



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Estudio de la paradoja de Klein bidimensional en el contexto de la mecánica cuántica relativista

Jorge Andrés Navarro Giraldo

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, D.C., Colombia
2015

Estudio de la paradoja de Klein bidimensional en el contexto de la mecánica cuántica relativista

Jorge Andrés Navarro Giraldo

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ciencias - Física

Director:
Ph.D., Carlos José Quimbay Herrera

Línea de Investigación:
Física Teórica de Altas Energías
Grupo de Investigación:
Grupo de Campos y Partículas

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, D.C., Colombia
2015

Daniel 2:20-23

Dedicado a mis padres Jorge y Myriam, y a mis hermanos Sergio, Juan José y Estefanía

Agradecimientos

Agradezco profundamente a la Facultad de Ciencias y el Departamento de Física de la Universidad Nacional de Colombia, a sus docentes y estudiantes que me han formado profesional y personalmente durante más de siete años. A mi director Carlos Quimbay, porque sin su consejo profesional el presente documento carecería de la rigurosidad científica necesaria, y sería apenas un pequeño esbozo del largo trabajo realizado. A la dirección académica de la Universidad Nacional de Colombia por beneficiarme de la Beca asistente docente, que me brindó estabilidad y experiencia durante el paso por el posgrado. Y finalmente, a una cantidad innumerable de amigos, los cuales hicieron de estos dos años una de las mejores experiencias de mi vida, y aportaron indirectamente al desarrollo de este trabajo.

Resumen

En la presente tesis de maestría se estudia detalladamente la paradoja de Klein en dos dimensiones dentro del contexto de la mecánica cuántica relativista, para los casos de fermiones masivos que inciden tanto sobre un potencial paso como sobre una barrera de potencial. Se calculan los coeficientes de transmisión y reflexión, determinando cuál es el papel que tiene el espín de los fermiones incidentes y comprobando la validez de la conservación de la probabilidad. Para el caso del potencial paso, se demuestra que la probabilidad se conserva solamente en casos específicos de energía, potencial y ángulo de incidencia. Para la dispersión sobre la barrera de potencial, se estudia la dependencia del coeficiente de transmisión con respecto a la masa del fermión, la altura y el ancho de la barrera; en este caso sí se conserva la probabilidad, en concordancia con lo reportado previamente. Los resultados obtenidos, para el caso de la barrera de potencial, permiten estudiar de forma novedosa la paradoja de Klein en el grafeno monocapa con gap, donde los portadores de carga adquieren una masa efectiva diferente de cero. Con el fin de verificar la consistencia de los coeficientes de transmisión obtenidos, se considera el caso particular de fermiones no masivos, demostrando que el formalismo desarrollado en esta tesis reproduce exitosamente el tunelamiento Klein en grafeno monocapa puro. Para la dispersión en grafeno con gap, se demuestra que en el caso de incidencia normal, el coeficiente de transmisión es diferente de 1, a diferencia de lo que sucede en grafeno monocapa puro, y se demuestra que el gap limita la existencia de ángulos de transmisión máxima.

Índice general

Resumen	IX
1. Introducción	1
2. Marco teórico	7
2.1. Ecuación de Dirac	8
2.2. Paradoja de Klein en una dimensión	11
2.2.1. Potencial paso	11
2.2.2. Potencial barrera	16
2.3. Paradoja de Klein en dos dimensiones	18
2.3.1. Potencial paso	19
2.3.2. Potencial barrera	21
2.4. Descripción de la dinámica de los portadores de carga en el grafeno a partir de la ecuación de Dirac	22
2.4.1. Estructura de red del grafeno y primera zona de Brillouin	23
2.4.2. Modelo de Tight Binding para la estructura de bandas de energía en el grafeno	24
2.4.3. Descripción de los portadores de carga en el grafeno a partir de la ecuación de Dirac sin masa	29
2.4.4. Tunelamiento Klein en grafeno monocapa	32
3. Dispersión en potencial paso	35
3.1. Coeficientes de transmisión y reflexión para el potencial paso	39
3.2. Comportamiento de los coeficientes de reflexión y transmisión en función de la energía y el potencial	40
3.3. Conservación de la probabilidad	44
3.4. Consistencia caso con inversión de espín	47
4. Dispersión en potencial barrera	51
4.1. Coeficientes de reflexión y transmisión para el potencial barrera	55
4.2. Conservación de la probabilidad para el potencial barrera	57
4.3. Consistencia con el caso de inversión de espín	58
5. Tunelamiento Klein en grafeno con gap	61
5.1. Relación de dispersión en el grafeno con gap	61
5.2. Gas de Fermi relativista en dos dimensiones para fermiones masivos	63
5.3. Tunelamiento Klein	64

6. Conclusiones	73
A. Modelo de Tight Binding para obtener la relación de dispersión en el grafeno monocapa	77
A.1. Relación de dispersión en una vecindad de \mathbf{k}_C	83
A.2. Relación de dispersión en el grafeno monocapa en una vecindad de \mathbf{k}_C	86
B. Cálculo de los coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso	87
B.1. Definición de los coeficientes de reflexión y transmisión a partir de la densidad de corriente de probabilidad	87
B.2. Obtención de los coeficientes de transmisión y reflexión a partir de las amplitudes de probabilidad	90
C. Demostración de la no conservación de la probabilidad en el potencial paso	95
D. Cálculo de las amplitudes de probabilidad de reflexión y transmisión en el potencial barrera	97
E. Conservación de la probabilidad en el potencial barrera	103
F. Gas de Fermi relativista en dos dimensiones para fermiones masivos	107
F.1. Partículas libres confinadas en una caja	107
F.2. Energía de Fermi en el gas de fermiones masivos relativista	111
Bibliografía	113

Índice de figuras

2-1.	Esquema de la dispersión unidimensional de fermiones en un potencial paso. Se muestran las funciones de onda asociadas a cada región espacial.	12
2-2.	Comportamiento del coeficiente de reflexión en función del valor del potencial para la dispersión de fermiones en el potencial paso en una dimensión. A la izquierda, Coeficiente de reflexión encontrado a partir de la ecuación 2-37, el cual a partir de $V_0 > E + m$ es mayor que 1. (b) Considerando el cambio de signo de la velocidad de grupo de los fermiones cuando $V_0 > E + m$, el coeficiente de reflexión siempre es menor que 1.	15
2-3.	Esquema de los espectros de energía de la partícula en las regiones $z < 0$ ($V = 0$) y $z \geq 0$ ($V = V_0$) cuando $V_0 > E + m$. En el solapamiento del espectro de energías puede presentarse la creación de pares.	16
2-4.	Esquema de la dispersión unidimensional de fermiones en un potencial barrera. Se muestran las funciones de onda asociadas a cada región espacial.	17
2-5.	Problema de la dispersión de fermiones en un potencial paso permitiendo que la partícula incida con un ángulo ϕ . La región punteada representa la zona en la cual el potencial toma valor V_0	19
2-6.	Estructura cristalina del grafeno, la celda unitaria está definida por $WXYZ$, la cual contiene dos átomos de carbono designados como A y B . Imagen tomada de la referencia [37].	24
2-7.	Estructura de los vecinos más cercanos a un átomo de la red del tipo A . A la izquierda, los vecinos más cercanos entre átomos de tipo A (rojos). A la derecha, los vecinos más cercanos entre los átomos de tipo B (azules). . . .	25
2-8.	A la izquierda, estructura de la red recíproca del grafeno, donde se han mostrado los vectores generadores de la red \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 . El hexágono amarillo representa la primera zona de Brillouin de la red. A la derecha, se ha extendido la primera zona de Brillouin, definiendo algunos puntos importantes sobre ella. Imagen de la derecha tomada de la referencia [37]. . . .	26
2-9.	Comportamiento del coeficiente de transmisión en el grafeno monocapa como función del ángulo de incidencia ϕ , para distintos valores del potencial barrera. En ambos casos, la energía de incidencia corresponde a $E = 80$ meV y el ancho de la barrera es $L = 110$ nm.	33
3-1.	Esquema del problema de potencial paso.	36
3-2.	Coefficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 0.5, 1, 1.5$. La energía de incidencia es $E/m = 3$	42

