dimensiones espaciales y 1 dimension temporal) para una partícula libre [24].

Al incluir potenciales electromagnéticos, la ecuación de Dirac luce como se indica a continuación en ec.4.4

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (c\vec{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) + \beta mc^2 + e\phi(\mathbf{r}, t)) \psi, \quad (4.4)$$

donde  $\mathbf{A}$  es el potencial vector electromagnético y  $\phi$  el potencial electrostático.

Los nuevos términos incluidos en ec.4.4 permiten incluir las interacciones de los electrones con potenciales externos. Acá debe tenerse en cuenta que al usar la ecuación de Dirac sin consideraciones de masa efectiva de los electrones en grafeno, debemos partir de la construcción del potencial de la red de manera similar como se expone en ec.4.1 [40, 41]. Conocer este potencial electrostatico con el que contribuye la red del grafeno (sus átomos de carbono y la distribución electrónica sobre el plano de la misma, los electrones con hibridación  $sp^2$ ) constituiría resolver inicialmente la ecuación de Dirac (o en primera aproximación la de Schrödinger) para los electrones  $sp^2$ .

Dado el costo computacional de esta metodología, es posible utilizar una aproximación que parta de los resultados conocidos para los orbitales a partir de solucionar átomos individuales, conocida como aproximación de *tight binding* (amarre fuerte), como la usada por Wallace [28] y posteriormente ampliamente referenciada en la literatura para la obtención del hamiltoniano del grafeno y usada en los paquetes computacionales de cálculos de átomos, moléculas y cristales.

Para moléculas simples como el hidrógeno, la aproximación del potencial electrostático molecular puede ser incluido explícitamente sin requerir de la construcción del hamil-



toniano por un método adicional, tal como se expresa en la ecuación 4.5 [58],

$$\hat{H} = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \hat{\beta}mc^2 - \sum_{k=1}^K \frac{e^2 Z_k}{|\vec{r} - \vec{R}_k|}, \quad (4.5)$$

siendo  $Z_k$  el número atómico de los átomos (ya que el modelo es válido en general para átomos hidrogenoides) y  $R_k$  las posiciones de los núcleos.

### 4.1.1 Potencial electrostático

La densidad electrónica de una molécula o sistema molecular esta definida por ec.4.6 [59]

$$\rho(\vec{r}_1) = N \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) dr_2 \dots dr_N, \quad (4.6)$$

donde  $\psi$  es la función de onda y  $N$  es el número total de electrones. Una vez calculada la densidad electrónica del sistema, el potencial electrostático se obtiene aplicando la expresión 4.7 [59, 60]

$$V(\vec{r}) = \sum_i \frac{Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}|} - \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr'. \quad (4.7)$$

El primer termino de la ecuación 4.7 representa la contribución nuclear al potencial de cada uno de los átomos de carbono, y el segundo termino corresponde a la contribución de la densidad electrónica. Estos cálculos pueden ser realizados con distintos niveles de teoría como métodos de funciones de ondas puras o funcionales de densidad [59]. Dado que los electrones  $2p_z$  son aportados a la conducción, estos no se incluyen en la densidad electrónica ya que son el objeto de análisis bajo el potencial de la red.

La caracterización de superficies de potencial de estructuras tipo grafeno esta descrita por Peralta-Inga [60], estudiando las superficies para estructuras de distinto tamaño (entre 6 y 62 átomos de carbono).

### 4.1.2 Aproximación de amarre fuerte

El trabajo precursor del estudio teórico de grafeno de Wallace [28] hace uso de la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos para la construcción del hamiltoniano

del grafito monocapa<sup>1</sup>.

La aproximación a primeros vecinos puede ser suficiente para describir efectos relevantes del grafeno, pero aproximaciones de segundos vecinos también son reportadas en la literatura [27].

La aproximación de amarre fuerte es una aproximación al cálculo de estructuras de bandas usando un conjunto de funciones de onda base. La solución aproximada de la función de onda del sistema se expresa como la combinación lineal de las funciones bases de átomos aislados.

Cuando los átomos son puestos en un cristal, las funciones de onda de los orbitales presentan solapamiento con funciones de onda de átomos adyacentes. Sin embargo los términos de solapamiento se desprecian al considerar que los electrones tienen enlaces fuertes. Así, cualquier corrección al potencial atómico  $\Delta U$  se expresa como una adición a la suma de los hamiltonianos de átomos aislados (ver 4.8).

$$H(\vec{r}) = \sum_n H_{at}(\vec{r} - \vec{R}_n) + \Delta U(\vec{r}). \quad (4.8)$$

Luego, la solución aproximada a la función de onda de la ecuación de Schrödinger se puede expresar como la superposición lineal de las funciones onda base de la expresión 4.9

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{m,n} b_m(\vec{R}_n) \phi_m(\vec{r} - \vec{R}_n), \quad (4.9)$$

donde  $m$  es el  $m$ -ésimo nivel de energía atómico y  $n$  es el  $n$ -ésimo sitio atómico en la red cristalina [61].

Es conveniente, al asumir que en promedio los electrones se encuentran en enlace fuerte con los centros de la red, expandir la solución en estados de Wannier (ver ec.4.10) [62].

$$|\psi_{\vec{R}n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}}^{B.Z.} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}) |\psi_{\vec{k}n}\rangle, \quad |\psi_{\vec{k}n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) |\psi_{\vec{R}n}\rangle. \quad (4.10)$$

En la sección 6.3 se encontrara con detalle el desarrollo de amarre fuerte para el grafeno.

---

<sup>1</sup>Reconocemos que las capas de grafito son en realidad grafeno cuando estas se aíslan.

## 4.2 Simulación

### 4.2.1 Ondas planas

Las ondas planas son solución a la ecuación de Helmholtz homogénea que forman una base que representa campos en medios periódicos. Los campos (escalares o vectoriales) se puede expandir en términos de componentes de series de Fourier a lo largo de los vectores de la red recíproca. De manera similar, las propiedades del medio (periódicas a lo largo del vector de la red recíproca) también pueden expandirse en componentes de Fourier.

El método de ondas planas se usa para el cálculo de estructuras de bandas. El grado de precisión esta relacionado con el número de ondas planas tomadas. Para medios homogéneos, un pequeño conjunto de ondas planas (bajas frecuencias) puede representar bastante bien la solución. Sin embargo, ante la presencia de pequeñas irregularidades, presencia de microestructuras u otros tipos de inhomogeneidades, caracterizadas por altas frecuencias, el método no resulta adecuado.

### 4.2.2 Método espectral

La idea de los métodos espectrales es transformar el problema de su descripción original a una descripción que involucre la transformada de Fourier para la solución. La motivación de esto está en que en muchas situaciones la solución en el espacio transformado se obtiene más sencillamente que en el espacio directo. Luego, la solución original se evalúa aplicando la transformada inversa de Fourier a la solución encontrada en el espacio transformado [63].

La posible facilidad ofrecida al transformar la descripción, es la transformación de las derivadas de la coordenada del espacio original en multiplicaciones por la coordenada del espacio transformado [63].

Analizando las propiedades espectrales de la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se pueden obtener los autovalores y autovectores del sistema [64]. El análisis espectral de la ecuación de Dirac permite obtener la densidad de estados [65].

Para estructuras periódicas la solución numérica de la ecuación de Dirac y de esta

con acoplamiento de las ecuaciones de Maxwell se puede desarrollar mediante métodos espectrales usando la solución directa de ecuaciones de evolución no lineal sobre las cuales se aplica su transformada de Fourier [66].

### 4.2.3 Operador de separación

En los últimos años, este método se ha constituido en un método estándar de simulación de propagación de ondas y en un método de uso frecuente en solución de ecuaciones diferenciales no lineales [67].

Aplicado a los sistemas cuánticos, el uso del método requiere de una primera suposición para recurrir a la expansión de Trotter, que es el fundamento del método. Los operadores que actúan sobre los estados deben conmutar [68].

Los sistemas cuánticos en general se pueden formular como una ecuación tipo Schrödinger

$$\hat{H}\psi = i\frac{\partial}{\partial t}\psi. \quad (4.11)$$

En general, dado el estado del sistema en el tiempo inicial  $t_0$ , su descripción en el futuro es dada por

$$\psi(x, t) = \exp\left(-i\frac{(t - t_0)\hat{H}}{\hbar}\right)\psi(x, 0). \quad (4.12)$$

El operador hamiltoniano consiste de operadores  $\hat{T}$  y  $\hat{V}$ , que respectivamente son los operadores de energía cinética y energía potencial. El operador de energía cinética es un operador derivativo y el operador de energía potencial es un operador multiplicativo. En el espacio directo, el manejo del operador derivativo podría no ser tan sencillo, pero al aplicar la transformada de Fourier este sería un operador multiplicativo. Sin embargo, en el espacio transformado el operador multiplicativo del espacio directo podría no ser tan conveniente manipularlo [63].

Dado que los operadores no conmutan, no es posible la separación de la exponencial de la suma de operadores como el producto de la exponencial de cada operador, pero por ser la exponencial matricial, debe cumplir con la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff<sup>2</sup> [68]. Aquí se usará la expansión de Trotter para truncar y obtener una aproximación de este

---

<sup>2</sup>En la representación de Zassenhaus se describe como  $\exp(A + B) = \exp(A)\exp(B)\exp(-[A, B]/2)\dots$

resultado.

$$\exp(A + B) = \lim_{p \rightarrow \infty} \left( \exp\left(\frac{A}{2p}\right) \exp\left(\frac{B}{p}\right) \exp\left(\frac{A}{2p}\right) \right)^p. \quad (4.13)$$

Truncando la expansión 4.13 en  $p = 1$  obtenemos  $(\exp(\frac{A}{2}) \exp(B) \exp(\frac{A}{2}))$ , aproximación que puede obtenerse mediante el siguiente argumento, suponiendo la conmutación de los operadores.

Dado que los operadores conmuten (suposición realizada)

$$\exp(A + B) = \exp(A) \exp(B),$$

y aplicando la propiedad de potencia

$$\exp(A + B) = \exp(A/2) \exp(A/2) \exp(B).$$

Nuevamente dado que los operadores conmutan

$$\exp(A + B) = \exp(A/2) \exp(B) \exp(A/2).$$

La evaluación del operador multiplicativo es sencilla en el espacio directo. Una vez se evalúa, se aplica la transformada de Fourier en donde es evaluado con el operador derivativo (ahora multiplicativo), se aplica la transformada inversa, y nuevamente se multiplica por el elemento faltante del operador multiplicativo [63, 68].

$$\psi(x, t) = \exp\left(-i\Delta t \frac{\hat{V}}{2\hbar}\right) \mathcal{F}^{-1} \left\{ \exp\left(-i\Delta t \frac{\hat{T}}{\hbar}\right) \mathcal{F} \left\{ \exp\left(-i\Delta t \frac{\hat{V}}{2\hbar}\right) \psi(x, 0) \right\} \right\}. \quad (4.14)$$

#### 4.2.4 Elementos finitos

El método de elementos finitos, *FEM*<sup>3</sup>, corresponde a una formulación válida para la solución de ecuaciones diferenciales parciales de diversa índole y no solo correspondiente a problemas de naturaleza clásica. El formalismo matemático desarrollado en los esquemas FEM permite extender su aplicación como un método general de solución aplicables en distintos campos, entre ellos la mecánica cuántica [69].

---

<sup>3</sup>Finite Element Method

Su formulación se basa en el método de Rayleigh-Ritz [69, 70]. El dominio del problema está discretizado y se propone como solución una función interpolante por cada dominio, sobre la cual se reduce la exigencia de ser diferenciable dos veces a ser una vez diferenciable por tramos ( $C_2 \rightarrow C_0$ ) al obtener la formulación débil de las ecuaciones de segundo orden (podemos observar que la solución es una función continua una vez diferenciable por tramos).

Una vez se hace esto, se obtiene un sistema matricial que representa la formulación débil (formulación integral) de la ecuación diferencial.

Los principales trabajos de FEM aplicados a problemas atómicos y moleculares aparecieron en la década de 1970, para casos uno y dos dimensionales. En 1975, Askar calculó las energías del átomo de hidrógeno en el estado base y primer estado excitado. Luego Nordholm y Bacszy aplicaron FEM a problemas más generales de estados ligados. Fridman y Rosenfeld analizaron problemas modelo de la ecuación de Schrödinger con FEM en 1977. Todos estos trabajos mostraron que FEM era un método simple y eficiente para problemas moleculares y atómicos uno y dos dimensionales. El primer caso de FEM aplicado a un caso tridimensional fue por Levin y Shertzer, quienes calcularon los estados basales del helio en 1985 [71].

Soluciones numéricas a problemas vibracionales en hojas de grafeno y nanotubos de carbón por la técnica FEM se han reportado [72–74] y la solución de la ecuación de Schrödinger para propiedades electrónicas y estructuras de bandas [69, 70].

Si bien el método FEM es ampliamente usado para la solución de ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden, este método realmente consiste en una metodología general aplicable a otros sistemas. La ecuación de Dirac, ecuación de primer orden, se puede solucionar con alta precisión con la aplicación de FEM [58].

### 4.2.5 Monte Carlo

En términos generales el método Monte Carlo es una aproximación estadística al cálculo de integrales mediante el llamado de posiciones aleatorias, denominadas muestras, cuya selección de función de distribución es importante [75].

El método Monte Carlo es extremadamente general. Sus principios básicos nos permiten resolver cualquier problema de la física estadística (contexto físico) o en general aquellos problemas cuya naturaleza sea aleatorio [75], tomando adecuadamente la distribución

que describe el fenómeno [76].

En una simulación Monte Carlo atendemos a seguir la *dependencia temporal* de un modelo, para el cual el cambio o crecimiento no procede de un mecanismo riguroso predefinido (como las ecuaciones de movimiento de Newton) pero si de una manera estocástica que depende de una secuencia de números aleatorios generados durante la simulación [76].

El programa de cálculo y predicción de estructuras cristalinas USPEX esta basado en técnicas de dinámica molecular mediante Monte Carlo y métodos evolutivos para obtención de las estructuras más estables para una cierta configuración bajo condiciones de temperatura y presión específicas [77].

Una implementación en python del método Monte Carlo Cuántico para la ecuación de Schrödinger tratado como un problema de difusión con tiempo imaginario, Monte-Python, ofrece buenos resultados en simulación de los problemas clásicos de tunelamiento y con alta eficiencia gracias a opciones de paralelización [78].

Al incluir modelos fuertemente interactuantes en sistemas de redes hexagonales, varias aproximaciones no perturbativas se han incluido, entre ellas, Monte Carlo, para la simulación de campos cristalinos efectivos en el grafeno y hamiltonianos de amarre fuerte [79].

## 4.2.6 Funcionales de densidad

Distintas metodologías de simulación *ab initio* se han implementado en el estudio de propiedades de interacciones de grafeno, en particular siendo funcionales de densidad una de las mas usadas para estudios de oxidación de grafeno [80] y de propiedades de adsorción [81].

Quantum Espresso constituye una implementación opensource de un programa de simulación *ab initio* para estructuras cristalinas con funcionales de densidad y con conjuntos base de ondas planas que representan las soluciones de funciones de onda en cristales [82].

### 4.2.7 Quantum walkers

La técnica de caminadores cuánticos no solo se constituye en una técnica para la búsqueda de algoritmos rápidos en para simulación en computación cuántica sino que permite realizar un análisis de la ecuación de Dirac con caminadores cuánticos de tiempo discreto (DTQW) y obtener descripciones de los efectos de confinamiento [26].



# Capítulo 5

## Física computacional

Las simulaciones numéricas ahora son parte integral de la ciencia y la tecnología, y la computación ha llegado a ser un medio necesario para el estudio de la ciencia. Todas las actividades de intensa investigación desarrolladas en la década de 1950 alrededor de los primeros sistemas de computo electrónico como ENIAC y MANIAC, mostraron la indudable relevancia que tendrían estos sistemas como una herramienta de soporte activo a las investigaciones científicas [83].

La física computacional constituye una área madura de las ciencias computacionales<sup>1</sup> en la cual se unen íntegramente diversos elementos de la física, la matemática y las ciencias de la computación, en lo cual siendo el foco la solución de problemas físicos se requiere de la comprensión de las herramientas de computo y herramientas matemáticas (fig.5.1) [84].