3-3. Coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 2.5, 3, 3.5$. La energía de incidencia es $E/m = 3$	42
3-4. Coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 2, 3, 4$. La energía de incidencia es $E/m = 3$. Los potenciales se han elegido de tal modo que $V_0 = E - m$, $V_0 = E$ y $V_0 = E + m$. Para el primer y tercer caso, el coeficiente de transmisión es igual a cero para todos los ángulos de incidencia.	43
3-5. Coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 4.5, 5$, y 5.5 . La energía de incidencia es $E/m = 3$	44
3-6. Coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 6, 8$, y 10 . La energía de incidencia es $E/m = 3$. Aquí ya no hay presencia de ángulos críticos debido a que el potencial cumple la condición $V_0 \geq 2E$	44
3-7. Comportamiento de los coeficientes de reflexión, transmisión, y la suma de ambos en función del ángulo de incidencia, para distintos potenciales considerados. En todos los casos la energía de incidencia es $E/m = 3$	46
3-8. Consistencia entre el coeficiente de reflexión calculado en la referencia [13] y el coeficiente de reflexión en la ecuación 3-27. Se muestra la contribución de los fermiones sin inversión de espín $ r_{DL} ^2$ y la contribución de los fermiones que presentan inversión de espín $ r'_{DL} ^2$. Los valores de referencia usados son $V/m = 0,5$ y $E/m = 3$	49
4-1. Esquema del problema de dispersión en el potencial barrera. Se muestran las funciones de onda que luego se definen para resolver el problema.	52
4-2. Coeficiente de transmisión en el potencial tipo barrera en función del ángulo de incidencia ϕ . Los valores de referencia usados son $E/m = 3$, $Lm = 3$ (valores normalizados con respecto a la masa). El coeficiente de transmisión es cero cuando se cumple la condición $p_2 \geq \sqrt{(E - V_0)^2 - m_0^2}$, pero para valores grandes de potencial esta condición no se satisface, debido a ello el coeficiente de transmisión para el potencial $V/m = 6,5$ es distinto de cero para todos los ángulos de incidencia (salvo el caso trivial $\phi = 90^\circ$).	57
4-3. Coeficiente de transmisión en el potencial tipo barrera en función del ángulo de incidencia ϕ para distintos valores de la masa del fermión. Los valores de referencia usados son $E/m = 3$, $Lm = 20$ y $V/m = 30$	58
4-4. Coeficiente de transmisión en el potencial tipo barrera en función del ángulo de incidencia ϕ para distintos valores de ancho de la barrera. Los valores de referencia usados son $E/m = 3$, y $V/m = 30$. Se observa que existe un ángulo para el cual hay transmisión total, independientemente del valor de Lm ; esto se debe a que cada uno de estos anchos es entero.	59
4-5. Consistencia entre los coeficientes de reflexión en el problema con inversión de espín, estudiado en la referencia [13], y los obtenidos en la ecuación (4-23). La suma de la contribución del término sin inversión de espín ($ r_{DL} ^2$), y con inversión de espín ($ r'_{DL} ^2$), denotada por R_{DL} , concuerda con nuestro resultado.	60

- 5-1.** Esquema de la juntura del tipo npn para probar el proceso de dispersión de los portadores de carga en grafeno monocapa con gap. En la parte superior, se definen las regiones del sistema, en las regiones I y III hay una densidad de portadores por unidad de área n_1 negativos, mientras que en la región II hay una densidad n_2 de portadores de carga positivos (huecos). En la parte inferior, se muestra la relación de dispersión hiperbólica en cada región, identificando la energía de Fermi E_F en función de la densidad de portadores n , el gap entre las bandas de valencia y conducción Δ , y el potencial V_0 que corresponde a la suma de las energías de Fermi en cada región. 65
- 5-2.** Coeficiente de transmisión en grafeno con gap considerando que el ancho de la barrera tiene un valor de $L = 100\text{nm}$, la densidad de portadores de carga electrónicos en las regiones I y III es $n_1 = 0,5 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ y la densidad de huecos en la región II es $n_2 = 1 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$. Se consideran las situaciones de grafeno sin gap, y grafeno con gaps de valores $\Delta = 0,040\text{eV}$ y $\Delta = 0,080\text{eV}$, de modo que las masas efectivas de los fermiones en cada sistema son, 0, 20meV y 40meV, respectivamente. Las energías de incidencia son 82.44meV, 64.83meV y 51.63meV, respectivamente, y los potenciales son 199.02meV, 163.11meV y 134.88meV, respectivamente. Los círculos rosados corresponden al coeficiente de transmisión asociado a la amplitud de probabilidad en la ecuación (5-19). 69
- 5-3.** Coeficiente de transmisión en grafeno con gap considerando que el ancho de la barrera tiene un valor de $L = 80\text{nm}$, la densidad de portadores de carga electrónicos en las regiones I y III es $n_1 = 0,5 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ y la densidad de huecos en la región II es $n_2 = 1 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$. De este modo, los valores de masa efectiva de los fermiones, energía de incidencia y potencial son los mismos que los mostrados en la figura 5-2. 70
- 5-4.** Coeficiente de transmisión en grafeno con gap considerando que el ancho de la barrera tiene un valor de $L = 100\text{nm}$, la densidad de portadores de carga electrónicos en las regiones I y III es $n_1 = 0,5 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$ y la densidad de huecos en la región II es $n_2 = 1 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$. Se consideran las situaciones de grafeno sin gap, y grafeno con gaps de valores $\Delta = 0,16\text{eV}$ y $\Delta = 0,26\text{eV}$, de modo que las masas efectivas de los fermiones en cada sistema son, 0, 80meV y 130meV, respectivamente. Las energías de incidencia son 261meV, 193meV y 161meV, respectivamente, y los potenciales son 629meV, 490meV y 422meV, respectivamente. 71
- 5-5.** Coeficiente de transmisión en grafeno con gap considerando que el ancho de la barrera tiene un valor de $L = 80\text{nm}$, la densidad de portadores de carga electrónicos en las regiones I y III es $n_1 = 0,5 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$ y la densidad de huecos en la región II es $n_2 = 1 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$. De este modo, los valores de masa efectiva de los fermiones, energía de incidencia y potencial son los mismos que los mostrados en la figura 5-4. 71

- A-1.** Estructura cristalina del grafeno y vectores posición de los vecinos más cercanos a un átomo dado. La celda unitaria (no representada en la figura) define dos tipos de átomos, llamados tipo *A* (en color rojo) y tipo *B* (en color azul). A la izquierda, los vecinos más cercanos entre átomos de tipo *A*. A la derecha, los vecinos más cercanos entre los átomos de tipo *B*. 78
- A-2.** A la izquierda, estructura de la red recíproca del grafeno, donde se han mostrado los vectores generadores de la red \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 ; el hexágono amarillo representa la primera zona de Brillouin de la red. A la derecha, se ha extendido la primera zona de Brillouin, definiendo algunos puntos importantes sobre ella. Imagen de la derecha tomada de [37]. 82
- F-1.** Esquema del espacio k de dos dimensiones. A la izquierda, se muestra el espacio k y cada nodo de la red (punto de intersección de las líneas punteadas) corresponde a un estado de onda plana, dado por el vector de onda $\mathbf{k} = (2\pi/L)(l_1, l_2)$; la distancia mínima entre dos puntos es $2\pi/L$, y por ello el cuadrado rojo de área $(2\pi/L)^2$ contiene exactamente un estado de onda plana. A la derecha, se muestra que si L es muy grande, la red es muy fina, y por lo tanto en la región roja de área $2\pi k dk$ (dk tiende a cero) el número de estados contenidos allí corresponde a multiplicar dicha área por $1/(2\pi/L)^2$ [41, pag. 147], que es la densidad de estados en el espacio k . 111

Capítulo 1

Introducción

La dinámica cuántica de un electrón relativista está descrita por la ecuación de Dirac, la cual se propuso como una extensión a la ecuación de Schrödinger para el estudio del electrón, pero con el objetivo de que fuera consistente con las transformaciones propias de la relatividad [1]. La formulación de Dirac fue exitosa porque logró reproducir en primera aproximación el espectro del átomo de hidrógeno [1]. Sin embargo, la solución de la ecuación de Dirac condujo al problema de tener estados de energía negativa que no tenían una explicación satisfactoria. En su momento, Dirac propuso que los estados de energía negativa estaban asociados a protones [2], pero la diferencia de masa del protón con respecto a la del electrón invalidaba esta suposición, y por ello posteriormente planteó la existencia de una nueva partícula elemental a la que llamó “antielectrón”, la cual tiene la misma masa pero carga opuesta a la del electrón [3]. Finalmente, el antielectrón (o positrón, como es llamado hoy en día) fue descubierto por Anderson en 1933 [4], lo cual representó un logro definitivo de la ecuación de Dirac.

A partir del formalismo de la ecuación de Dirac, Klein en 1929 estudió la dispersión de electrones que inciden sobre un potencial paso de naturaleza electrostática, y encontró que cuando la altura del potencial es mayor a la energía de incidencia de las partículas, existe una corriente transmitida, la cual persiste incluso cuando el potencial tiende a infinito [5]. Este sorprendente resultado, que no es posible de lograr a partir de la ecuación de Schrödinger no relativista, es conocido como “Paradoja de Klein”. Cabe mencionar que la paradoja de Klein despertó mucho interés en la época en que fue propuesta [6]-[8], y más recientemente, la búsqueda de una explicación satisfactoria acerca del mecanismo físico que la produce también ha sido motivo de gran interés [9]-[21].

Existen varias aproximaciones teóricas que explican por qué se produce el tunelamiento de los electrones en la paradoja de Klein, o tunelamiento Klein. Una de éstas, plantea que debido a la naturaleza misma de la ecuación de Dirac, que describe un espectro de energías negativas asociado a las antipartículas, existe interacción entre el electrón incidente de energía positiva y un electrón de energía negativa en la región de potencial [9, 18], de tal forma que esta interacción hace que se produzca una corriente de partículas transmitida cuando el potencial es mayor que un valor crítico [18]. Otra posible explicación para éste fenómeno, es que debido a la presencia de un potencial crítico, se generan espontáneamente pares electrón-positrón en la región del potencial [7, 8], con lo cual surgen varias hipótesis sobre el efecto que tienen los electrones incidentes sobre la tasa de creación de

pares. Una de estas hipótesis es que la partícula incidente extrae positrones del potencial [19], o que estimula la creación de pares [20]. Otra hipótesis es que el electrón incidente inhibe la tasa de creación espontánea de pares [21]. En cualquier caso, es importante tener en cuenta que se requiere de una corroboración experimental para confirmar la validez de cualquiera de las anteriores explicaciones.

El tunelamiento Klein sobre potenciales paso y barrera ha sido estudiado para los casos unidimensional y bidimensional [5]-[15]. Cuando la trayectoria de los fermiones incidentes forma un ángulo de incidencia igual a cero, se hace referencia a la paradoja de Klein unidimensional, y como ya se mencionó, para el potencial paso se obtiene una corriente transmitida incluso cuando el potencial tiende a infinito [5]. Adicionalmente, para el potencial tipo barrera unidimensional se obtiene un resultado similar, pero ahora se tienen condiciones de resonancia para el momento de la partícula, de tal modo que si esta cantidad física toma ciertos valores, la barrera se vuelve transparente (es decir, todos los electrones son transmitidos) [11]. Por otra parte, cuando el ángulo de incidencia es diferente de cero, se hace referencia a la paradoja de Klein bidimensional, problema que ha sido estudiado tanto para potencial paso como para barrera de potencial [13]-[15]. Concretamente, el tunelamiento de Klein bidimensional para potenciales paso y barrera ha sido estudiado en función del espín de las partículas [13], habiendo sido propuesto que existe inversión de espín de los electrones cuando interactúan con los potenciales [13]. Particularmente, en el caso del tunelamiento Klein bidimensional sobre el potencial barrera, se ha encontrado que existen ángulos críticos para los cuales hay transmisión total [13, 26], lo cual constituye una extensión a la condición de resonancia presente en el caso unidimensional previamente mencionada.

Dentro de los obstáculos que ha tenido la comprobación experimental de la paradoja de Klein en el contexto de la mecánica cuántica relativista, se encuentra principalmente el asociado con la dificultad de lograr las condiciones experimentales para tal fin. Para comenzar, el potencial paso y la barrera de potencial, elementos teóricos esenciales para el planteamiento del problema, son idealizaciones de situaciones físicas reales. Experimentalmente, no es posible lograr que un potencial electrostático aumente abruptamente su valor en un punto determinado del espacio. En la práctica, lo que se tiene es que el potencial aumenta continuamente hasta su valor máximo en una región espacial de dimensión finita. Por esta razón, Bohr conjeturó que si el potencial paso aumentaba desde cero hasta su valor máximo V_0 en una región mayor a la longitud de onda Compton, entonces no debía haber paradoja [17], lo cual luego fue demostrado teóricamente por Sauter [6]. Adicionalmente, para lograr un potencial de valor crítico que llegue a su valor máximo en una región espacial tan pequeña, es necesario contar con una magnitud de campo eléctrico del orden de 10^{19} N/C [17], de tal forma que este campo eléctrico es imposible de producir con los recursos tecnológicos actuales.

Por otra parte, ya hace más de diez años, fue descubierto un nuevo material conocido como grafeno, que en esencia corresponde a un arreglo bidimensional estable de átomos de carbono que forman una estructura cristalina hexagonal. Puesto que desde el punto de vista de los materiales estudiados por la física de la materia condensada, el grafeno presenta un conjunto de propiedades electrónicas nada convencionales, este material se ha constituido en un centro de atención para la comunidad científica teórica y experimental,

especialmente por sus grandes potencialidades de futuras y revolucionarias aplicaciones tecnológicas [23]. Con el descubrimiento del grafeno y sus importantes propiedades [23], se abrió una valiosa oportunidad para la demostración experimental de la paradoja de Klein. Una de sus características más importantes es que en el grafeno monocapa los portadores de carga se comportan como fermiones sin masa, y su dinámica está descrita desde una perspectiva efectiva por la ecuación de Dirac, en vez de la ecuación de Schrödinger [24]. Esto es, los portadores de carga en el grafeno monocapa satisfacen una expresión para la relación de dispersión correspondiente a la de una partícula relativista sin masa, en donde la diferencia se encuentra en que en vez de que la velocidad de propagación de la partícula sea la velocidad de la luz c , la velocidad de propagación de los portadores de carga es la velocidad de Fermi $v_F \simeq c/300$. El anterior hecho ha conducido a que el grafeno sea considerado un escenario natural propio de la física de la materia condensada, donde es posible probar fenómenos predichos por la mecánica cuántica relativista [24][46].