La incorporación de la simulación al desarrollo de la ciencia lleva a un nuevo paradigma de solución de problemas en el que a partir de un problema de la ciencia se elabora un modelo que bien puede ser de carácter continuo o discreto. Se plantea un método de solución basado en técnicas simbólicas<sup>2</sup> o numéricas, y según el tipo de técnica seleccionado continuar con su implementación en lenguajes de programación o paquetes de

---

<sup>1</sup>Distinguir "Ciencias computacionales" (*Computational Science* o también en español "computación científica") de las "Ciencias de la computación" (*Computer Science*). La primera hace referencia al uso de las herramientas computacionales en la ciencia y la segunda trata de las bases teóricas de la información y las posibilidades de automatización eficiente.

<sup>2</sup>En este ámbito, la física computacional incluye igualmente el uso de paquetes de álgebra computacional que asistan los desarrollos simbólicos/analíticos de los problemas.

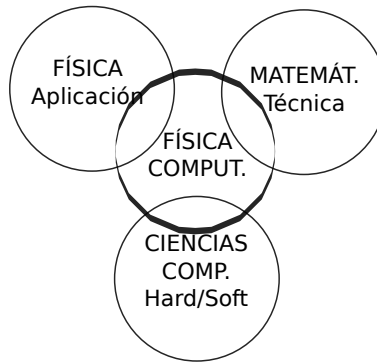


Figura 5.1: Representación de la naturaleza multidisciplinar de la física computacional como un solapamiento de la física, la matemática aplicada y las ciencias computacionales.

álgebra computacional. Las posibilidades dadas por la simulación numérica amplían el tipo de modelos abordables al facilitar su solución para escenarios particulares. Además del último punto incorporado frente al paradigma clásico de solución de problemas, se encuentra la asistencia de las herramientas para la visualización, lo cual contribuye a la comprensión y análisis de datos (ver figura 5.2) [84].

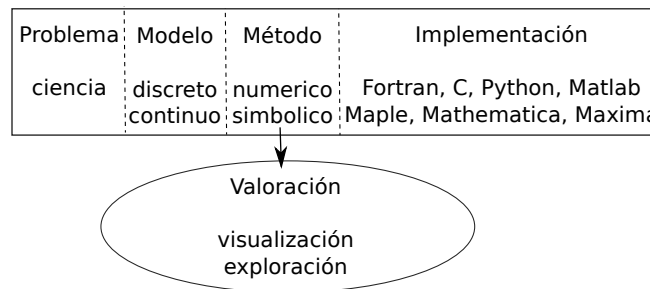


Figura 5.2: Nuevo paradigma del desarrollo de la ciencia.

## 5.1 Algoritmos computacionales

El uso de un equipo de cómputo para la solución de un problema específico requiere de la creación de un conjunto de instrucciones que indican el procedimiento a llevar a cabo con el fin de obtener el resultado deseado. Podemos afirmar que este problema

contiene dos pasos, el primero es transformar el problema en forma de ecuación o de un conjunto lógico de pasos que pueda ser seguidos por un computador, y el segundo es indicarle a este que debe ejecutarse [83].

Este conjunto de pasos lógicos y/o instrucciones (finitas) para la solución de un problema específico es conocido como algoritmo.

## 5.2 Lenguajes de programación

Los programas de computador son los medios a través de los cuales nos comunicamos con un computador. Estos programas o códigos se caracterizan por ser un conjunto de sentencias típicamente escritas en un lenguaje de programación bien definido. Los lenguajes de programación pueden dividirse en dos grandes categorías, bajo nivel y alto nivel.

Los lenguajes de bajo nivel son diseñados para trabajar con un hardware dado y su estructura sintáctica y semántica es bastante lejana de los lenguajes naturales. Los lenguajes de alto nivel no son dependientes del hardware al cual se destinara la aplicación y su estructura sintáctica resulta más cercana al lenguaje del usuario que al lenguaje de la maquina [83].

Según las necesidades específicas, puede o no ser conveniente un lenguaje de programación dado.

### 5.2.1 Breve comparación de lenguajes

La creciente necesidad de incluir el uso de los sistemas de computo para reducir los tiempos de ejecución de tareas de distinta índole, desde la contabilidad de un pequeño negocio hasta los cálculos de alto rendimiento para simulaciones de interacción de millones de partículas, y desde la automatización de sistemas físicos hasta el análisis de datos de grandes laboratorios, ha conducido a que el análisis de múltiples cualidades de lenguajes de programación y su comparación sea un tema frecuente en diversas publicaciones, con el fin de ayudar a realizar la selección de plataforma rápidamente en el transcurso de un proyecto.

Como marco inicial, tendremos como lenguajes de interes C++, ForTran, MatLab y Python.

C++ y ForTran son lenguajes compilados de alto nivel<sup>3</sup> incluidos por defecto en muchas distribuciones de linux y facilmente se puede obtener versiones instalables y portables para windows de manera libre (tanto compiladores como editores).

Dado que su sintaxis incluye elementos de bajo y medio nivel requiere un mayor tiempo de desarrollo para las aplicaciones pero sus tiempos de ejecución son bajos y ofrecen mayor flexibilidad en el manejo de tipos de datos (ideal para calculos críticos) [85,86]. Las estructuras requieren cierre y poseen un nivel de interoperatividad media.

MatLab posee un instalador pesado<sup>4</sup> y el espacio en disco requerido es ya superior a 6GB. MatLab es una plataforma comercial de MathWorks de muy alto costo<sup>5</sup> y los compiladores libres de lenguaje M no poseen compatibilidad completa debido a ligeras variaciones de la plataforma de MatLab frente a los estándares de codificación de caracteres<sup>6</sup>. Al igual que C++ y ForTran requiere terminación de estructuras pero su sintaxis es mas simple.

Dado que MatLab constituye un lenguaje basado en C++ y ForTran y para su ejecución requiere una etapa de precompilación, MatLab posee una eficiencia menor que C++ y ForTran. Posee baja interoperatividad [86].

Python esta incluido por defecto en muchas distribuciones linux y su instalación es bastante simple en windows usando la distribución EDP<sup>7</sup>. Las plataformas de desarrollo e interpretes son libres y su sintaxis es simple tipo MatLab, lo que facilita la migración [85,87]. Un listado de equivalencias entre MatLab y Python puede encontrarse en <http://mathesaurus.sourceforge.net/matlab-numpy.html>.

En python la indentación es obligatoria para indicar las sentencias pertenecientes a una estructura, lo cual disminuye el numero de líneas y favorece la legibilidad de código [85,87].

---

<sup>3</sup>Algunos autores suelen mencionar lenguajes de medio nivel, en los cuales ubican a C/C++ y ForTran para separarlos de lenguajes de mayor nivel de abstracción como Python, MatLab o Java.

<sup>4</sup>La versión 2011a del instalador de MatLab esta alrededor de 5.7GB para windows y 4.9GB para linux.

<sup>5</sup>La versión 2011b de la instalación básica de MatLab tiene un costo de 2650 dolares. Este valor no incluye ningún toolbox. El toolbox para compilación de código MatLab para la generación de ejecutables tiene un costo de 6250 dolares.

<sup>6</sup>Salvo por las aplicaciones que hagan uso de funciones de lectura y escritura en consola y archivos, se puede esperar un buen nivel de compatibilidad de los compiladores libres frente a las funciones de MatLab de versiones de 2 años atras.

<sup>7</sup>Enthought Python Distribution <http://www.enthought.com/products/epd.php>

El uso directo de Python con el paquete numpy para las manipulaciones matriciales y operaciones numéricas es algo más lento que MatLab, pero el uso de cualquier modulo adicional para optimizarle es mucho más rápido que MatLab como es ilustrado en la web de la referencia [88, 89]. Para aplicaciones críticas tenemos la posibilidad de embeber código C++ y ForTran reduciendo los tiempos de computo y facilitando el reciclaje de código. Tiene un alto nivel de interoperatividad [85, 90].

Enfocados en la reducción del tiempo de desarrollo y pensando en un mayor nivel de interoperatividad, se selecciona el lenguaje python para el desarrollo del presente trabajo de grado.

## 5.3 Python

Python es un lenguaje de muy alto nivel orientado a objetos dinámicos. Es un lenguaje interpretado y sacrifica en algo el rendimiento con el fin de optimizar el tiempo de desarrollo. Puede llamar a otros programas y puede ser embebido en otros programas, permitiendo el uso de este como lenguaje de scripting para estos programas [85].

Python fue liberado para dominio público en 1991 y actualmente se encuentra en la versión 3.2, sin embargo aun no hay compatibilidad entre muchas aplicaciones de la versión estable anterior y la actual, por lo que es recomendable aun el uso de la versión 2.7 para usuarios finales [90].

Actualmente es fuertemente promovido como un lenguaje para computación científica y en particular como un lenguaje para la física computacional [85–87, 91].

### 5.3.1 Numpy y Scipy

Numpy y Scipy son dos paquetes de uso frecuente en python para las aplicaciones de tipo científico en lo concerniente a la manipulación, operación, procesamiento y visualización de datos numéricos. Surgen como una necesidad de la comunidad científica bajo los aspectos mencionados [86].

Numpy cumple el papel equivalente a las funciones de manipulación matricial de MatLab, y Scipy (el cual es dependiente de Numpy) contiene diversos módulos de ciencias computacionales para diferentes aplicaciones como interpolación, integración, estadística, optimización, procesamiento de imagen, funciones especiales entre otras,

siendo un equivalente de los toolboxes de MatLab o de librerías de computación científica como la GSL [86].

### **5.3.2 Matplotlib**

Matplotlib probablemente constituye el paquete de python más usado para gráficos 2D. Provee una manera rápida de visualización de datos y permite la generación de figuras de calidad de publicación en múltiples formatos. PyLab ofrece una interface orientada a objetos para Matplotlib muy similar en sintaxis a las opciones gráficas de MatLab y permite extender las capacidades de este a gráficos 3D [86,92].

## **5.4 Paraview**

Paraview es una aplicación de visualización y análisis de datos multiplataforma y de código abierto. Es posible construir muy rápidamente visualizaciones para analizar datos por técnicas cualitativas y cuantitativas, y se puede hacer la exploración de datos interactivamente o programáticamente a través de las capacidades de procesamiento por lote de Paraview. Paraview admite python como lenguaje de scripting [93].

## Parte II

# Modelización y simulación

# Capítulo 6

## Hamiltoniano del grafeno

Una metodología comúnmente usada para construir el hamiltoniano de un sistema es la aproximación de amarre fuerte o *tight binding*. Los electrones en esta aproximación se asumen que interactúan, pero su interacción se considera débil para perturbar las funciones de onda a nivel atómico. Los electrones están fuertemente unidos a los átomos, pero no completamente [45].

Uno de los aspectos principales del método de amarre fuerte es la selección de las bases para la expansión de la solución. Las funciones seleccionadas deben cumplir con los requerimientos de las funciones de Bloch (ec.6.1) [45]

$$\Psi_k(r) = \sum_{i,j} u_{k,i}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j), \quad (6.1)$$

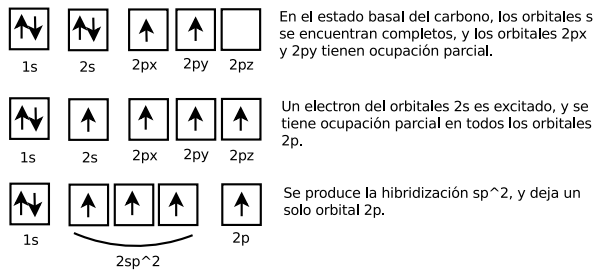
donde  $i$  son los orbitales atómicos,  $r_j$  son las posiciones de los núcleos iónicos y  $u_k(r)$  es una función periódica en el espacio recíproco.

### 6.1 Enlace químico del carbono

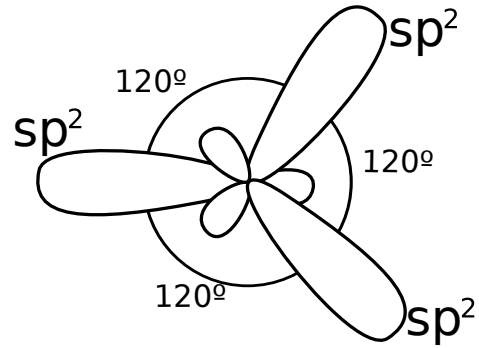
Un átomo de carbono tiene 6 electrones distribuidos en los orbitales atómicos  $1s^2 2s^2 2p^2$ . Los electrones del orbital  $1s$  del carbono no contribuyen al enlace químico. En el grafeno, los orbitales  $2s$ ,  $2p_x$  y  $2p_y$  hibridizan para formar 3 orbitales planares denominados  $sp^2$ , cada uno con un electrón. Estos orbitales  $sp^2$  originan los enlaces  $\sigma$  en los sólidos. Los orbitales  $sp^2$  se orientan a lo largo de tres líneas que forman ángulos de  $120^\circ$  entre ellos (ver figura 6.1b), lo cual es responsable de la estructura de red hexagonal del



grafeno [11].



(a) Estados ocupados en el carbono



(b) Orbitales  $sp^2$

Figura 6.1: Hibridización  $sp^2$  del grafeno.

El orbital  $2p_z$  remanente es perpendicular al plano formado por los átomos de carbono, y se combina con los mismo orbitales de diferentes átomos de carbono para formar enlaces  $\pi$ . Cada orbital  $2p_z$  contribuye con un electrón, habiendo así un electrón por sitio de red. Es este orbital el responsable del comportamiento inusual del grafeno [11].

## 6.2 Estructura cristalina

La red hexagonal es una de las 5 redes de Bravais existentes en 2 dimensiones. Esta, puede verse como la superposición de dos redes triangulares opuestas con ángulos de  $60^\circ$  (fig.6.2), las cuales corresponden a cada uno de los sitios  $A$  y  $B$  de la red ilustrados en la figura 6.3.

Interesa obtener los vectores de la red, que son las direcciones en las cuales desplazamientos en unidades enteras de estos permiten reproducir el patrón en todo el espacio, y en el espacio dual dan cuenta de la periodicidad de las funciones de onda para el electrón en el potencial. A partir de la figura 6.2 se tiene que los vectores de red son

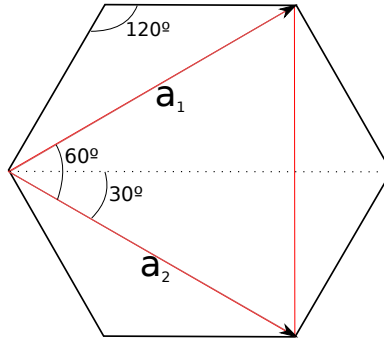


Figura 6.2: Determinación de los vectores de red del espacio directo.

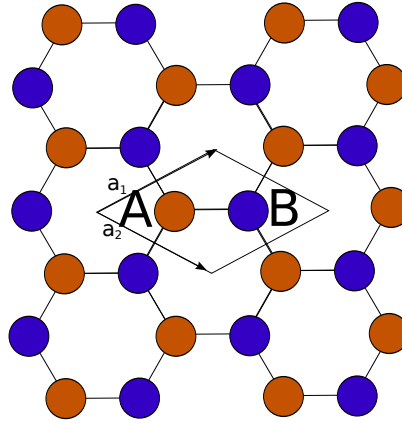


Figura 6.3: Estructura hexagonal de la red del grafeno. La celda unitaria esta conformada por dos átomos, que identifican los sitios de red A y B.  $a_1$  y  $a_2$  son los vectores de red en el espacio directo.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a}_1 &= a \left( \cos \left( \frac{\pi}{6} \right), \text{sen} \left( \frac{\pi}{6} \right) \right) \\
 &= a \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \\
 \mathbf{a}_2 &= a \left( \cos \left( \frac{\pi}{6} \right), -\text{sen} \left( \frac{\pi}{6} \right) \right) \\
 &= a \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right),
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

donde  $a = \|\mathbf{a}_1\| = \|\mathbf{a}_2\|$  es la distancia al primer vecino de la red.