Para entender la importancia de lo planteado en el párrafo anterior, es necesario tener en cuenta que dentro de la física de la materia condensada es relativamente sencillo crear potenciales paso y barrera. Por ejemplo, una juntura conformada por dos materiales dopados tipo p y tipo n (es decir, materiales que aceptan huecos y donan electrones, respectivamente) da lugar a una representación física de un potencial tipo paso, mientras que el potencial tipo barrera está representado por una juntura tipo n-p-n. De este modo, durante los últimos años ha aumentado considerablemente el interés por estudiar la paradoja de Klein en el contexto del grafeno monocapa [25, 26]. En particular, en el contexto del grafeno monocapa, Katsnelson *et al.* realizó un completo estudio teórico sobre el tunelamiento de fermiones no masivos que inciden formando cierto ángulo sobre la barrera de potencial [25], con el objetivo de plantear la posibilidad de la existencia de paradoja de Klein en el material. Con este planteamiento, se dieron las condiciones para la demostración experimental de la paradoja de Klein, a partir de los avances en las investigaciones con el grafeno, y en 2009 se logró confirmar experimentalmente el tunelamiento de fermiones relativistas en potenciales críticos [27, 28], en el caso de portadores de carga no masivos. Por esta razón, la “paradoja de Klein” ya no es una paradoja, sino un efecto relativista demostrado, que se conoce actualmente como tunelamiento Klein.

Con la comprobación experimental de la existencia de tunelamiento Klein en el grafeno [27, 28], se amplió el rango de posibles aplicaciones de este material en potenciales dispositivos tecnológicos [29]. Desde la perspectiva del tunelamiento de Klein, para que lo anterior sea posible, se requiere crear un gap en la estructura de bandas de energía, lo cual implica directamente que los portadores de carga en el caso de grafeno monocapa adquieran una masa efectiva [29, 30]. Sin embargo, hay que tener en cuenta que hasta el momento, un estudio de la paradoja de Klein en el grafeno monocapa con portadores de carga masivos no se ha realizado. Así mismo, no se conoce que desde el punto de vista experimental el tunelamiento de Klein haya sido estudiado para el caso de grafeno monocapa con gap. Los dos anteriores hechos justifican la importancia de realizar un estudio detallado, desde el punto de vista de la mecánica cuántica relativista, de la dispersión de fermiones masivos incidentes sobre los potenciales de tipo paso y tipo barrera, es decir lo anterior justifica la necesidad de realizar un estudio sobre la paradoja de Klein bidimensional y la aplicación de los resultados obtenidos al estudio de este fenómeno en el contexto del grafeno monocapa con gap.

A pesar de que algunos aspectos del tunelamiento Klein en dos dimensiones han sido estudiados en el contexto de la mecánica cuántica relativista [13, 26, 33], los resultados obtenidos hasta el momento no se han aplicado al estudio del tunelamiento Klein para el caso de grafeno monocapa con portadores de carga relativistas masivos. Una posible razón de por qué no se ha estudiado el tunelamiento Klein para portadores de carga masivos en el grafeno monocapa es que para que lo anterior sea posible se requiere establecer una conexión entre los resultados obtenidos en el contexto de la mecánica cuántica relativista y el problema equivalente en el grafeno con gap, pero para poder realizar esta conexión se debe considerar primero la física de un gas bidimensional de fermiones masivos relativistas. Este último punto, que no debe ser pasado por alto ni ser considerado sin importancia, está justificado por el hecho que la energía de Fermi en el grafeno monocapa con gap ahora depende de la masa efectiva que adquieren los portadores, y es justamente esta energía la que se debe usar para calcular tanto la energía de incidencia de la partícula, como el valor del potencial, en el problema de tunelamiento Klein. Por lo anterior, surge la necesidad de considerar detalladamente el formalismo de un gas de Fermi bidimensional relativista, y de esta forma ahora sí es posible aplicar los resultados obtenidos del estudio de la paradoja de Klein bidimensional en una barrera de potencial, usando el formalismo de la mecánica cuántica relativista, al problema de tunelamiento Klein de los portadores de carga en una juntura n-p-n de grafeno monocapa con gap.

Como ya se mencionó, la predicción de la existencia de la paradoja de Klein en el grafeno monocapa [24] fue confirmada experimentalmente para el caso de portadores de carga no masivos [27, 28]. Sin embargo, hay que tener en cuenta que a partir del crecimiento epitaxial del grafeno sobre un sustrato de otro material, es posible que los portadores de carga en el grafeno monocapa adquieran una masa efectiva [30]. De igual forma, es bien conocido que grafeno monocapa dopado implica el surgimiento de un gap de energía que conlleva a la existencia de portadores de carga masivos [29]. Dado que experimentalmente se conoce la existencia de portadores de carga masivos en el grafeno monocapa, resulta viable e interesante estudiar la paradoja de Klein en el contexto del grafeno monocapa con gap.

En la presente tesis de maestría se estudia detalladamente la paradoja de Klein en dos dimensiones dentro del contexto de la mecánica cuántica relativista, para los casos de fermiones masivos que inciden tanto en un potencial paso como en una barrera de potencial. Para realizar lo anterior, primero se calculan los coeficientes de transmisión y reflexión, determinando cual es el papel que tiene el espín de los fermiones incidentes y comprobando la validez de la conservación de la probabilidad. Específicamente, para el caso del potencial paso, se estudia la dependencia del coeficiente de transmisión con respecto a la masa del fermión y al valor del potencial. Para el caso de la barrera de potencial, se estudia la dependencia del coeficiente de transmisión con respecto a la masa del fermión, la altura y el ancho de la barrera. Luego de ello, se plantea de forma novedosa la aplicación de los resultados obtenidos en la barrera al estudio de la paradoja de Klein en el grafeno monocapa con gap, donde los portadores de carga tienen masa diferente de cero. Para ello, se considera detalladamente el formalismo del gas de Fermi relativista en dos dimensiones para fermiones masivos, lo cual permite encontrar la energía de Fermi en el material como función de la concentración de portadores de carga, lo que en última instancia permitirá

relacionar la energía de incidencia y el potencial, con parámetros que se puedan controlar e xperimentalmente en el grafeno. Una vez aplicados los resultados al caso del grafeno con gap, encontrando los coeficientes de transmisión y reflexión del problema, se verifica la consistencia de los resultados obtenidos al considerar el caso particular de portadores de carga sin masa, es decir se comparan los resultados obtenidos en esta tesis en el caso de tunelamiento de Klein para grafeno monocapa sin gap con los reportados por Katnelson, Novoselov y Geim en el año 2006 relacionados con el tunelamiento Klein de portadores de carga sin masa para grafeno monocapa puro [25].

La estructura del presente documento es la siguiente:

- Primero, en el marco teórico se plasman los desarrollos correspondientes a la paradoja de Klein en una dimensión para potenciales tipo barrera y paso, describiendo los resultados más relevantes e interpretandolos adecuadamente; luego, se plasman los desarrollos concernientes a la paradoja de Klein en dos dimensiones, reproduciendo los trabajos previos [13][15]. Adicionalmente se introducen algunos aspectos teóricos sobre el grafeno, específicamente sobre el formalismo de la aproximación de tight-binding, que permiten explicar como los portadores de carga de este material satisfacen una ecuación de Dirac efectiva, y se aborda la paradoja de Klein en dos dimensiones para el grafeno monocapa puro [25].
- Seguido al marco teórico, se muestra un desarrollo propio para el estudio de la dispersión sobre el potencial paso, encontrando los coeficientes de reflexión y transmisión y analizando su comportamiento en función de la energía de incidencia, la masa de los fermiones y el potencial. Como resultado importante, se encuentra que existen casos donde la probabilidad no se conserva en el sistema, dado que la suma de los coeficientes de reflexión y transmisión no es igual a 1. También se establece la consistencia de nuestros resultados con los reportados previamente para un problema equivalente [13][15], dado así validez al análisis presentado.
- Posteriormente, en el capítulo 4, se estudia la dispersión en el potencial barrera, obteniendo los coeficientes de transmisión y reflexión, y analizando su comportamiento en función de la energía de incidencia, la masa de los fermiones y el ancho y alto de la barrera. Se demuestra que existen ángulos de incidencia para los cuales la barrera es transparente (es decir, el coeficiente de transmisión es igual a uno), en concordancia con lo reportado previamente [13][25]; además, para este caso se demuestra que sí se conserva la probabilidad [15].
- Finalmente, en el capítulo 5, se presenta detalladamente el formalismo necesario para aplicar los resultados de la barrera de potencial en un problema equivalente en el grafeno con gap. Para ello se desarrolla el formalismo del gas de fermiones relativistas en dos dimensiones, encontrando la energía de Fermi en el material como función de la densidad de portadores de carga. Con el desarrollo presentado, es posible conectar el problema de tunelamiento Klein para el caso de barrera de potencial, abordado a través de la mecánica cuántica relativista, con el tunelamiento de Klein en una juntura del tipo npn en el grafeno con gap, relacionando los conceptos físicos de masa del fermión, energía de incidencia y potencial, con el gap en el material, la energía de Fermi y la densidad de portadores de carga. Éste último

desarrollo es una predicción teórica de como es el tunelamiento Klein en grafeno con gap. En particular, hemos demostrado la fuerte dependencia de los coeficientes de reflexión y transmisión con valor del gap, rescatando los siguientes resultados: Por un lado, en grafeno monocapa sin gap, el coeficiente de transmisión es igual a uno para incidencia normal [25], hecho que refleja la conservación de la quiralidad de los portadores de carga [25], sin embargo lo anterior no se cumple en grafeno con gap, donde el coeficiente de transmisión es distinto de uno para incidencia normal; por otro lado, el gap en el material limita la existencia de ángulos para los cuales hay transmisión total, incluso, valores altos de gap suprimen su aparición. Cabe mencionar que la consistencia teórica de los resultados obtenidos para el tunelamiento Klein en grafeno con gap ha sido obtenida al considerar el caso particular de grafeno sin gap y comparar los resultados obtenidos con los reportados por Katsnelson, Novoselov y Geim en el año 2006 relacionados con el tunelamiento Klein de portadores de carga sin masa para grafeno monocapa puro [25].

Para el lector interesado, se han añadido algunos apéndices donde se profundiza en los cálculos realizados para llegar a los resultados más importantes. En el primero de ellos, se desarrolla completamente el modelo de tight binding para encontrar la estructura de bandas de energía en el grafeno monocapa puro. También se añaden unos apéndices relacionados con la obtención de los coeficientes de transmisión en el potencial paso, las amplitudes de probabilidad en el potencial barrera, y las demostraciones de la no conservación de la probabilidad en el potencial paso, y la conservación de la probabilidad en el potencial barrera. Para finalizar, se añaden todos los cálculos correspondientes a la obtención de la energía de Fermi como función de la densidad de portadores de carga para un gas bidimensional de fermiones relativistas.

Capítulo 2

Marco teórico

Los fenómenos de la mecánica cuántica y de la relatividad frecuentemente ponen a prueba nuestro entendimiento clásico de la naturaleza. Poco a poco, a medida que se demuestran las predicciones de éstas áreas de las ciencias y sus implicaciones, nuestra percepción del mundo cambia a favor de los nuevos resultados, aunque en principio vayan en contra de nuestra intuición.

Uno de los problemas que sirve como ejemplo de las anteriores afirmaciones es el estudio de la transmisión de partículas sobre un obstáculo o una barrera. Si se aborda desde una perspectiva netamente clásica, se obtiene que si la energía con la cual incide la partícula (digamos, una pelota de tenis) es menor a la energía de la barrera, ella *nunca* pasará, mientras que si su energía es mayor, la partícula *siempre* superará la barrera. Ahora, desde el punto de vista de la mecánica cuántica, existe una probabilidad distinta de cero de que la partícula (en este caso podríamos considerarla como un electrón) supere la barrera si su energía de incidencia es menor que la energía del obstáculo. El anterior comportamiento se conoce como “efecto túnel” y es contradictorio si lo observamos desde nuestro entendimiento clásico del universo.

Se puede abordar el problema desde otro punto de vista: Si la partícula ahora es un fermión y se mueve con una velocidad muy grande, es decir, comparable con la velocidad de la luz, se llega a un resultado que no solamente va en contra de nuestro entendimiento clásico, sino también en contra de la lógica basada en la mecánica cuántica no relativista. En este caso, cuando la energía de la barrera es mayor que la energía de incidencia de la partícula, existe la posibilidad de que las partículas superen o traspasen el obstáculo, incluso cuando el potencial tiende a infinito. El anterior resultado se denomina “paradoja de Klein”, y fue obtenido por Klein en 1929 al estudiar la transmisión de electrones sobre un potencial paso electrostático usando el formalismo de la ecuación de Dirac [5], y es el problema que se estudia a fondo en la presente tesis de maestría.

En el presente capítulo se desarrolla el problema de la dispersión de electrones sobre un potencial paso y sobre una barrera de potencial, obteniendo los coeficientes de transmisión y reflexión en cada caso y mostrando cómo a partir de ellos se llega a la paradoja de Klein, de tal forma que para cada uno de los casos se plantea una explicación del fenómeno. Al final del capítulo, se explica por qué el problema puede ser aplicado al grafeno, justificando así el estudio desde un punto de vista experimental.