A partir de las expresiones de los vectores de red del espacio directo (ec.6.2) y de la relación entre los vectores de red del espacio directo y recíproco dada por [44]

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned}\frac{\sqrt{3}}{2}b_{2x} + \frac{1}{2}b_{2y} &= 2\pi, \\ \frac{\sqrt{3}}{2}b_{2x} - \frac{1}{2}b_{2y} &= 0, \\ \frac{\sqrt{3}}{2}b_{1x} + \frac{1}{2}b_{1y} &= 0, \\ \frac{\sqrt{3}}{2}b_{1x} - \frac{1}{2}b_{1y} &= 2\pi,\end{aligned}$$

cuya solución indica los siguientes vectores de red en el espacio recíproco

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= \frac{1}{a} \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}}, -2\pi \right), \\ &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left( \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right), \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{1}{a} \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}}, 2\pi \right), \\ &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left( \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right).\end{aligned}\tag{6.3}$$

### 6.3 Aproximación de amarre fuerte

La aproximación de amarre fuerte para la construcción del hamiltoniano y el cálculo de la estructura de bandas lleva a un sistema de la forma 6.4 [94]

$$\sum_j (H_{ij}(k) - S_{ij}E) u_j = 0,\tag{6.4}$$

donde  $H$  es la matriz del hamiltoniano y  $S$  es la matriz de solapamiento de orbitales atómicos. Para la consideración de primeros vecinos esta última matriz es igual a la matriz identidad.

Siendo  $\psi$  y  $\phi$  las funciones de onda del electrón del orbital  $p_z$  asociadas a las respectivas subredes (en la figura 6.3 A y B) y  $t$  la constante de salto<sup>1</sup>, se obtiene como aproximación de amarre fuerte la expresión 6.5<sup>2</sup> [23]

$$\begin{aligned} -t\phi_{n+1,m-1} - t\phi_{n+1,m+1} - t\phi_{n,m} &= \psi_{n,m}E, \\ -t\psi_{n-1,m+1} - t\psi_{n-1,m-1} - t\psi_{n,m} &= \phi_{n,m}E. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Tal como se advirtió al principio del capítulo, las funciones deben cumplir con los requerimientos de funciones de Bloch (ec.6.1) que con los vectores de red del espacio recíproco (ec.6.3) se plantean las formas

$$\begin{aligned} \psi_{n,m} &= \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a n}{2} + \frac{ik_y a m}{2}\right) u(\mathbf{k}), \\ \phi_{n,m} &= \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a n}{2} + \frac{ik_y a m}{2}\right) v(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (6.6)$$

Reemplazando ec.6.6 en ec.6.5 y considerando la periodicidad de las funciones<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} -tv(k) \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a n}{2} + \frac{ik_y a m}{2}\right) &\left[ \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2} - \frac{ik_y a}{2}\right) + \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2} + \frac{ik_y a}{2}\right) + 1 \right] \\ &= u(k) \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a n}{2} + \frac{ik_y a m}{2}\right) E, \\ -tu(k) \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a n}{2} + \frac{ik_y a m}{2}\right) &\left[ \exp\left(-\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2} + \frac{ik_y a}{2}\right) + \exp\left(-\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2} - \frac{ik_y a}{2}\right) + 1 \right] \\ &= v(k) \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a n}{2} + \frac{ik_y a m}{2}\right) E, \end{aligned}$$

y eliminando términos comunes

---

<sup>1</sup>La constante de salto da cuenta de las transiciones de electrones de una subred a otra.

<sup>2</sup>Esta aproximación surge de consideraciones de segunda cuantización según la forma  $\sum_{ij\alpha} t_{ij} (a^\dagger_{i\alpha} b_{j\alpha} + a_{i\alpha} b^\dagger_{j\alpha})$  donde  $a^\dagger$  y  $b^\dagger$  son los operadores de creación de las dos subredes,  $\alpha$  el espín y  $t$  la energía de salto de primeros vecinos [23].

<sup>3</sup>Al provocar un desplazamiento en el espacio recíproco iguales a un vector de red las funciones toman el mismo valor que sin desplazar,  $u(k) = u(k + K)$  donde  $K = n_1 b_1 + n_2 b_2$ .

$$\begin{aligned}
-tv(k) \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \left[ \exp\left(-\frac{ik_y a}{2}\right) + \exp\left(\frac{ik_y a}{2}\right) + \exp\left(\frac{-i\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \right] &= u(k)E, \\
-tu(k) \exp\left(-\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \left[ \exp\left(\frac{ik_y a}{2}\right) + \exp\left(-\frac{ik_y a}{2}\right) + \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \right] &= v(k)E.
\end{aligned}$$

Ahora se convierten a trigonométricas los términos exponenciales. Comenzando por la primera ecuación del conjunto, y se reagrupan términos

$$\begin{aligned}
2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 2i \operatorname{sen}\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \operatorname{sen}^2\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) &= \\
&= 2 \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 1.
\end{aligned}$$

De igual manera para la segunda expresión se obtiene el conjugado de este.

Expresado de forma matricial se tiene

$$\begin{pmatrix} -E & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\mathbf{k}) \\ v(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.7)$$

con

$$f(\mathbf{k}) = -2t \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) - t. \quad (6.8)$$

Para asegurar una solución no trivial al sistema representado en la expresión 6.7, el determinante de la matriz debe ser igual a cero. Desarrollando el determinante y despejando para la energía  $E$

$$\begin{aligned}
E^2 &= 4t^2 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) + t^2 + 2t^2 \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \left( \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a}{2}\right) + \exp\left(\frac{-i\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \right) \\
&= 4t^2 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) + t^2 + 4t^2 \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \\
E &= \pm 2t \sqrt{\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \frac{1}{4} + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)}. \quad (6.9)
\end{aligned}$$

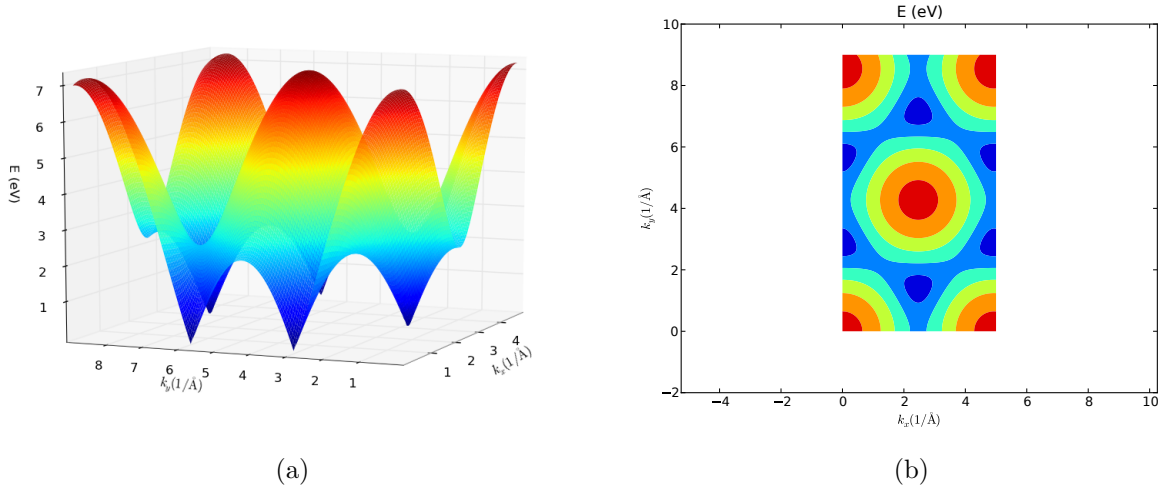


Figura 6.4: Relación de dispersión del grafeno a partir de la aproximación de amarre fuerte.

## 6.4 Hamiltoniano de Dirac

Se puede observar en la figura 6.4a que alrededor de ciertos puntos, en los cuales la energía es igual a cero, la relación de dispersión puede aproximarse a una relación lineal. Estos puntos son llamados puntos de Dirac.

A partir de la expresión 6.9 sabemos que las raíces corresponden a las raíces de la expresión al interior de la raíz ( $t$  es distinto de cero).

$$0 = \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \frac{1}{4} + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right). \quad (6.10)$$

Sustituyendo

$$Y = \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \text{ y } X = \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right),$$

$$\begin{aligned} 0 &= Y^2 + \frac{1}{4} + XY, \\ Y &= \frac{-X \pm \sqrt{X^2 - 1}}{2}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Lo cual genera dos curvas solución en el plano complejo. Dado que interesan las soluciones reales, se buscan las soluciones con  $X$  tal que el argumento de la raíz cuadrada

presente en ec.6.11 sea mayor que 0, y dada la sustitución,  $X$  es el rango de la función coseno imponiendo un intervalo adicional a cumplir

$$\begin{aligned} X &= ((-\infty, -1] \vee [1, \infty)) \wedge [-1, 1], \\ &= \{-1, 1\}, \\ Y &= \pm \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Ahora, se llevara la solución a las variables originales según la sustitución realizado para ec.6.10. Según la sustitución realizada tenemos

$$-1 = \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right).$$

Aplicando la inversa del coseno y despejando para la coordenada  $k$

$$\begin{aligned} \arccos(-1) &= \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \\ \pi(2n + 1)\frac{2}{\sqrt{3}a} &= k_x. \end{aligned}$$

De igual manera

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} &= \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right), \\ \arccos\left(\frac{1}{2}\right) &= \frac{k_y a}{2}, \\ \pi\left(2m + \frac{1}{3}\right)\frac{2}{a} &= k_y, \end{aligned}$$

y para el segundo par coordenado

$$\begin{aligned} 1 &= \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right), \\ \arccos(1) &= \frac{\sqrt{3}k_x a}{2}, \\ 2\pi n' \frac{2}{\sqrt{3}a} &= k_x, \\ \frac{-1}{2} &= \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right), \\ \arccos\left(\frac{1}{2}\right) &= \frac{k_y a}{2}, \\ \pi\left(2m' + \frac{2}{3}\right)\frac{2}{a} &= k_y. \end{aligned}$$

Así, las coordenadas del punto de Dirac del primer par coordenado, con  $n = 0$ ,  $m = 0$ , son

$$K = \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right). \quad (6.12)$$

Dado que las contribuciones de los puntos de Dirac pueden ser consideradas de manera independiente, solo se considerara el punto de Dirac de ec.6.12. Realizando la expansión en series de primer orden alrededor de este punto

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= f(\mathbf{K}) + \nabla f(\mathbf{k})|_{\mathbf{K}} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{K}), \\ &= 0 + \begin{pmatrix} -t\sqrt{3}a \exp(i\pi) \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) \\ at \exp(i\pi) \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k_x - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \\ k_y - \frac{2\pi}{3a} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Es conveniente para efectos posteriores definir un desplazamiento del sistema coordenado para ubicar el punto de Dirac en el origen de coordenadas,  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{K}$ , y la expresión 6.8 linealizada en las nuevas coordenadas es

$$f(\mathbf{k}') = \frac{\sqrt{3}at}{2}(k'_x - ik'_y). \quad (6.13)$$

Sustituyendo ec.6.13 en ec.6.7 obtenemos

$$\begin{pmatrix} -E & \frac{\sqrt{3}at}{2}(k'_x - ik'_y) \\ \frac{\sqrt{3}at}{2}(k'_x + ik'_y) & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\mathbf{k}') \\ v(\mathbf{k}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

de donde solucionando el determinante de la matriz se observa que la relación de dispersión es lineal (fig.6.5)

$$E = \pm \frac{\sqrt{3}at}{2} \sqrt{k'^2_x + k'^2_y}.$$

En la forma matricial 6.4, multiplicamos y dividimos por  $\hbar$  el lado izquierdo

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{3}at}{2\hbar} \begin{pmatrix} 0 & p'_x - ip'_y \\ p'_x + ip'_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\mathbf{k}') \\ v(\mathbf{k}') \end{pmatrix} &= E \begin{pmatrix} u(\mathbf{k}') \\ v(\mathbf{k}') \end{pmatrix} \\ v_F(\sigma'_x p'_x + \sigma'_y p'_y)\psi(\mathbf{k}') &= E\psi(\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (6.14)$$



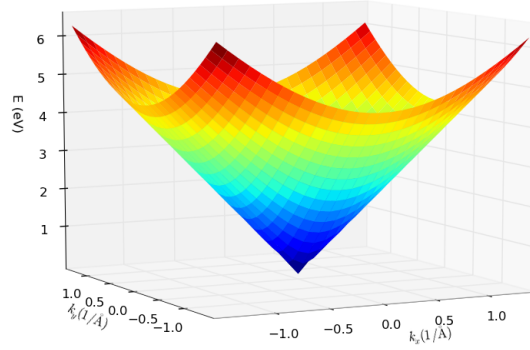


Figura 6.5: Relación lineal de dispersión alrededor del punto K.

donde  $\sigma'_i$  con  $i=x,y$  son las matrices de Pauli,  $p'_i$  con  $i=x,y$  el operador de momento y  $v_F$  la velocidad de Fermi, y los autoestados asociados a la forma de autovalores 6.14 son de la forma [40]

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm \exp(-i\phi) \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.15)$$

con  $\tan \phi = k_y/k_x$ . Acorde a la literatura, los valores para la energía de salto  $t$  y la distancia a primeros vecinos es  $2.7eV$  [23] y  $1.47\text{\AA}$  [27,41] respectivamente, convertidos a unidades del sistema internacional, y sustituyendo tenemos que el valor de la velocidad de Fermi es  $463557m/s$ .

La expresión 6.14 corresponde a la ecuación de Dirac para fermiones sin masa<sup>4</sup>. Esta descripción de los electrones en el grafeno lleva a la presencia de efectos como la paradoja de Klein y el efecto Zitterbewegung.

---

<sup>4</sup>En el grafeno, en el límite de bajas energías, los electrones poseen una masa efectiva nula.

# Capítulo 7

## Efectos de confinamiento en el grafeno

La acción de campos electromagnéticos sobre el grafeno produce una serie de efectos particulares de interés teórico y práctico. Entre estos efectos cabe señalar el efecto Hall fraccionario, el efecto Zitterbewegung y la paradoja de Klein. Esta última genera una característica electrónica particular del grafeno, y es la existencia de un mínimo distinto de cero para la conductancia.

Los campos eléctricos contribuyen con un potencial dado por  $V_{\mathbf{E}} = q\phi(\mathbf{r}, t)$  [67, 95]. La inclusión de los campos magnéticos se realiza usando el principio de acoplamiento mínimo [95] que involucra solo la distribución de carga en este y no los momentos de multipolos de la distribución de carga en contraste al acoplamiento de Pauli. Así, usando el principio de acoplamiento mínimo que resulta de redefinir el operador momento como  $\mathbf{p} - e\mathbf{A}$  [96].

Aplicando estas dos consideraciones en ec.6.14 obtenemos la forma de la ecuación 4.4 para  $m = 0$ .

$$(v_F(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) - v_F e \sigma \cdot \mathbf{A} + e\phi(\mathbf{r}, t)) \psi(\mathbf{k}) = E\psi(\mathbf{k}) \quad (7.1)$$

$$(v_F(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) - v_F e \sigma \cdot \mathbf{A} + e\phi(\mathbf{r}, t)) \psi(\mathbf{k}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{k}). \quad (7.2)$$

La ecuación 7.1 es independiente del tiempo, y la ecuación 7.2 es dependiente del tiempo y permite analizar la evolución de paquetes de onda en el tiempo.  $\mathbf{A}$  es el potencial magnético vector.

Las matrices de Pauli  $\sigma$  estan dadas por [47]

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

## 7.1 Efecto Zitterbewegung

Para efectos experimentales, una posibilidad de validación del efecto lo constituyen las oscilaciones de la corriente, tal como indico Katsnelson debidas al efecto Zitterbewegung [97].

El valor del operador de densidad de corriente en la representación de Heisenberg se construye como

$$\mathbf{j} = e\psi^\dagger \mathbf{v}\psi,$$

donde  $\mathbf{v}$  es el operador de velocidad.