2.1. Ecuación de Dirac

La ecuación de Dirac nació de la necesidad de plantear una extensión a la ecuación de Schrödinger que fuera covariante bajo transformaciones de Lorentz. El hamiltoniano de Dirac es [1]

$$H = \boldsymbol{\alpha} \cdot c\mathbf{p} + \beta mc^2, \quad (2-1)$$

el cual describe un fermión libre de espín $1/2$, donde c es la velocidad de la luz, mc^2 es la energía en reposo del fermión, \mathbf{p} es el operador de momento lineal, β y $\boldsymbol{\alpha}$ son matrices en 4×4 dimensiones que corresponden a

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad (2-2)$$

siendo 0 y 1 las matrices nula e identidad en 2×2 dimensiones, respectivamente, y σ_i ($i = 1, 2, 3$) las matrices de Pauli dadas por

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2-3)$$

La ecuación de Dirac en representación de coordenadas, libre de potenciales externos es

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -i\hbar c \left[\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) + \beta mc^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2-4)$$

la cual describe un electrón en el espacio libre. Al solucionar la ecuación de Dirac, se obtienen dos autovalores de energía dados por

$$E_+ = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}, \quad E_- = -\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}, \quad (2-5)$$

mientras que los autoestados del hamiltoniano se escriben como

$$\Psi^{(\uparrow,+)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_3}{E_+ + mc^2} \\ \frac{cp_1 + icp_2}{E_+ + mc^2} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - E_+ t)}, \quad (2-6)$$

$$\Psi^{(\downarrow,+)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{cp_1 - icp_2}{E_+ + mc^2} \\ \frac{-cp_3}{E_+ + mc^2} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - E_+ t)}, \quad (2-7)$$

$$\Psi^{(\uparrow,-)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \frac{cp_3}{E_- - mc^2} \\ \frac{cp_1 + icp_2}{E_- - mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - E_- t)}, \quad (2-8)$$

$$\Psi^{(\downarrow,-)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \frac{cp_1 - icp_2}{E_- - mc^2} \\ \frac{-cp_3}{E_- - mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - E_- t)}, \quad (2-9)$$

donde los superíndices + y - representan que las funciones de onda con autovalores de energía E_+ y E_- , respectivamente. Físicamente, se interpreta que las soluciones de energía negativa, correspondientes a E_- , representan antipartículas [9]. Como se observa, estos autoestados son degenerados con respecto a cada autovalor de energía, esto se debe a que ellos son también autoestados del operador helicidad, definido como

$$\Lambda = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \cdot \frac{\mathbf{p}}{p}. \quad (2-10)$$

La helicidad se interpreta como la proyección del espín de la partícula en la dirección del momento [9]. Este operador de helicidad conmuta tanto con el operador hamiltoniano como con el operador de momento lineal, y por ende estos tres operadores pueden ser diagonalizados simultáneamente [9]. Así, las funciones de onda representadas en las ecuaciones (2-6), (2-8) son autoestados de Λ con autovalor $\hbar/2$ y por ende tienen proyección de espín paralela a la dirección del momento (por ello se les asigna el símbolo \uparrow), mientras que las funciones de onda de las ecuaciones (2-7) y (2-9) tienen asociado el autovalor $-\hbar/2$, y su espín está proyectado en dirección antiparalela al momento. De este modo se obtienen cuatro soluciones linealmente independientes para la ecuación de Dirac.

Vale la pena tener en cuenta que en el caso de un fermión en reposo, las funciones de onda que lo describen son [9, pag. 120]

$$\Psi^{(\uparrow,+)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)t}, \quad (2-11)$$

$$\Psi^{(\downarrow,+)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)t}, \quad (2-12)$$

$$\Psi^{(\uparrow,-)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{+i\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)t}, \quad (2-13)$$

$$\Psi^{(\pm, -)}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{+i\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)t}. \quad (2-14)$$

Donde ahora estas funciones de onda son autoestados del operador de espín Σ_z en lugar del operador de helicidad. El operador de la proyección de espín en el eje z, en representación de 4×4 dimensiones, es

$$\Sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2-15)$$

Por otro lado, es posible definir una relación de conservación de la probabilidad para la ecuación de Dirac, definiendo la densidad de probabilidad del siguiente modo [9][10]

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2-16)$$

la cual es definida positiva. La densidad de corriente de probabilidad corresponde entonces a [9][10]

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = c\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\boldsymbol{\alpha}\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2-17)$$

de modo que se cumple la siguiente condición de conservación [9][10]

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (2-18)$$

A partir de la densidad de corriente de probabilidad se representa una corriente de partículas, lo cual será muy útil más adelante porque a partir de ella se definen los coeficientes de transmisión y reflexión en los problemas estudiados. Con esto en mente, si se toma, en un problema de dispersión cualquiera, que las funciones de onda Ψ_i , Ψ_r , y Ψ_t corresponden a las ondas incidentes, reflejadas y transmitidas, respectivamente, los coeficientes de reflexión y transmisión se definen como [9]

$$R = \left| \frac{\mathbf{j}_r \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\mathbf{j}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}} \right|, \quad T = \left| \frac{\mathbf{j}_t \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\mathbf{j}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}} \right|, \quad (2-19)$$

donde $\mathbf{j}_i = c\Psi_i^\dagger\boldsymbol{\alpha}\Psi_i$ representa la corriente de probabilidad asociada a las partículas incidentes, similarmente para \mathbf{j}_r y \mathbf{j}_t , y $\hat{\mathbf{n}}$ corresponde al vector normal a la superficie sobre la cual se dispersan los fermiones. Esto quiere decir que la componente normal de la densidad de corriente de probabilidad es conservada.

Hasta ahora todo el análisis se ha realizado para el caso en el cual la ecuación de Dirac representa partículas libres, en ausencia de interacción con fuerzas externas. A continuación se muestra cómo cambia la ecuación de Dirac al considerar que el fermión se encuentra en presencia de un campo electromagnético externo. Cuando se introduce una interacción de naturaleza electromagnética al problema, representada por el cuadripotencial

$$A^\mu = \left(\frac{\Phi(\mathbf{r}, t)}{c}, \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right), \quad (2-20)$$

con $\Phi(\mathbf{r}, t)$ el potencial electromagnético y $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ el potencial vectorial magnético, la ecuación de Dirac cambia según el acoplamiento minimal, es decir el cuádrimomento del sistema se modifica como

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - eA^\mu, \quad (2-21)$$

siendo e la carga eléctrica del fermión. De este modo, la ecuación de Dirac cambia a [1]

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = [\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\hbar c \nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) + \beta mc^2] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2-22)$$

Como los potenciales que se van a trabajar son electrostáticos ($\mathbf{A} = 0$ y Φ no depende del tiempo), la ecuación de Dirac ahora tiene la forma

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = (-\boldsymbol{\alpha} \cdot i\hbar c \nabla + \beta mc^2) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2-23)$$

donde se ha definido $V(\mathbf{r}) = e\Phi(\mathbf{r})$. En el problema de la paradoja de Klein este potencial es simplificado aún más, dado que solo se considera el problema en una y dos dimensiones, y es un paso de potencial o una barrera de potencial.

2.2. Paradoja de Klein en una dimensión

Para comenzar el estudio de la paradoja de Klein se presenta el problema de la dispersión de fermiones de Dirac que inciden en potenciales del tipo paso y barrera, donde el ángulo de incidencia es 0. Al obtener los coeficientes de transmisión y reflexión para cada caso, se obtiene que existe una corriente de fermiones transmitida cuando el potencial tiende a infinito, hecho que no se observa estudiando el problema desde una perspectiva no relativista; este fenómeno es conocido como *la paradoja de Klein* [5], y su interpretación se presenta más adelante bajo distintos contextos.

2.2.1. Potencial paso

En esta sección se calculan los coeficientes de transmisión y reflexión para una corriente de fermiones (o particularmente electrones) que inciden sobre un potencial paso electrostático de la siguiente forma

$$V(z) = \begin{cases} 0, & \text{si } z < 0 \text{ (Región I),} \\ V_0, & \text{si } z \geq 0 \text{ (Región II).} \end{cases} \quad (2-24)$$

De este modo, para la región I la ecuación de Dirac es la ecuación libre (2-4), que sin embargo, como el movimiento de la partícula se restringe a solamente una dimensión, se tiene que (a partir de ahora se consideran unidades naturales $\hbar = c = 1$)

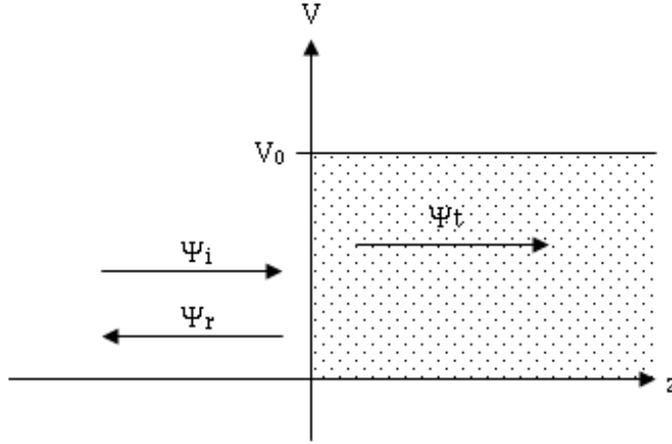


Figura 2-1: Esquema de la dispersión unidimensional de fermiones en un potencial paso. Se muestran las funciones de onda asociadas a cada región espacial.

$$i \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial t} = -i\alpha_3 \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial z} + \beta m \Psi(z, t). \quad (2-25)$$

Por otro lado, en la región II la ecuación de Dirac toma la forma

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - V_0 \right) \Psi(z, t) = -i\alpha_3 \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial z} + \beta m \Psi(z, t). \quad (2-26)$$

Esto define las funciones de onda para para ambas regiones, así que en la región I la solución a la ecuación de Dirac corresponde a la siguiente función de onda [9][10]

$$\Psi_I(z, t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ p \\ E + m \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(zp - Et)} + r \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -p \\ E + m \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(-zp - Et)}. \quad (2-27)$$

En la función de onda anterior se ha considerando una solución de la forma (2-6), es decir, una solución de energía positiva y helicidad paralela al momento. El primer término representa la onda incidente, la cual tiene un momento lineal $\mathbf{p} = (0, 0, p)$, con $p = \sqrt{E^2 - m^2}$, mientras que el segundo término representa la onda reflejada con momento $\mathbf{p} = (0, 0, -p)$, y tiene asociado el factor de normalización r . No es necesario considerar funciones de onda de helicidad negativa, puesto que no hay inversión de helicidad por la interacción con el potencial [13]. Por otro lado, la función de onda en la región de potencial corresponde a [9][10]

$$\Psi_I(z, t) = \tilde{t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ q \\ E - V_0 + m \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(zq - Et)}, \quad (2-28)$$

la cual está asociada a la partícula transmitida con momento lineal $\mathbf{q} = (0, 0, q)$, donde el momento de la partícula en la región II se relaciona con su energía E según $q = \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2}$ [5]. El factor de normalización se define como \tilde{t} para que no haya ambigüedad con el parámetro temporal t .

El problema se soluciona considerando la condición de continuidad para las funciones de onda en $z = 0$, y de allí se obtienen las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} 1 + r &= \tilde{t}, \\ \frac{p}{E + m_0}(1 - r) &= \frac{q}{E - V_0 + m} \tilde{t}. \end{aligned} \quad (2-29)$$

Solucionando el sistema de ecuaciones se comprueba que las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} son [9]

$$r = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}, \quad (2-30)$$

$$\tilde{t} = \frac{2}{1 + \gamma}, \quad (2-31)$$

donde se ha definido

$$\gamma = \frac{q}{p} \frac{E + m}{E - V_0 + m} = \frac{\sqrt{(E - V_0)^2 - m^2}}{\sqrt{E^2 - m^2}} \frac{E + m}{E - V_0 + m}. \quad (2-32)$$

Los coeficientes r y \tilde{t} no corresponden precisamente a los coeficientes de reflexión y transmisión. Para hallar los verdaderos coeficientes de transmisión y reflexión usamos su definición a partir de la densidad de corriente de probabilidad mostrada en la ecuación (2-19), de lo cual se obtiene que [9]

$$R = |r|^2 = \left| \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \right|^2, \quad (2-33)$$

$$T = |\gamma| |\tilde{t}|^2 = \frac{4|\gamma|}{|1 + \gamma|^2}, \quad (2-34)$$

de modo que haciendo un análisis sobre el comportamiento de γ para distintos valores de E , V_0 y m es posible describir el comportamiento de R y T . Existen tres distintas regiones de energía y potencial para las cuales γ cumple las siguientes condiciones

- $E - m \leq V_0$. En este caso, γ toma un valor real y positivo: $|\gamma| = \gamma$, y debido a ello se obtienen los siguientes coeficientes de transmisión y reflexión [9]

$$R = \frac{(1 - \gamma)^2}{(1 + \gamma)^2}, \quad T = \frac{4\gamma}{(1 + \gamma)^2}, \quad (2-35)$$

y por ende se comprueba que $R + T = 1$, como era de esperarse.

- $E - m < V_0 < E + m$. En esta región de potencial el momento $q = \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2}$ toma un valor imaginario, por lo cual $\gamma = ig$ con $g = |\gamma|$. Así, los coeficientes de transmisión y reflexión cambian a

$$R = \left| \frac{1 - ig}{1 + ig} \right|^2 = 1, \quad T = \frac{4g}{|1 + ig|^2} = \frac{4g}{1 + g^2}. \quad (2-36)$$

Así, todos los fermiones son reflejados y además existe una corriente transmitida de valor distinto a cero. Lo anterior constituye por sí solo un resultado contradictorio.

- $E + m \leq V_0$. Ahora γ vuelve a tomar valores reales, sin embargo es una cantidad negativa debido al término del denominador $E - V_0 + m$. Entonces, si se escribe $\gamma = -g$, con $g = |\gamma|$ se llega al siguiente resultado

$$R = \frac{(1 + g)^2}{(1 - g)^2}, \quad T = \frac{4g}{(1 - g)^2}, \quad (2-37)$$

lo cual implica que R es mayor a 1, y que además T es distinto de cero, sin embargo se cumple que $R - T = 1$.

El hecho que $R > 1$ se conoce como “la paradoja de Klein”, debido a que es un resultado que se escapa de nuestra visión clásica y no tiene correspondencia no relativista bajo el formalismo de la ecuación de Schrödinger. En éste resultado intervienen varios factores, tal como que el hecho de que el potencial se incremente drásticamente desde 0 hasta V_0 en un intervalo espacial muy pequeño, es decir, mucho más pequeño que la longitud de onda Compton del electrón \hbar/mc , hace que términos de *Zitterbewegung** sean apreciables en la densidad de corriente [10, pag. 40]. De hecho, Sauter demostró que si el potencial incrementaba suavemente desde 0 hasta V_0 en una región espacial mayor que la longitud de onda Compton del electrón, no se obtenía un coeficiente de reflexión mayor que 1 [6].

*movimiento vibratorio de un fermión con respecto a su trayectoria clásica, con velocidad igual a la velocidad de la luz, debido a interacciones entre estados de energía positiva y negativa [9].