En mecánica cuántica relativista, el teorema de Ehrenfest también es válido [47]. Así que se aplica para obtener el operador de velocidad. Por la definición del teorema de Ehrenfest tenemos que

$$\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = [\hat{x}, \hat{H}].$$

Multiplicando por una función de onda auxiliar para aplicar los operadores

$$\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} \psi = [\hat{x}, \hat{H}] \psi,$$

y expandiendo el conmutador

$$\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} \psi = v_F \hat{x} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \psi - v_F \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \hat{x} \psi$$

Aplicando los operadores

$$\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} \psi = -v_F \hat{x} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi - v_F \hat{\sigma} (\psi + \hat{x} \mathbf{p} \psi),$$

y simplificando

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} \psi &= -v_F \hat{\sigma} \psi, \\ \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} &= -v_F \hat{\sigma}. \end{aligned}$$

Usando este resultado para el operador de velocidad, la representación de Heisenberg del operador de corriente y la expresión 6.15, tenemos desarrollando

$$\begin{aligned}
\frac{-\mathbf{j}}{ev_F} &= \begin{pmatrix} \exp(i\psi) \exp(iEt/\hbar) & 1 \\ 1+i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(-i\psi) \exp(-iEt/\hbar) \\ 1 \end{pmatrix}, \\
&= \begin{pmatrix} \exp(i\psi) & 1 \\ \exp(-i\psi) \exp(-iEt/\hbar) + i \exp(-i\psi) \exp(-iEt/\hbar) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-i \\ \exp(-i\psi) \exp(-iEt/\hbar) + i \exp(-i\psi) \exp(-iEt/\hbar) \end{pmatrix}, \\
&= \exp(i\psi) \exp(iEt/\hbar) - i \exp(i\psi) \exp(iEt/\hbar) + \\
&\quad \exp(-i\psi) \exp(-iEt/\hbar) + i \exp(-i\psi) \exp(-iEt/\hbar), \\
\mathbf{j} &= -2ev_F(\cos(\phi + Et/\hbar) + \text{sen}(\phi + Et/\hbar)). \tag{7.3}
\end{aligned}$$

De la expresión 7.3 para el operador de densidad de corriente, se observa la oscilación correspondiente al efecto Zitterbewegung.

## 7.2 Paradoja de Klein

Dado un campo eléctrico que impone una barrera de potencial de la forma

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq D \\ 0, & x \leq 0 \vee D \leq x \end{cases}.$$

Siendo las soluciones [6] de los espinores  $\psi_1$  y  $\psi_2$

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \begin{cases} (\exp(ik_x x) + r \exp(-ik_x x)) \exp(ik_y y), & x \leq 0 \\ (a \exp(iq_x x) + \exp(-iq_x x)) \exp(ik_y y), & 0 \leq x \leq D \\ t \exp(ik_x x + ik_y y), & D \leq x \end{cases} \\
\psi_2 &= \begin{cases} s (\exp(ik_x x + i\phi) + r \exp(-ik_x x - i\phi)) \exp(ik_y y), & x \leq 0 \\ s' (a \exp(iq_x x + i\theta) + \exp(-iq_x x - i\theta)) \exp(ik_y y), & 0 \leq x \leq D, \\ st \exp(ik_x x + ik_y y + i\phi), & D \leq x \end{cases}
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
q_x &= \sqrt{\frac{(E - V_0)^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2}, \\
s &= \text{sgn}(E), \\
s' &= \text{sgn}(E - V_0), \\
\theta &= \arctan\left(\frac{k_y}{q_x}\right),
\end{aligned}$$

siendo  $\theta$  el ángulo de refracción (la indicación de las variables puede verse en la figura 7.1). Usando las condiciones de continuidad de la función de onda se pueden hallar los valores de  $a$ ,  $b$ ,  $t$  y  $r$ .

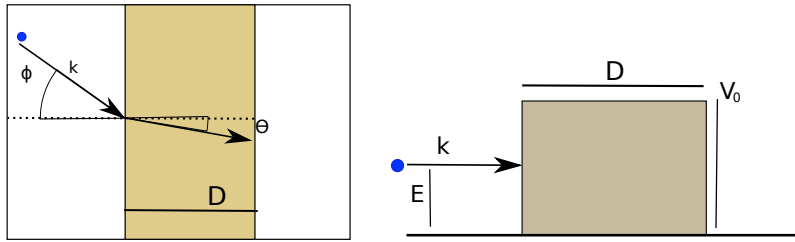


Figura 7.1: Esquema del fenómeno de tunelamiento.

Para el coeficiente de reflexión  $r$  se tiene

$$r = 2i \exp(i\phi) \text{sen}(q_x D) \frac{\text{sen}(\phi) - s s' \text{sen}(\theta)}{s s' [\exp(-iq_x D) \cos(\phi + \theta) + \exp(iq_x D) \cos(\phi - \theta)] - 2i \text{sen}(q_x D)}.$$

Asumiendo  $|V_0| \gg |E|$  el ángulo de refracción  $\theta$  tiende a cero ya que  $q_x$  se hace mucho mayor que  $k_y$ , y  $s' = -1$  debido a la misma suposición. Luego

$$\begin{aligned}
r &= \frac{2i \exp(i\phi) \text{sen}(q_x D) \text{sen}(\phi)}{-2 \cos(\phi) \cos(q_x D) - 2i \text{sen}(q_x D)}, \\
r^* r &= \frac{\text{sen}^2(q_x D) \text{sen}^2(\phi)}{\cos^2(\phi) \cos^2(q_x D) + \text{sen}^2(q_x D)},
\end{aligned}$$

y definimos la probabilidad de transmisión como  $T = t^*t = 1 - r^*r$

$$\begin{aligned}
T &= \frac{\cos^2(\phi) \cos^2(q_x D) + \sin^2(q_x D) - \sin^2(q_x D) \sin^2(\phi)}{\cos^2(\phi) \cos^2(q_x D) + \sin^2(q_x D)}, \\
&= \frac{\cos^2(\phi) \cos^2(q_x D) + \sin^2(q_x D)(1 - \sin^2(\phi))}{\cos^2(\phi) \cos^2(q_x D) + 1 - \cos^2(q_x D)}, \\
&= \frac{\cos^2(\phi) \cos^2(q_x D) + \sin^2(q_x D) \cos^2(\phi)}{1 + \cos^2(q_x D)(\cos^2(\phi) - 1)}, \\
&= \frac{\cos^2(\phi)(\cos^2(q_x D) + \sin^2(q_x D))}{1 - \sin^2(\phi) \cos^2(q_x D)}, \\
&= \frac{\cos^2(\phi)}{1 - \sin^2(\phi) \cos^2(q_x D)}. \tag{7.4}
\end{aligned}$$

En la expresión 7.4 se observan dos características de interés. Bajo condiciones de resonancia  $q_x D = \pi N$  con  $N$  entero la barrera es invisible al igual que para incidencia normal ( $\theta = 0 \vee \theta = \pi$ ) la probabilidad de transmisión siempre sera  $T = 1$ . También se puede observar que para  $q_x D = \pi(N + 1/2)$  la probabilidad de transmisión también es independiente de la barrera de potencial y solo depende del ángulo de incidencia  $T = \cos(\phi)$ .

Las dos condiciones de transmisión total corresponden al motivo paradójico que enuncia el nombre, ya que la intuición indicaría que la transmisión debería depender de las características de la barrera de potencial [21,47,48,51], que como se indico en la sección 3.3 se debe a la alineación de estados positrónicos al interior de la barrera ya que si bien los potenciales altos son repulsivos para los electrones, estos son atractivos para los positrones.

### 7.2.1 Conductancia mínima

Si un cable se conecta a la izquierda a un reservorio con niveles ocupados hasta  $E_F$  y a la derecha a un reservorio con niveles ocupados hasta  $E_F + eV$ , donde  $V$  es un potencial electrostático, fluirá una corriente  $I$  (fig.7.2).

Para un cable ideal, un electrón en un estado  $k$  contribuye con una corriente de  $I = env_k$  donde  $n = 1/L$  es la densidad lineal y  $v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_k}{\partial k}$  es la velocidad del electrón.

Teniendo en cuenta la degeneración del espín,  $g = 2$ , la corriente total de izquierda a derecha es

$$I_{L \rightarrow R} = \frac{2e}{L} \sum_k v_k = \frac{e}{\pi} \int_0^{k_F} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_k}{\partial k} dk = \frac{2e}{h} \int_0^{E_F} dE.$$

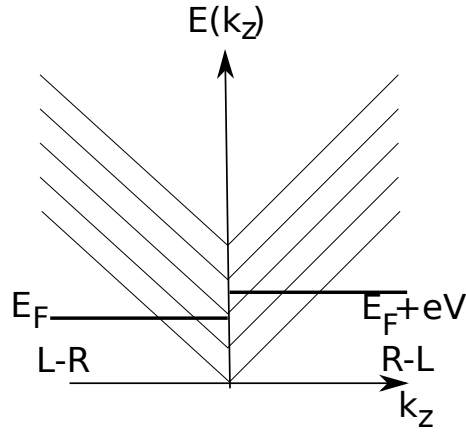


Figura 7.2: Esquema ilustrativo del flujo de corriente en un cable con diferencia de niveles ocupados en los extremos conectados.

Similarmente, la corriente total de derecha a izquierda sera

$$I_{R \rightarrow L} = \frac{2e}{h} \int_0^{E_F + eV} dE,$$

y por ende la corriente total neta es

$$I = \frac{2e^2}{h} V.$$

La conductancia, en este caso vendrá dada

$$\begin{aligned} G &= \frac{I}{V}, \text{ inverso de la resistencia,} \\ &= V \frac{2e^2}{h} \frac{1}{V}, \text{ sustitución de la corriente,} \\ &= \frac{2e^2}{h}. \end{aligned}$$

Aplicando el formalismo de Büttiker-Landauer, se agrega un factor a la conductancia que dá cuenta de los modos de transmisión [98]

$$\begin{aligned} G &= \frac{2e^2}{h} \sum_m T_m, \\ G &= \frac{2e^2}{h} MT. \end{aligned} \tag{7.5}$$

La expresión 7.5 da cuenta de la cuantización de la conductancia. Si consideramos el caso del grafeno, con incidencia normal o condiciones resonantes, la probabilidad de

transmisión es 1, y con un solo modo de transmisión  $M = 1$ , tenemos

$$G = \frac{2e^2}{h\bar{a}r},$$

que es la conductancia mínima en el grafeno.



# Capítulo 8

## Simulación

El presente trabajo de grado se centra en la implementación del método de operador de separación con transformada rápida de Fourier<sup>1</sup> para la ecuación de Dirac bidimensional dependiente del tiempo para fermiones sin masa con aplicación de campos externos. Sin embargo, esta técnica no es restrictiva solo para estas condiciones [67], pero para los objetivos del trabajo propuesto solo se hará el abordaje específico de estas.

### 8.1 Método de operador de separación con FFT

El esquema de operador de separación ha sido aplicado en distintos cálculos/simulaciones de paquetes de onda en aproximaciones no relativistas tipo Schrödinger en física atómica y molecular, propagación de paquetes de onda no relativistas en potenciales externos, e interacción electrón - láser bajo aproximaciones de Schrödinger y Dirac [67]. El método se ha convertido en un referente y un estándar para el estudio de la dinámica de paquetes de ondas [68].

Como se indico en la subsección 4.2.3 el método consiste en proponer como solución general en un tiempo futuro de un estado inicial del sistema como el resultado de la aplicación de un operador de evolución unitario. Sobre el operador de evolución se aplica una separación dada a partir de la expansión de Trotter (hasta aquí, es propiamente el

---

<sup>1</sup>*FFT-Split operator.*

operador de separación [63]). Así, de las expresiones 4.11 y 4.12 [67, 68, 95].

$$\hat{U}(\Delta t) = \exp\left(-\frac{i\Delta t\hat{H}}{\hbar}\right) \approx \exp\left(-\frac{i\Delta t\hat{V}}{2\hbar}\right) \exp\left(-\frac{i\Delta t\hat{T}}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{i\Delta t\hat{V}}{2\hbar}\right), \quad (8.1)$$

donde  $\hat{T}$  es el operador de energía cinética,  $\hat{V}$  el operador de energía potencial,  $\hat{U}$  es el operador de evolución y  $\Delta t$  el intervalo de tiempo entre cada paso temporal.

La separación simétrica asegura que el error sea del orden  $\Delta t^3$ . El error esta asociado a que no se consideran los aportes de los conmutadores de los dos operadores, lo cual se observa del teorema de Baker-Hausdorff, y por ende el error puede ser estimado a partir de los conmutadores [68]. Teóricamente el método es exacto si los operadores de energía cinética y potencial conmutan.

La solución 4.12 con el operador de evolución propuesto es estrictamente válida si no hay dependencia explicita de los potenciales con respecto al tiempo, sin embargo se puede usar un paso temporal muy pequeño para despreciar los efectos (cumpliendo con una frecuencia de muestreo temporal mayor a la frecuencia característica de la variación del potencial externo) [67].

Otro aspecto adicional en la selección del paso temporal es la frecuencia de oscilación asociada a la energía de la partícula incluyendo su energía en reposo

$$\left(\frac{E + m_0c^2}{\hbar}\right)$$

[67, 95] y la relación entre la velocidad asociada al fenómeno y el tamaño de partición espacial  $vdt = dx$  [95].

El paquete de onda inicial, no debe ser gaussiano, sino cualquier otra descripción [67].

Posterior a la separación, el operador de potencial se aplicará de forma directa, mientras que el operador de energía cinética se aplicara en el espacio de momento mediante una transformada de Fourier. Esto tiene como ventaja, volver el operador diferencial en un operador multiplicativo [67, 68].

La discretización de los operadores se realiza directamente sobre la malla [67, 68, 95], es decir, los elementos de la matriz que representa el operador se encuentran en la (fila,columna) asociada con indices cartesianos a la malla en el espacio directo (en discretizaciones de esquemas como diferencias finitas y elementos finitos las matrices

poseen una fila y una columna asociada a los nodos, es decir se hace un mapeo del espacio 2D a 1D para su representación matricial) [95].

La selección del orden de aplicación de los operadores puede tener razones específicas por diversos motivos, entre ellos posibilidades de optimización de los algoritmos, de donde observamos que Braun comienza con la aplicación del operador de potencial en el espacio directo [68] y Mocken comienza con la aplicación del operador de energía cinética [67]. Bajo un esquema simple, conviene la aplicación del operador de potencial inicialmente, ya que evita realizar en esta primera operación la transformada de Fourier, ec.8.2. Sin embargo el esquema de Mocken permite lograr una optimización para sistemas que requieren simulaciones con  $t$  grande y alta resolución, mediante la aplicación de ciertas propiedades sobre el operador que resulta de la aplicación sucesiva de pasos temporales [67].

$$\mathcal{F}^{-1} \left( \exp \left( \frac{-i\Delta t v_F \hat{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\hbar} \right) \mathcal{F} \left( \exp \left( \frac{-i\Delta t e (V\mathbb{I} - v_F \hat{\sigma} \cdot \mathbf{A})}{2\hbar} \right) \psi(t_0) \right) \right). \quad (8.2)$$

Dado el costo computacional que implica el computo de la exponencial matricial, conviene indicar esta en forma trigonométrica [67], para lo cual se expande la exponencial en series de potencias y factorizamos (teniendo en cuenta las respectivas propiedades del operador) [99, 100].

Teniendo  $\exp(i\boldsymbol{\theta} \cdot \hat{\sigma})$  con  $\bar{\boldsymbol{\theta}} = \frac{\theta}{\|\boldsymbol{\theta}\|}$  siendo  $\boldsymbol{\theta}$  un vector arbitrario. De la identidad

$$(a \cdot \hat{\sigma})(b \cdot \hat{\sigma}) = a \cdot b + i(a \times b) \cdot \sigma,$$

y por ende

$$(\bar{\boldsymbol{\theta}} \cdot \hat{\sigma})^2 = 1.$$

Así

$$\begin{aligned} \exp(i\boldsymbol{\theta} \cdot \hat{\sigma}) &= \exp(i|\boldsymbol{\theta}|(\bar{\boldsymbol{\theta}} \cdot \hat{\sigma})), \\ &= 1 + i|\boldsymbol{\theta}|(\bar{\boldsymbol{\theta}} \cdot \hat{\sigma}) - \frac{|\boldsymbol{\theta}|^2}{2!} - i\frac{1}{3!}|\boldsymbol{\theta}|^3(\bar{\boldsymbol{\theta}} \cdot \hat{\sigma}) \dots, \\ &= \cos(|\boldsymbol{\theta}|)\mathbb{I} + i(\bar{\boldsymbol{\theta}} \cdot \hat{\sigma}) \text{sen}(|\boldsymbol{\theta}|). \end{aligned} \quad (8.3)$$

Usando ec.8.3 en ec.8.2, y sabiendo que la aplicación del operador momento genera sus autovalores  $p = -i\hbar k$ , se obtiene

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-i\Delta t e (V\mathbb{I} - v_F \hat{\sigma} \cdot \mathbf{A})}{2\hbar}\right) &= \cos\left(\sqrt{V^2 + v_F^2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}} \frac{e\Delta t}{2\hbar}\right) \mathbb{I} \\ &\quad - i \frac{V\mathbb{I} - v_F \hat{\sigma} \cdot \mathbf{A}}{\sqrt{V^2 + v_F^2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}} \operatorname{sen}\left(\sqrt{V^2 + v_F^2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}} \frac{e\Delta t}{2\hbar}\right), \\ \exp\left(\frac{-i\Delta t v_F \hat{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}\right) &= \cos\left(\sqrt{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}} v_F \Delta t\right) \mathbb{I} - i \frac{\hat{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{\sqrt{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}}} \operatorname{sen}\left(\sqrt{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}} v_F \Delta t\right) \end{aligned}$$

## 8.2 Unidades de variables

Debido a la escala de magnitud de las variables en este problema particular, desde cantidades muy pequeñas como la carga del electrón, la constante de Planck, y otras de magnitud grande como la velocidad de la luz o la velocidad de fermi, resulta poco conveniente el uso de unidades del sistema internacional para efectos numéricos, ya que contribuye al aumento de la propagación del error.

Con este fin, es recomendable trabajar con unidades atómicas [67]. Para ver la definición de estas unidades puede remitirse al enlace de wikipedia *Atomic Units* [http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic\\_units](http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_units).

Para el trabajo desarrollado aquí sera de importancia las siguientes definiciones<sup>2</sup>

## 8.3 Implementación

La implementación del algoritmo de operador de separación con transformada rápida de Fourier para este trabajo puede separarse en 4 bloques como se ilustra en la figura 8.1 y se indican a continuación:

- Definiciones.
- Discretización.

---

<sup>2</sup>Los valores indicados en las magnitudes corresponden a la equivalencia de 1 unidad atómica de dicha magnitud. La tabla contiene los valores aproximados a 4 decimales.

$m_e$	1
$e$	1
$\hbar$	1
$c$	$\frac{1}{137}$
Longitud (radio de Bohr $a_0$ )	$0.5292\text{\AA}$
Energía (energía de Hartree $E_h$ )	27.211eV
Tiempo	$2.4189 \times 10^{-17} s$
Velocidad	$2.1877 \frac{m}{s}$
Campo eléctrico	$51.421 \frac{V}{\text{\AA}}$
Campo magnético	$2.35 \times 10^5 T$

Tabla 8.1: Tabla de equivalencia de magnitudes y constantes en unidades atómicas.

- Propagación temporal.
- Visualización.

### 8.3.1 Definiciones

El bloque de definiciones lo constituyen los llamados de los módulos requeridos por el programa principal (líneas 3 a 10 del código A.1), la definición de las constantes básicas (líneas 14 a 17 del código A.1) y, de la geometría y condiciones del sistema (líneas 18 a 26 del código A.1).

En los llamados de los módulos se cita el paquete `numpy` para la creación, manipulación y operación de arreglos multidimensionales. Además de arreglos bidimensionales (tipo matriz) se hará uso de arreglos tridimensionales para el manejo de entidades de múltiples componentes, como el potencial magnético vector, la función de onda de dos componentes y los operadores.

El módulo `numpy.fft` es llamado para el uso de las funciones de transformada rápida de Fourier. Python ofrece una interface a la librería de *FFTW*<sup>3</sup>. En el programa principal se usa para determinar la posición de los nodos del mallado del espacio dual.

---

<sup>3</sup>*Fastest Fourier Transform in the West*, <http://www.fftw.org/>.

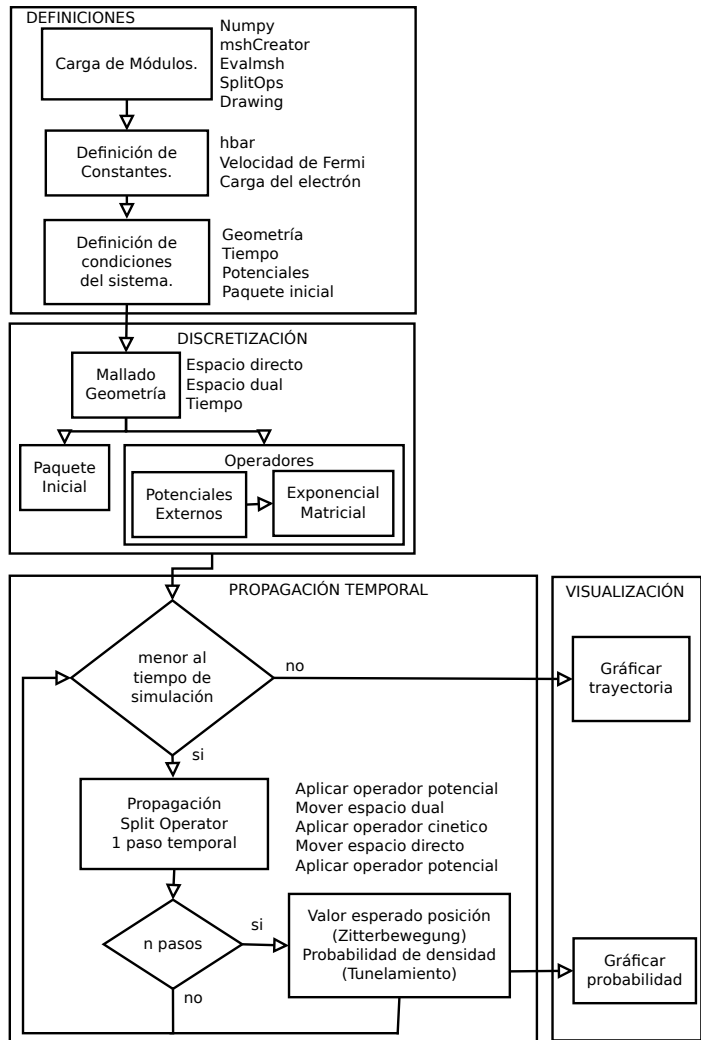


Figura 8.1: Diagrama de flujo del programa principal.

El módulo `time` se utiliza para determinar el tiempo que toma cada ejecución de la simulación con la instrucción `clock`.

Adicional a los módulos propios de python, se definen nuevos módulos con el fin de simplificar algunos procedimientos del programa. El módulo `mshCreator` contiene la función que define un mallado cuadrado regular que se usara para la discretización del espacio directo. El módulo `Evalmsh` define las funciones de evaluación de campos escalares y vectoriales (por vectorial entiéndase cualquier elemento que al evaluarse requiera de almacenarse en un arreglo tridimensional). El módulo `SplitOps` define las funciones de cambio de espacio a partir de transformadas de Fourier, la aplicación de las matrices de Pauli, la definición de la exponencial matricial sobre un tensor, la aplicación de un operador sobre las funciones de onda, la probabilidad de densidad y la normalización de las funciones de onda. El módulo `Drawing` contiene las funciones de graficación usadas en este trabajo.

En la segunda parte del bloque se definen las constantes básicas, como la velocidad de la luz, la carga del electrón y la velocidad de Fermi. La tercera parte define la longitud de los lados de la zona de simulación en el espacio directo, el tiempo total de simulación, los pasos temporales, la función de onda inicial y los potenciales externos.

### 8.3.2 Discretización

La discretización consiste en la generación de los nodos asociados a los dominios de interés y de la evaluación de las funciones y operadores sobre este espacio discreto generado.

Tanto el espacio directo como dual, se generan con un mallado cuadrado regular. Para el espacio directo se hace uso de la función `sqrgrid` del módulo `mshCreator` (código A.2) creado para este trabajo y el espacio dual directamente con la aplicación de la instrucción de `numpy meshgrid`. Nótese que el mallado consiste en una matriz en la cual las filas y columnas se asocian directamente con coordenadas  $X$  y  $Y$  (líneas 28 a 32 del código A.1).

Una vez generado los mallados se procede a la definición de los valores de las funciones de potencial, onda y operadores sobre el mallado. La función de potencial electrostático se puede almacenar en un arreglo bidimensional, mientras que la función de potencial magnético y la función de onda requieren ambos de un arreglo tridimensional de dos

capas. En el caso del potencial magnético las dos capas corresponden a la componente  $X$  y a la componente  $Y$  de este, y en la función de onda corresponde a los valores del paquete de onda de energía positiva y al paquete de energía negativa de la función de onda (líneas 34 a 39 del código A.1). La evaluación requiere del módulo propio `Evalmsh` (código A.3), el cual para la evaluación de funciones a tramo conocidas como la función escalón, rectángulo entre otras comúnmente usadas en las formas de potenciales depende del modulo propio `piecefun` (código A.4).

Una vez discretizados los potenciales, se definen las componentes de energía potencial y energía cinética del operador de evolución. El operador de evolución analítico es una matriz de  $2 \times 2$ , pero dado que el espacio esta discretizado, cada componente a su vez es una matriz donde sus componentes reflejan el valor del operador en dicho punto. Así cada punto del espacio discreto tiene asociado 4 componentes del operador. Luego la aplicación de las matrices de Pauli y la identidad de dimensión 2 son representadas como un arreglo tridimensional de 4 capas, generando al igual dicha representación de los operadores de evolución (líneas 41 a 53 del código A.1). La definición de las aplicaciones de las matrices de Pauli y la identidad se encuentran en el módulo `SplitOps` (código A.5).

### 8.3.3 Propagación temporal

La propagación temporal es el bloque principal del programa (líneas 64 a 80 del código A.1). Definido el orden de aplicación de los operadores se procede a la aplicación cíclica del siguiente procedimiento

- Aplicación del operador potencial en el espacio directo.
- Transformación de la función de onda al espacio dual.
- Aplicación del operador cinético en el espacio dual.
- Transformación de la función de onda al espacio directo.
- Aplicación del operador potencial en el espacio directo.
- Cada determinada cantidad de pasos se almacena el valor esperado de la posición



del paquete de energía positivo

$$\bar{X} = \sum_{x,y} \Psi_+^\dagger \hat{X} \Psi_+$$

y la densidad de probabilidad

$$P = \sum_{x,y,E(+,-)} \Psi^\dagger \Psi.$$

La aplicación de los operadores sobre las funciones de onda se definen en el módulo `SplitOps`. Esto es necesario ya que no se trata de un producto matriz vector sino del producto de un arreglo tridimensional de 4 capas (operador) con un arreglo tridimensional de 2 capas (función de onda). El producto de una capa con otra se define como un producto elemento a elemento, pero el producto entre los dos arreglos (operador y función de onda) genera un arreglo tridimensional de dos capas tal como se define en ec.8.4, donde los subíndices corresponden a las capas de los arreglos tridimensionales.

$$\begin{pmatrix} Op_0 & Op_1 \\ Op_2 & Op_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Op_0\Psi_0 + Op_1\Psi_1 \\ Op_2\Psi_0 + Op_3\Psi_1 \end{pmatrix}, \quad (8.4)$$

donde las capas del arreglo tridimensional del resultado son representadas por las componentes del vector resultante en ec.8.4.

### 8.3.4 Visualización

El bloque de visualización corresponde a la graficación de la curva de trayectoria del paquete de energía positiva a partir de los valores esperados de la posición en los tiempos usados para la ilustración del efecto Zitterbewegung, y la graficación de los contornos de la función de densidad de probabilidad de los dos paquetes para la ilustración de la paradoja de Klein. Para ello se hace uso del módulo `Drawing` (código A.6).

## Parte III

# Resultados y discusión

# Capítulo 9

## Resultados y discusión

Los resultados presentados en este capítulo hacen uso de las constantes y unidades indicadas en la tabla 8.1 y usando los siguientes valores por defecto para los parámetros del script.

Longitud zona ( $l$ )	3
Tiempo simulación ( $t$ )	3000
Resolución espacial ( $res_l$ )	256
Resolución temporal ( $res_t$ )	1500
Velocidad de Fermi ( $v_f$ )	$\frac{1}{137 \times 300}$
Potencial eléctrico (V)	$0.2 \times rect(1.5, 2, x)$
Potencial vector magnético (A)	$(0, 0.0027 \times rect(1.5, 2., x))$
Paquete inicial positivo	$\exp\left(-\frac{(x - 0.3)^2 + (y - 1)^2}{W}\right)$
Paquete inicial negativo	$\exp\left(-\frac{(x - 2.5)^2 + (y - 1)^2}{W}\right)$

Tabla 9.1: Constantes y funciones usadas en la simulación.

La constante  $W$  presente en las funciones del paquete de onda en la tabla 9.1 permiten modular el ancho de banda del paquete de onda.

Los cálculos fueron realizados en un equipo doble núcleo de 2.1GHz y 2GB de memoria RAM. El tiempo promedio de cada corrida del programa es de 25 minutos.

La energía asociada a los potenciales externos se encuentra alrededor de  $1eV$  que es el

límite válido de la aproximación de Dirac, superior a la energía de los posibles paquetes usados (esto precisamente se debe al interés en la paradoja de Klein).

La interacción de un paquete de onda con componente positiva con la barrera de potencial impuesta por el campo eléctrico (ver fig.9.1), resulta en una pequeña distorsión de este y finalmente produce su reflexión. Aquí, el efecto relacionado con la paradoja de Klein no se hace presente dado la ausencia de la segunda componente que da cuenta de la presencia de positrones. La ausencia de positrones, para los cuales la barrera de potencial positiva resulta atractiva, lleva a la aparición de un efecto clásico de tunelamiento, en el cual existe una dependencia directa de la altura de la barrera de potencial.

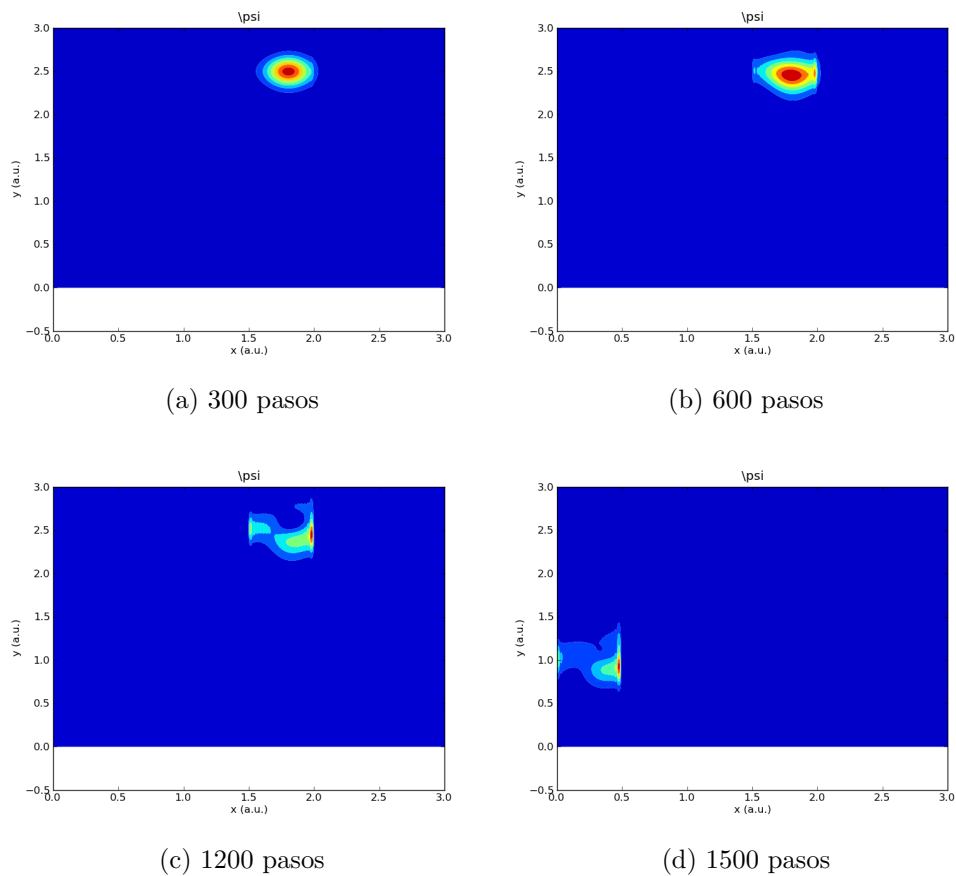


Figura 9.1: Test 3. Paquete de onda positivo, campo eléctrico y  $W=0.01$ .

Para este caso de una sola componente, en presencia de campos magnéticos el efecto de distorsión sobre el paquete de onda se hace más manifiesto. Igualmente se produce

la reflexión del paquete (ver fig.9.2).

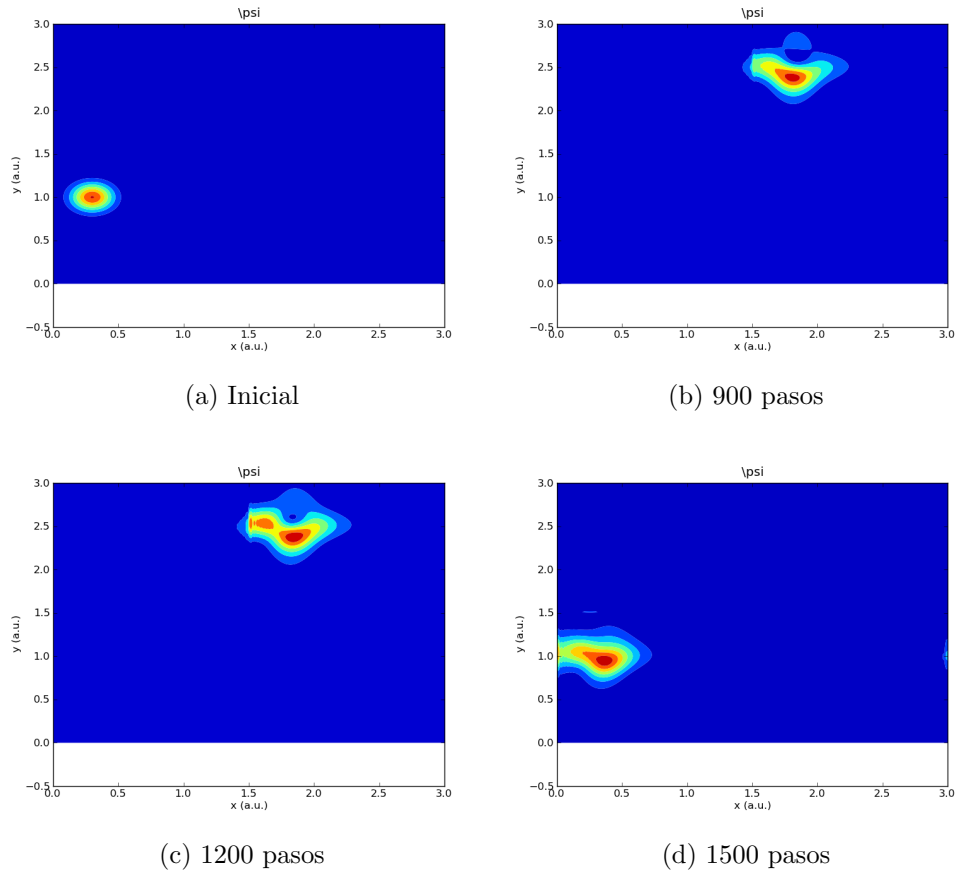


Figura 9.2: Test 6. Paquete de onda positivo, campo magnético y  $W=0.01$ .

Los efectos de distorsión en el paquete deben manejarse con cierto cuidado, ya que pueden ser dependientes del mallado espacial y también del ancho del paquete de onda. En los dos casos anteriores, el ancho de banda es comparable al ancho de la barrera de potencial.

En el caso de paquetes de onda con presencia de las dos componentes de energía, la interacción con la barrera de potencial impuesta por el campo eléctrico resulta en un efecto de tunelamiento con probabilidad 1. Obsérvese en la figura 9.3 que los paquetes de onda entre los tiempos iniciales y finales terminan opuestos a las posiciones iniciales. El efecto de la paradoja de Klein se relaciona con la interacción de ambos paquetes de onda sobre la barrera de potencial, tal como se ha mencionado antes. Ya que la barrera

de potencial positiva resulta atractiva para positrones, la presencia de estos produce finalmente el paso de los paquetes de onda al otro lado de la barrera de potencial.

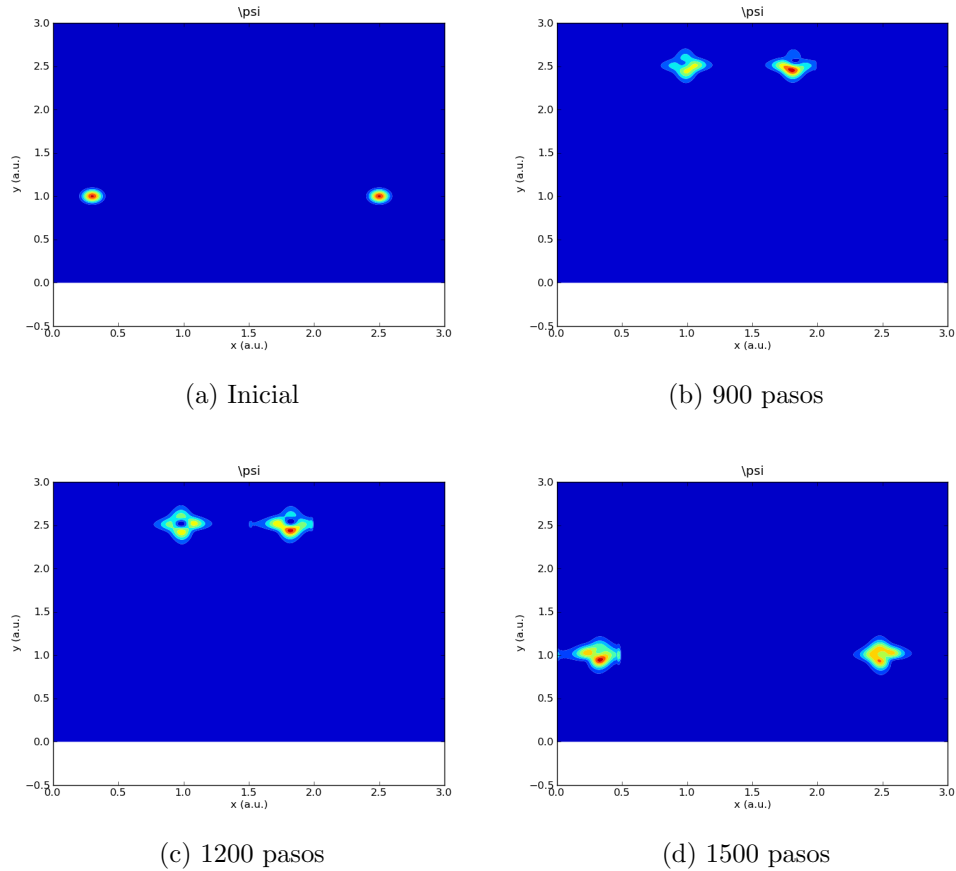
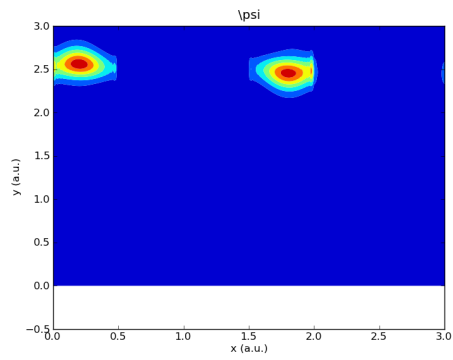


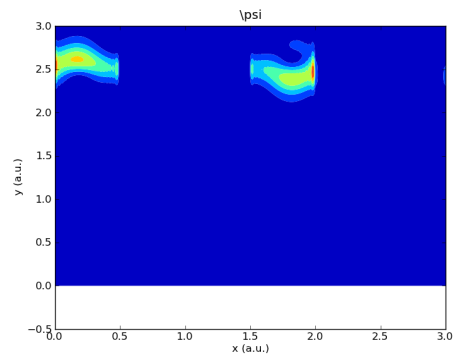
Figura 9.3: Test 12. Paquete de onda con dos componentes, campo eléctrico y  $W=0.01$ .

La modificación del tamaño del paquete de onda bajo la influencia de la misma barrera de potencial, en la cual el ancho es semejante a la barrera de potencial lleva a la manifestación de efectos de distorsión más significativos pero aun permitiendo el fenómeno de tunelamiento (ver fig.9.4).

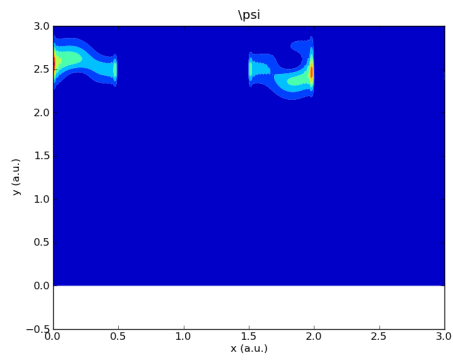
Tal como se mostró en la sección 7.1, la manifestación del efecto Zitterbewegung es posible en ausencia de campos externos. Realizando la simulación con potenciales nulos y calculando los valores esperados de la posición se observan las trayectorias de la figura 9.5. Se considera que la forma cíclica de la trayectoria hacia el lado derecho, obedece a los efectos de oscilación de Zitterbewegung inducidos por la interacción con



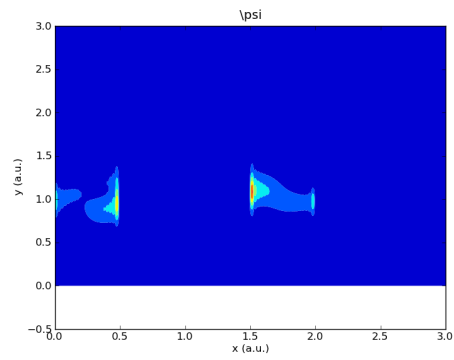
(a) 600 pasos



(b) 900 pasos



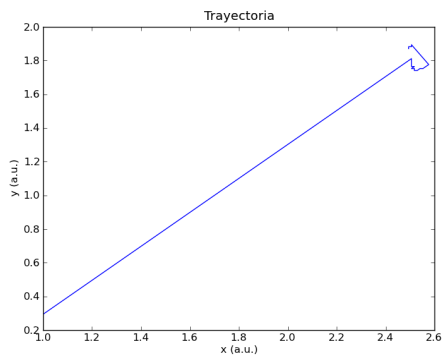
(c) 1200 pasos



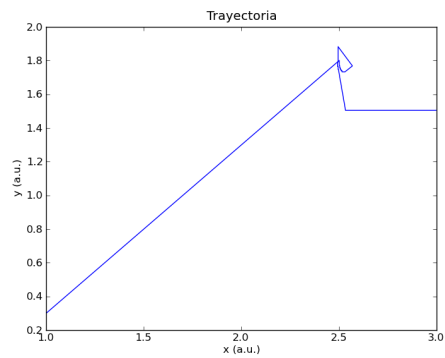
(d) 1500 pasos

Figura 9.4: Test 16. Paquete de onda con dos componentes, campo electrico y  $W=0.05$ .

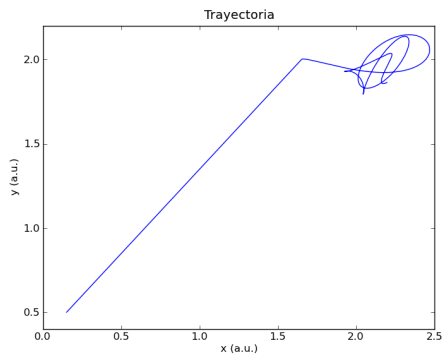
el paquete de onda de energía negativa.



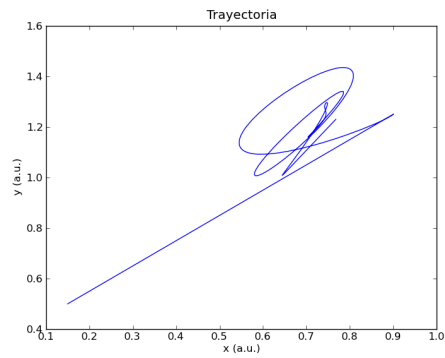
(a)  $\text{res}_l=512, \text{res}_t=3500$



(b)  $\text{res}_l=1024, \text{res}_t=7000, t=6000$



(c)  $\text{res}_l=1024, \text{res}_t=7000, t=6000, l=6$



(d)  $\text{res}_l=1024, \text{res}_t=7000, t=3500$

Figura 9.5: Manifestación del efecto Zitterbewegung.



# Capítulo 10

## Conclusiones

Tal como se ha indicado en la literatura, se muestra la presencia de comportamientos relativistas en el grafeno. El comportamiento relativista presente en este caso no obedece a condiciones de velocidades cercanas a la luz sino debido a las condiciones creadas por la hibridación  $sp^2$  de los átomos de carbono.

Se debe resaltar que las consideraciones de amarre fuerte permiten simplificar los modelos requeridos para el análisis, ya que parten de un conjunto de soluciones base provenientes de resultados de orbitales atómicos individuales o de resultados de medios periódicos como las funciones de Bloch. Ambos casos, originados de la ecuación de Schrödinger.

Sin usar el método de amarre fuerte se puede partir de los modelos de Schrödinger o de Dirac, lo cual requiere conocer los potenciales aportados por los núcleos iónicos y el potencial aportado por la distribución electrónica sobre los enlaces. Sin embargo este camino posee un mayor costo computacional y una mayor complejidad matemática.

Se generó documentación de los procedimientos de carácter analítico de manera detallada, en los cuales para el efecto Zitterbewegung y la conductancia mínima se presenta una metodología alternativa de mayor sencillez a la presentada en la literatura, y se detalla el procedimiento de determinación de los puntos de Dirac ausentes en la literatura.

La aplicación de técnicas de simulación numérica permite reducir limitaciones analíticas de soluciones a modelos complejos.

La técnica del operador de separación con FFT tiene un alto costo computacional, prin-

principalmente debido a la aplicación de dos transformadas de Fourier por paso temporal, y el nivel de discretización requerido en las componentes espaciales y temporales.

Se obtuvo una simulación del efecto de tunelamiento asociado a la paradoja de Klein. Adicionalmente se pudo verificar a través de la simulación que aun bajo el modelo relativista de la ecuación de Dirac la ausencia de la componente del paquete de onda asociada al positrón elimina los efectos de la paradoja de Klein, asociando de manera clara la relación del fenómeno con la interacción de los electrones con su antipartícula, los positrones.

El cálculo del valor esperado del operador de posición permitió reconstruir la trayectoria del paquete de onda positiva y observar la manifestación del efecto Zitterbewegung de manera numérica. Se resalta que las publicaciones asociadas al estudio de estos fenómenos en el grafeno hacen uso de elementos de carácter analítico, que restringen la posibilidad de variar condiciones iniciales o potenciales de barrera dada la restricción de la posibilidad de encontrar una solución analítica y los trabajos de carácter numérico abordan otros tipos de propiedades distintas observables a escalas de mayor dimensión (problemas de carácter mesoscópico) o propiedades en las que los efectos de confinamiento poseen una manifestación indirecta.

## 10.1 Trabajo futuro

Se espera como trabajo futuro la ampliación del conjunto de rutinas de simulación con el fin de cubrir los siguientes aspectos

- Fermiones con masa.
- Ecuación de Dirac 3D.
- Condiciones periódicas en el potencial externo.
- Cálculo de autocorrelación para determinación de autovalores de energía y relación de dispersión.

Igualmente el desarrollo de rutinas de elementos finitos para ecuaciones de primer orden, para su aplicación a la ecuación de Dirac, y contrastar y analizar

- Dinámica de paquetes de ondas.
- Aproximación del hamiltoniano por potenciales atómicos.
- Cálculo de estructuras periódicas y cálculo de estructura de bandas.
- Dominios no regulares.

# Bibliografía

- [1] Andreas Barth and Werner Marx. Graphene - a rising star in view of scientometrics. pre-print, September 2008.
- [2] Mazdak Taghioskoui. Trends in graphene research. *Materials Today*, 12(10):34–37, 2009.
- [3] M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus. Intercalation compounds of graphite. *Advances in Physics*, 51(1):1–186, 2002.
- [4] Mauricio Terrones, Andrés R. Botello-Méndez, Jessica Campos-Delgado, Florentino López-Urías, Yadira I. Vega-Cantú, Fernando J. Rodríguez-Macías, Ana Laura Elías, Emilio Muñoz Sandoval, Abraham G. Cano-Márquez, Jean-Christophe Charlier, and Humberto Terrones. Graphene and graphite nanoribbons: Morphology, properties, synthesis, defects and applications. *Nano Today*, 5:351–372, 2010.
- [5] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zahringer, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos. Quantum simulation of the dirac equation. *Nature*, 463:68–71, 2010.
- [6] I. M. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene. *Nature Physics*, 2:320, September 2006.
- [7] Christian Melhiot. Material by computer design: An introduction. *Energy and Technology Review*, 8:1–3, August - September 2004.
- [8] W. Hergert, A. Ernst, and M. Däne. *Computational Materials Science*. Lectures Notes in Physics. Springer, 2004.
- [9] Dieter W. Heermann. *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*. Springer, 2 edition, 1990.

- [10] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature Materials*, 6:183–191, March 2007.
- [11] N. M. R. Peres. Graphene, new physics in two dimensions. *Europhysics News*, 40(3):17–20, May-June 2009.
- [12] M. Ishigami, J. H. Chen, W. G. Cullen, M. S. Fuhrer, and E. D. Williams. Atomic structure of graphene on sio<sub>2</sub>. *Nano Letters*, 7(6):1643–1648, 2007.
- [13] J. Milton Pereira, V. Mlinar, and F. M. Peeters. Confined states and direction-dependent transmission in graphene quantum wells. *Physical Review B*, 74:045424, 2006.
- [14] A. K. Geim. Graphene: Status and prospects. *Science*, 324(5934):1530–1534, 2009.
- [15] M. Dragoman and D. Dragoman. Graphene-based quantum electronics. *Progress in Quantum Electronics*, 33(6):165–214, 2009.
- [16] T. Ihn, J. Güttinger, F. Molitor, S. Schnez, E. Schurtenberger, A. Jacobsen, S. Hellmüller, T. Frey, S. Dröscher, C. Stampfer, and K. Ensslin. Graphene single-electron transistors. *Materials today*, 13(3):44–50, 2010.
- [17] Q. Wang. Simulations of the bending rigidity of graphene. *Physics Letters A*, 374(9):1180 – 1183, 2010.
- [18] I. W. Frank, D. M. Tanenbaum, A. M. van der Zande, and P. L. McEuen. Mechanical properties of suspended graphene sheets. *Journal of Vacuum Science and Technology B*, 25(6):2558, November - December 2007.
- [19] Nobel Foundation. The nobel prize in physics 2010, October 2010. Popular Information.
- [20] M.F. Craciun, S. Russo, M. Yamamoto, and S. Tarucha. Tuneable electronic properties in graphene. *Nano Today*, online:1 – 19, 2011.
- [21] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov. Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics. *Solid State Communications*, 143:3–13, 2007.

- [22] Mikhail I. Katsnelson. Graphene: carbon in two dimensions. *Materials today*, 10(1 - 2):20–27, January - February 2007.
- [23] N. M. R. Peres, A. H. Castro Neto, and F. Guinea. Dirac fermion confinement in graphene. *Physical Review B*, 73(24):241403, 2006.
- [24] L. Lamata, J. León, T. Schätz, and E. Solano. Dirac equation and quantum relativistic effects in a single trapped ion. *Physical Review Letters*, 98(25):253005, 2007.
- [25] J. Schliemann, D. Loss, and R. M. Westervelt. Zitterbewegung of electronic wave packets in semiconductor nanostructures. *Physical Review Letters*, 94:206801, 2005.
- [26] Paweł Kurzyński. Relativistic effects in quantum walks: Klein’s paradox and zitterbewegung. *Physics Letters A*, 372:6125–6129, 2008.
- [27] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1):109–162, January-March 2009.
- [28] P. R. Wallace. The band theory of graphite. *Physical Review*, 71(9):622–634, 1947.
- [29] Thomson Reuters. Graphene, December 2008. Accessed 27 september 2011.
- [30] Daniel R. Dreyer, Rodney S. Ruoff, and Christopher W. Bielawski. From conception to realization: An historical account of graphene and some perspectives for its future. *Angewandte Chemie International Edition*, 49:9336–9344, 2010.
- [31] Mike Sprinkle. Boehm’s 1961 isolation of graphene, December 2009. Accessed 27 september 2011.
- [32] Humberto Leonardo de la Vega Gramegna. Nanotubos de carbono y sus aplicaciones. Master’s thesis, Escuela de Ingeniería Civil Electrónica, Valdivia - Chile, 2009. Título de Pregrado.
- [33] H. P. Boehm, R. Setton, and E. Stumpp. Nomenclature and terminology of graphite intercalation compounds. *Carbon*, 24(2):241–245, 1986.

- [34] IUPAC. *Compendium of Chemical Terminology*. Blackwell Scientific Publications, 2 edition, 1997. XML on-line corrected version: <http://goldbook.iupac.org> (2006-) created by M. Nic, J. Jirat, B. Kosata; updates compiled by A. Jenkins. ISBN 0-9678550-9-8.
- [35] H. Rafii-Tabar. *Computational Physics of Carbon Nanotubes*. Cambridge University Press, 2007.
- [36] René Petersen. Study of excitons in gapped graphene and of the influence of hole geometry on the band gap of graphene antidot lattices. Master's thesis, Institute of Physics and Nanotechnology, Aalborg University, June 2009.
- [37] A. K. Geim and A. H. MacDonald. Graphene: Exploring carbon flatland. *Physics Today*, 60(8):35–41, 2007.
- [38] José M. Cerveró and Enrique Díez. The massless dirac equation in the refrigerator. *International Journal of Theoretical Physics*, 50(7):2134–2143, December 2010.
- [39] Betti Hartmann and Wojtek J. Zakrzewski. Electrons on hexagonal lattices and applications to nanotubes. *Physical Review B*, 68(18):184302, 2003.
- [40] Francisco Javier López Rodríguez. *Transporte de carga en grafeno bajo radiación electromagnética*. PhD thesis, Universidad Nacional Autónoma de México, August 2010.
- [41] Christian Schönberg. Bandstructure of graphene and carbon nanotubes : An exercise in condensed matter physics. Lectures and exercises Nanoelectronics group of the University of Basel, 2000.
- [42] Kentaro Nomura and A. H. MacDonald. Quantum transport of massless dirac fermions. *Physical Review Letters*, 98(7):076602, 2007.
- [43] Partha Ghose, Manoj K. Samal, and Animesh Datta. Klein paradox for bosons. *Physics Letters A*, 315:23–27, 2003.
- [44] Charles Kittel. *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons, Inc, 8 edition, 2005.
- [45] H. P. Myers. *Introductory Solid State Physics*. Taylor & Francis, 2 edition, 2009.

- [46] B.G. Sidharth. Revisiting zitterbewegung. *International Journal of Theoretical Physics*, 48:497–506, 2009.
- [47] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics wave equation*. Springer, 3 edition, 2000.
- [48] James D. Bjorken and Sidney D. Drell. *Relativistic Quantum Mechanics*. McGraw-Hill Book Company, 1964.
- [49] Wlodek Zawadzki and Tomasz M. Rusin. Nature of electron zitterbewegung in crystalline solids. *Physics Letters A*, 374:3533–3537, 2010.
- [50] Wlodek Zawadzki and Tomasz M. Rusin. Zitterbewegung (trembling motion) of electrons in semiconductors: a review. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23:143201, 2011.
- [51] A. Calogeracos and N. Dombey. The vacuum charge, klein tunnelling and the klein paradox. *Physica B*, 255:126–131, 1998.
- [52] Nojoon Myoung and G. Ihm. Tunneling of dirac fermions through magnetic barriers in graphene. *Physica E*, 42:70–72, 2009.
- [53] Masao Arai and Yasuhiro Hatsugai. Numerical study of quantum hall effect in two-dimensional multi-band system: Single- and multi-layer graphene. *Physica E*, 42:740–743, 2010.
- [54] Nouredine Zettili. *Quantum Mechanics. Concepts and Applications*. Wiley, 2 edition, 2009.
- [55] Changlin Tang, Weihua Yan, Yisong Zheng, Guangshe Li, and Liping Li. Dirac equation description on the electronic states and magnetic properties of a square graphene quantum dot. *Nanotechnology*, 19(43):435401, 2008.
- [56] D. Dragoman and M. Dragoman. Negative differential resistance of electrons in graphene barrier. *Applied Physics Letters*, 90(14):143111, 2007.
- [57] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov. Two dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, 438:197–200, 2005.



- [58] O. Kullie and D. Kolb. High accuracy dirac-finite-element (fem) calculations for  $h_2^+$  and  $th_2^{179+}$ . *The European Physical Journal D*, 17:167–173, 2001.
- [59] Norma L. Rangel and Jorge M. Seminario. Molecular electrostatic potential devices on graphite and silicon surfaces. *Journal of Physical Chemistry A*, 110(44):12298–12302, 2006.
- [60] Z. Peralta-Inga, J.S. Murray, M. Edward Grice, S. Boyd, C.J. O’Connor, and P. Politzer. Computational characterization of surfaces of model graphene systems. *Journal of Molecular Structure*, 549:147–158, 2001.
- [61] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin. *Solid State Physics*. Harcourt College Publisher, 1976.
- [62] Alexander Altland and Ben Simons. *Concepts of Theoretical Solid State Physics*. 2001.
- [63] Paul L. DeVries. *A first course in computational physics*. John Wiley & Sons, Inc, 1994.
- [64] M.D Feit, J.A Fleck Jr, and A Steiger. Solution of the schrödinger equation by a spectral method. *Journal of Computational Physics*, 47(3):421–433, 1982.
- [65] Riccardo Giachetti. Spectral properties of the dirac equation in unbounded vector potentials. *Applied Numerical Mathematics*, 2011.
- [66] John V. Shebalin. Numerical solution of the coupled dirac and maxwell equations. *Physics Letters A*, 226:1–6, 1997.
- [67] Guido R. Mocken and Christoph H. Keitel. Fft-split-operator code for solving the dirac equation in 2+1 dimensions. *Computer Physics Communications*, 178:868–882, 2008.
- [68] Michael Braun, Christoph Meiera, and Volker Engel. Nanosecond wave-packet propagation with the split operator technique. *Computer Physics Communication*, pages 152–158, 1996.

- [69] L. Ramdas Ram-Mohan. *Finite Element and Boundary Element Applications in Quantum Mechanics*. Oxford Text in Applied and Engineering Mathematics. Oxford University Press, 2002.
- [70] Debra J. Searles and Ellak I. von Nagy-Felsobuki. Numerical experiments in quantum physics: Finite-element method. *American Journal of Physics*, 56(5):444–448, 1988.
- [71] Weiyang Zheng, Lung an Ying, and Peizhu Ding. Numerical solutions of the schrödinger equation for the ground lithium by the finite element method. *Applied Mathematics and Computation*, 153:685–695, 2004.
- [72] K. Hashemnia, M. Farid, and R. Vatankhah. Vibrational analysis of carbon nanotubes and graphene sheets using molecular structural mechanics approach. *Computational Materials Science*, 47:79–85, 2009.
- [73] Antonio F. Ávila, Alexandre C. Eduardo, and Almir S. Neto. Vibrational analysis of graphene based nanostructures. *Computers and Structures*, 89:878–892, 2011.
- [74] S. Kitipornchai, X. Q. He, and K. M. Liew. Continuum model for the vibration of multilayered graphene sheets. *Physical Review B*, 72:075443, 2005.
- [75] W. Krauth. *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*. Oxford Master Series in Statistical, Computational, and Theoretical Physics. Oxford University Press, 2006.
- [76] D. Landau and K. Binder. *A guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 3 edition, 2009.
- [77] C. W. Glass, A. R. Oganov, and N. Hansen. Uspex - evolutionary crystal structure prediction. *Computer Physics Communications*, 175:713–720, 2006.
- [78] Jon Kristian Nilsen. Montepython: Implementing quantum monte carlo using python. *Computer Physics Communications*, 177:799–814, 2007.
- [79] Wesley Armour, Simon Hands, and Costas Strouthos. Monte carlo simulation of monolayer graphene at non-zero temperature. *Physical Review B*, 84:075123, 2011.

- [80] Terry J. Frankcombe, Suresh K. Bhatia, and Sean C. Smith. Ab initio modelling of basal plane oxidation of graphenes and implications for modelling char combustion. *Carbon*, 40:2341–2349, 2002.
- [81] Wu Qin, Xin Li, Wen-Wen Bian, Xiu-Juan Fan, and Jing-Yao Qi. Density functional theory calculations and molecular dynamics simulations of the adsorption of biomolecules on graphene surfaces. *Biomaterials*, 31:1007–1016, 2010.
- [82] Paolo Giannozzi, Stefano Baroni, and Nicola Bonini. Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(39):395502, 2009.
- [83] Tao Pang. *An Introduction to Computational Physics*. Cambridge University Press, 2 edition, 2006.
- [84] Rubin H. Landau, Manuel José Páez, and Cristian C. Bordeianu. *A survey of computational physics*. Princeton University Press, 2008.
- [85] Fotis Georgatos. How applicable is python as first computer language for teaching programming in a pre-university educational environment, from a teacher’s point of view? Master’s thesis, AMSTEL Institute, Faculty of Science, Universiteit van Amsterdam, June 2002.
- [86] EuroScipy tutorial. *Python Scientific lecture notes*. team, July 2010.
- [87] P.H. Borchers. Python: a language for computational physics. *Computer Physics Communications*, 177:199–201, 2007.
- [88] Lorenzo Bolla. Numerical computing: matlab vs python+numpy+weave, April 2007. Accessed 14 October 2011.
- [89] Warren Weckesser. Performance python, September 2011. Accessed 14 October 2011.
- [90] Python. Python documentation. Accessed 2 October 2011.
- [91] Hans Petter Langtangen. *Python Scripting for Computational Science*. University of Oslo, 2004.

- [92] John Hunter, Darren Dale, and Michael Droettboom. Matplotlib, October 2011. Accessed 14 October 2011.
- [93] Paraview documentation. Accessed 2 October 2011.
- [94] H. Hakan Gürel, Özden Akinsi, and Hilmi Ünlü. Tight binding modeling of band gaps and band offsets in heterostructures. *Computational Materials Science*, 33:269–275, 2005.
- [95] François Fillion-Gourdeau, Emmanuel Lorin, and André D. Bandrauk. Numerical solution of the time-dependent dirac equation in coordinate space without fermion-doubling. pre-print, July 2011. arXiv:1107.4650v1 [physics.comp-ph].
- [96] Wikipedia contributors. Minimal coupling, October 2011. accessed 28 October 2011 23:42 UTC.
- [97] M. I. Katsnelson. Zitterbewegung, chirality, and minimal conductivity in graphene. *European Physical Journal B*, 51(2):157–160, 2006.
- [98] Andrea Dal Corso. The pwcond code: Complex bands, transmission, and ballistic conductance. Slides, 2010.
- [99] Luis de la Peña. *Introducción a la mecánica cuántica*. Ediciones Cientificas Universitarias. UNAM, 3 edition, 2006.
- [100] Walter Greiner and Berndt Müller. *Quantum Mechanics Symmetries*. Springer, 2 edition, 1994.

# Anexo A

## Código y módulos

En este anexo, se indica el código realizado.

### A.1 Código principal

El código principal es el script que contiene las definiciones de los parámetros, constantes y desarrolla secuencialmente las distintas operaciones que llevan al resultado presentado. Actualmente es aplicado para la ecuación de Dirac 2D para fermiones sin masa. A futuro se espera desarrollar un módulo de FFT-SOM que soporte el problema 3D y fermiones con masa. La estructura matemática para el problema 1D es igual al problema 2D (se debe tener en cuenta que en 1D no existen campos magnéticos).

Código A.1: Rutina principal que ejecuta FFT-Split operator

```
1 # FFT Split Operator applied to Dirac Massless 2D equation
   __author__ = "Edward_Y._Villegas"
3 from numpy import *
   from numpy.fft import fftfreq, fftshift
5 from mshCreator import sqrgrid
   from Evalmsh import scalarfield, vectorfield
7 from SplitOps import appliedop, kspace, xspace, probabdens, sigma_p, \
   iden2, normalize
9 from Drawing import contourM, CurvaV
   from time import clock #, gmtime, strftime
11 print "Initialize_clock"
```

```

tic = clock()
13 print "Load_constants_and_define_geometry_and_parameter_simulation"
    c = 1./137
15 hbar = 1.
    e_charge = 1.
17 v_f = c/300
    l = 3.
19 origen = array([0.,0.], dtype=float)
    t = 2500.
21 res_l = 256
    res_t = 4000
23 Psi0_str = ['exp(-((x[0]-0.3)**2+(x[1]-1.)**2)/0.05)',\
    'exp(-((x[0]-1.7)**2+(x[1]-1.)**2)/0.05)']
25 Vstr = '0.05*rect(1.5,2.,x[0])'
    Astr = ['0*x[0]', '0.0027*rect(1.5,2.,x[0])']
27 print "Building_spatial_and_time_mesh"
    XYgrid = sqrgrid(origen, l, res_l)
29 k_line = fftshift(fftfreq(res_l, l/(res_l-1)))
    KKgrid = meshgrid(k_line, k_line)
31 dt = t/res_t
    times = 10
33 print "Building_initial_condition"
    Psi = array(vectorfield(XYgrid, Psi0_str), dtype=complex)
35 Psi = normalize(Psi)
    Psi_ini = Psi
37 print "Building_external_potentials"
    V = scalarfield(XYgrid, Vstr)
39 A = array(vectorfield(XYgrid, Astr), dtype=float)
    print "Calculate_exp(-\imath_\Delta_t_\hat{V}/\hbar)"
41 Vsqrt = sqrt(V*V + v_f*v_f*sum(A*A,0))
    ArgPot = Vsqrt * e_charge * dt / (2 * hbar)
43 Vcos = iden2(cos(ArgPot))
    Vsin = sin(ArgPot) * (iden2(V) - v_f * sigma_p(A)) / (Vsqrt + \
45 (abs(Vsqrt)==0))
    expV = Vcos - 1.j * Vsin

```

```

47 print " Calculate  $-\imath \Delta t \hat{T} / \hbar$ "
    KK = array(KKgrid, dtype=float)
49 Ksqrt = sqrt(sum(KK*KK,0))
    ArgKin = v_f * dt * Ksqrt
51 Kcos = iden2(cos(ArgKin))
    Ksin = sin(ArgKin) * sigma_p(KK) / (Ksqrt + (abs(Ksqrt)==0))
53 expK = Kcos - 1.j * Ksin
    print " Split operator propagation"
55 timer = 0
    print " Save fig.ini"
57 Psib = zeros((1,2), dtype=float)
    Psib[0,0] = sum(Psi[0].conjugate()*XYgrid[0]*Psi[0]).real
59 Psib[0,1] = sum(Psi[0].conjugate()*XYgrid[1]*Psi[0]).real
    indPsi = Psib.copy()
61 contourM(XYgrid, probabdens(Psi), ['x_(a.u.)', 'y_(a.u.)', '\psi'], \
    'Psi_ini.png')
63 print " fig_saved"
    while timer < res_t:
65 Psi = appliedop(expV, Psi)
    Psi = kspace(Psi)
67 Psi = appliedop(expK, Psi)
    Psi = xspace(Psi)
69 Psi = appliedop(expK, Psi)
    if (timer%20==0):
71 print "Time_step", timer
    Psib[0,0] = sum(Psi[0].conjugate()*XYgrid[0]*Psi[0]).real
73 Psib[0,1] = sum(Psi[0].conjugate()*XYgrid[1]*Psi[0]).real
    indPsi = vstack([indPsi, Psib])
75 if (timer%500==0):
    print " Save fig.time_step", timer
77 contourM(XYgrid, probabdens(Psi), ['x_(a.u.)', 'y_(a.u.)', '\psi'], \
    'Psi_'+str(timer)+'.png')
79 print " fig_saved"
    timer = timer + 1
81 CurvaV(indPsi[:,0], indPsi[:,1], ['x_(a.u.)', 'y_(a.u.)', 'Trayectoria'], \

```

```

    'zitterbewegung.png')
83 contourM(XYgrid, probabdens(Psi), ['x_(a.u.)', 'y_(a.u.)', '\psi'], \
    'Psi_'+str(timer)+'.png')
85 toc = clock()-tic
    print "Calculation is done. Time processing:", toc, "s."
87 print "c", c
    print "hbar", hbar
89 print "e_charge", e_charge
    print "v_f", v_f
91 print "l", l
    print "t", t
93 print "res_l", res_l
    print "res_t", res_t
95 print "dt", dt
    print "Psi", Psi0_str
97 print "V", Vstr
    print "A", Astr

```

## A.2 mshCreator

Actualmente este módulo solo contiene una función. La finalidad del módulo es la creación de mallas bajo ciertos parámetros sin recurrir a malladores externos. El módulo esta en desarrollo para incluir otros tipos de mallas (no regulares y con elementos no cuadrados).

Código A.2: Módulo mshCreator

```

#!/usr/bin/python
2 ## module mshCreator
    # -*- coding: utf8 -*-
4 __all__=['sqrgrid']
    __author__="Edward_Y._Villegas"
6 from numpy import *
    def sqrgrid(corner, lenght, resolution):
8     endcorner = corner + lenght
        x = linspace(corner[0], endcorner[0], resolution)

```



```

10 y = linspace (corner [1] , endcorner [1] , resolution )
    x,y = meshgrid(x,y)
12 return x,y

```

## A.3 Evalmsh

Este módulo contiene funciones para la evaluación de campos escalares y vectoriales sobre una malla dada. Adicionalmente contiene una función auxiliar para la división *auxdivide* usada para evitar la división por cero en la normalización de elementos de magnitud cero.

Código A.3: Módulo Evalmsh

```

#!/usr/bin/python
2 ## module Evalmsh
  # -*- coding: utf8 -*-
4 --all--=[ 'scalarfield' , 'vectorfield' ]
  --author-- = "Edward_Y._Villegas"
6 from numpy import *
  from piecefun import delta , step , rect , ramp , saw
8 def scalarfield (msh, field):
  if 'list' in str (type(msh)):
10   dim = len (msh)
    if not ((dim == 2) or (dim == 1)):
12     print "msh_argument_input_as_a_list_take_one" \
        "or_two_vectors , but_have," , dim
14     return
    else:
16     grid = 'vec'
    elif 'tuple' in str (type(msh)): #tuple of numpy-arrays of meshgrid
18     dim = len (msh)
        grid = 'msh'
20     else: # numpy-array
        dim = msh.shape [1]
22     grid = 'msh'
    count = 0

```

```

24 x = []
    while count < dim:
26     x.append(msh[count])
        count = count + 1
28 value = eval(field)
    return value
30 def vectorfield(msh, field):
    n = len(field)
32 value = []
    cont = 0
34 while cont < n:
        value.append(scalarfield(msh, field[cont]))
36 cont = cont + 1
    return value

```

## A.4 Piecefun

Este módulo define conocidas funciones por tramos unidimensionales. Estas son usadas para las definiciones de las barreras de potencial. El módulo esta en proceso de desarrollo para la inclusión de funciones periódicas.

Código A.4: Módulo Piecefun

```

1 #!/usr/bin/python
  ## module piecefun
3 # -*- coding: utf8 -*-
  __all__=['delta', 'step', 'rect', 'ramp', 'saw', 'triangle']
5 __author__="Edward_Y._Villegas"
  def delta(a,x):
7   value = (a==x)*1.
    return value
9 def step(a,x):
    value = (a<x)*1.
11 return value
  def rect(a,b,x):
13 # value = step(a,x) - step(b,x) # not because rect(a,b,b) should be 1

```

```

    value = ((a<x)*(x<b))*1.
15 return value
    def ramp(a,x):
17     value = (x-a)*step(a,x)
        return value
19 def saw(a,b,x):
    value = (x-a)*rect(a,b,x)
21 return value
    def triangle(a,x):
23     value = (1-abs(x))*(abs(x)<1)
        return value

```

## A.5 SplitOps

Este módulo define las operaciones/álgebra realizadas sobre las representaciones de los tensores. Los tensores son almacenados como hipermatrices (matrices/arreglos de 3 dimensiones) y se definen las reglas de operación.

Código A.5: Módulo SplitOps

```

#!/usr/bin/python
2 ## module SplitOps
    # -*- coding: utf8 -*-
4 --all--=[ 'appliedop', 'kspace', 'xspace', 'probabdens', 'sigma_p', 'iden2', 'expM' ]
    --author--="Edward_Y._Villegas"
6 from numpy import *
    from numpy.fft import fft2, ifft2, fftshift, ifftshift
8 from scipy.linalg import expm
    sigmax = array ([[0.]], [[1.]], [[1.]], [[0.]], dtype=complex)
10 sigmay = array ([[0.]], [[-1.j]], [[1.j]], [[0.]], dtype=complex)
    sigmaz = array ([[1.]], [[0.]], [[0.]], [[-1.]], dtype=complex)
12 sigmap = [sigmax, sigmay, sigmaz]
    I2ten = array ([[1.]], [[0.]], [[0.]], [[1.]], dtype=complex)
14 def normalize(state):
    state = state / sqrt(sum(state.conjugate()*state))
16 return state

```

```

def appliedop(op, state):
18 dim = state.shape[0]
    dim2 = dim**2
20 count = 0
    applied = []
22 while count < dim2:
        acum = zeros(state[0].shape, dtype=complex)
24     count1 = 0
        while count1 < dim:
26         acum = acum + state[count1]*op[count]
            count1 = count1 + 1
28         count = count + 1
            applied.append(acum)
30 applied = array(applied, dtype=complex)
    applied = normalize(applied)
32 return applied

def kspace(state):
34 dim = state.shape[0]
    elm = state[0].shape[0]*state[0].shape[1]
36 count = 0
    kval = []
38 while count < dim:
        kval.append(fftshift(fft2(state[count])))
40     count = count + 1
        kval = array(kval, dtype=complex)
42 kval = normalize(kval)
    return kval

44 def xspace(state):
    dim = state.shape[0]
46 count = 0
    xval = []
48 while count < dim:
        xval.append(ifftshift(ifft2(state[count])))
50     count = count + 1
        xval = array(xval, dtype=complex)

```

```

52 xval = normalize(xval)
    return xval
54 def probabdens(state):
    prob = sum(state.conjugate()*state,0)
56 prob = prob/sum(prob)
    return prob
58 def sigma_p(VecOp):
    dim = VecOp.shape[0]
60 dim2 = VecOp.shape[1]
    count = 0
62 acum = zeros((4,dim2,dim2),dtype=complex)
    while count < dim:
64     acum = sigmap[count]*VecOp[count] + acum
        count = count + 1
66     return acum
    def iden2(op):
68     value = I2ten*op
        return value
70 def expM(op):
    dim = op.shape[0]
72 dim1 = op[0].shape
    value = zeros((dim,dim1[0],dim1[1]),dtype=complex)
74 countx = 0
    while countx < dim1[0]:
76     county = 0
        while county < dim1[1]:
78         matrix = op[:,countx,county]
            matrix.shape = (int(sqrt(dim)),int(sqrt(dim)))
80         matrix = expm(matrix)
            matrix = reshape(matrix,(dim,1,1))
82         value[:,countx,county] = matrix[:,0,0]
            county = county + 1
84         countx = countx + 1
    return value

```

## A.6 Drawing

Este módulo contiene las funciones de graficación basadas en la interface de matplotlib.

Código A.6: Módulo Drawing

```
1 #!/usr/bin/python
   ## module Drawing
3 # -*- coding: utf8 -*-
   --all--=[ 'surface', 'surfaceM' ]
5 --author--="Edward_Y._Villegas"
   from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
7 import matplotlib as mp
   import matplotlib.pyplot as plotear
9 from matplotlib import rc
   mp.text.usetex=True
11 #rc('font',**{'family':'sans-serif','sans-serif':['Helvetica']})
   #rc('text', usetex=True)
13 from numpy import *
   def surface(domain, fun, labels):
15 if not (len(domain)==6):
   if len(domain)==4:
17     dx = (domain[1] - domain[0])/20.
       dy = (domain[3] - domain[2])/20.
19 else:
       print "Domain should be have 4 or 6 elements," \
21         "but it have", len(domain)
       return
23 else:
       dx = domain[4]*1.
25     dy = domain[5]*1.
       xmin = domain[0]*1.
27     xmax = domain[1]*1.
       ymin = domain[2]*1.
29     ymax = domain[3]*1.
       figura=plotear.figure()
31     ejes=Axes3D(figura)
```

```

    ejes.set_xlabel(labels[0])
33  ejes.set_ylabel(labels[1])
    ejes.set_zlabel(labels[2])
35  ejes.set_aspect('equal')
    x=arange(xmin,xmax,dx)
37  y=arange(ymin,ymax,dy)
    x,y = meshgrid(x,y)
39  z=eval(fun)
    ejes.plot_surface(x, y, z, rstride=1, cstride=1, cmap=mp.cm.jet)
41  plt.show()
def surfaceM(domain, Values, labels, path):
43  figura=plt.figure()
    ejes=Axes3D(figura)
45  ejes.set_xlabel(labels[0])
    ejes.set_ylabel(labels[1])
47  ejes.set_zlabel(labels[2])
    ejes.set_aspect('equal')
49  ejes.plot_surface(domain[0],domain[1], Values.real, rstride=1, \
    cstride=1, cmap=mp.cm.jet)
51  plt.savefig(path)
def contourM(domain, values, labels, path):
53  figura = plt.figure()
    plt.contourf(domain[0],domain[1], values.real)
55  plt.xlabel(labels[0])
    plt.ylabel(labels[1])
57  plt.title(labels[2])
    plt.axes().set_aspect('equal', 'datalim')
59  plt.savefig(path)
def CurvaV(v1,v2, labels, path):
61  plt.plot(v1,v2)
    plt.xlabel(labels[0])
63  plt.ylabel(labels[1])
    plt.title(labels[2])
65  plt.savefig(path)

```

## A.6.1 bandstructdrawgraph

Este script es usado para la graficación de la estructura de bandas a partir de la expresión analítica con matplotlib, generando un gráfico de superficie y otro de contorno. Con este script se realizaron los graficos 6.4 y 6.5.

Código A.7: Script bandstructdrawgraph

```
1 from numpy import *
   from Evalmsh import scalarfield
3 from Drawing import surfaceM , contourM

5 lkx = 5.
   lky = 9.
7 a= 100
   kx = linspace(0 ,lkx ,lkx*150)
9 ky = linspace(0 ,lky ,lky*150)
   xygrid = meshgrid(kx,ky)
11 E = scalarfield(xygrid , '2*2.7*sqrt(cos(x[1]*1.47/2)**2+0.25+ ' + \
   cos(x[1]*1.47/2)*cos(sqrt(3)*x[0]*1.47/2)) ')
13 surfaceM(xygrid ,E, [ '$k_{x}$ (1/\AA)$' , '$k_{y}$ (1/\AA)$' , 'E (eV) ' ] \
   , 'Graph_surface.pdf')
15 contourM(xygrid ,E, [ '$k_{x}$ (1/\AA)$' , '$k_{y}$ (1/\AA)$' , 'E (eV) ' ] \
   , 'Graph_contour.pdf')
```