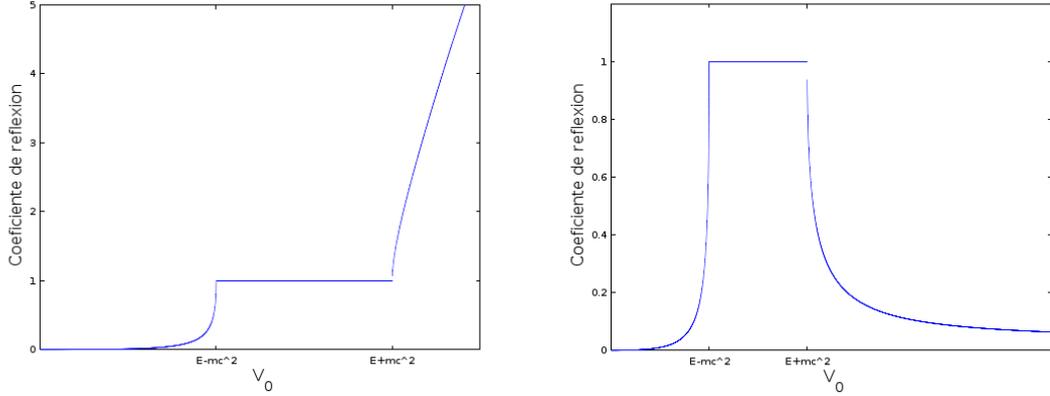


Figura 2-2: Comportamiento del coeficiente de reflexión en función del valor del potencial para la dispersión de fermiones en el potencial paso en una dimensión. A la izquierda, Coeficiente de reflexión encontrado a partir de la ecuación 2-37, el cual a partir de $V_0 > E + m$ es mayor que 1. (b) Considerando el cambio de signo de la velocidad de grupo de los fermiones cuando $V_0 > E + m$, el coeficiente de reflexión siempre es menor que 1.

Adicionalmente, como la ecuación de Dirac permite soluciones de energía negativa de tal modo que $E < -m$, se requiere que todos estos estados estén ocupados con electrones [9, pag. 331]. Lo anterior permite interpretar que cuando el potencial V_0 es mayor a $E + m$, el espectro continuo de energía positivo de la región I se solapa con el espectro continuo de energías negativas de la región II [9, pag. 331], permitiendo que los electrones incidentes interactúen con el vacío de la región II (o sea, electrones que ocupan los estados de energía negativa) y así generando lo que se produce como “creación espontánea de pares” partícula-antipartícula [12][21], haciendo posible que $R > 1$. El fenómeno anteriormente descrito se entiende como “creación de par electrón-positrón” y está relacionado con el decaimiento del vacío en presencia de campos supercríticos [9, pag. 332].

Otra interpretación del problema se hace a partir de considerar la velocidad de grupo del paquete de ondas en la región de interacción (es decir, donde $z \geq 0$). La velocidad de grupo en esta región está dada por

$$v_{\text{grupo}} = \frac{\partial E}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial q} \left(-\sqrt{q^2 + m^2} + V_0 \right) = \frac{q}{E - V_0}, \quad (2-38)$$

por lo cual, si V_0 es mayor a la energía de la partícula incidente, la velocidad de grupo del paquete de ondas en esa región es negativa, es decir es como si el paquete de ondas viniera desde $z \rightarrow -\infty$, lo cual por las condiciones iniciales del problema no es permitido [5]. Por ello, se exige que en esta región el momento q sea negativo cuando $V_0 > E$ para que la velocidad del paquete de onda sea positiva [5]. La condición anterior hace que que el coeficiente de reflexión sea de nuevo menor a 1 cuando $E + m \leq V_0$, de modo que se cumpla la relación de conservación de probabilidad $R + T = 1$. Sin embargo, aunque ya se ha evitado el problema de $R > 1$, emerge un resultado que no se observa estudiando el problema desde un punto de vista no relativista. Consideremos el límite del coeficiente de reflexión R cuando el potencial tiende a infinito, evaluando este límite se obtiene que

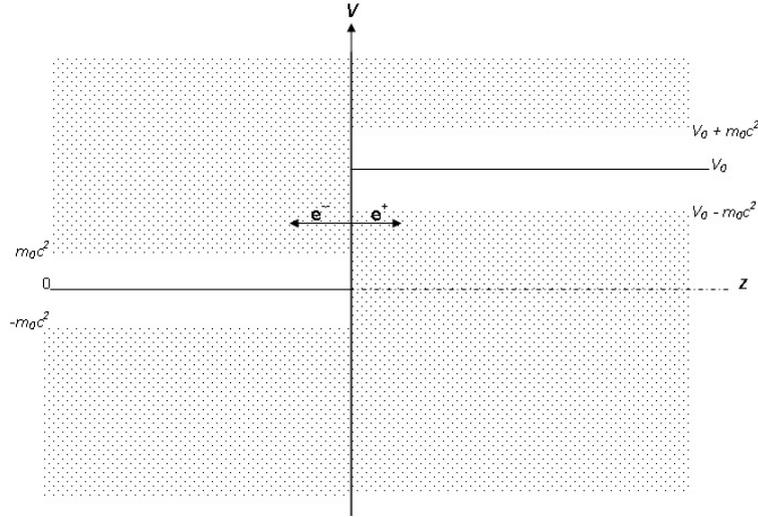


Figura 2-3: Esquema de los espectros de energía de la partícula en las regiones $z < 0$ ($V = 0$) y $z \geq 0$ ($V = V_0$) cuando $V_0 > E + m$. En el solapamiento del espectro de energías puede presentarse la creación de pares.

$$R_{(V_0 \rightarrow \infty)} = \frac{E - p}{E + p}, \quad (2-39)$$

el cual es distinto de 1. Análogamente, evaluando el coeficiente de transmisión se llega a

$$T_{(V_0 \rightarrow \infty)} = \frac{2p}{E + p}. \quad (2-40)$$

Por lo tanto, existe una corriente de partículas transmitida *incluso* cuando el potencial tiende a infinito. Como ya se mencionó, el anterior resultado no es obtenido en la mecánica cuántica no relativista y por ende se entiende de nuevo como “paradoja de Klein” o como “tunelamiento Klein”, que es la forma como se conoce actualmente a éste resultado [17][18]. La explicación al anterior fenómeno se da también a partir de entender la ecuación de Dirac como una ecuación que describe un sistema de muchos cuerpos, la cual describe partículas como antipartículas y por ello existe la posibilidad de creación de pares en la región de potencial.

2.2.2. Potencial barrera

Ahora se estudiará el problema de la transmisión de fermiones sobre un potencial tipo barrera. La forma del potencial es

$$V(z) = \begin{cases} 0, & \text{si } z < 0, \\ V_0, & \text{si } 0 \leq z \leq L, \\ 0, & \text{si } L < z. \end{cases} \quad (2-41)$$

De la misma forma que para el potencial paso, se definen las funciones de onda en cada región espacial definida por la barrera. En $z < 0$ la función de onda toma la forma

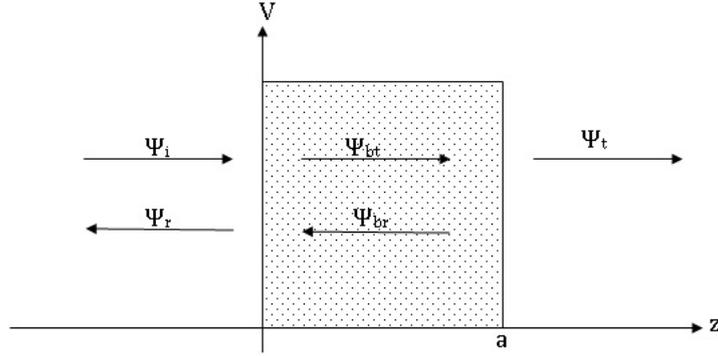


Figura 2-4: Esquema de la dispersión unidimensional de fermiones en un potencial barrera. Se muestran las funciones de onda asociadas a cada región espacial.

$$\Psi_I(z, t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ p \\ E + m \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(zp - Et)} + r \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -p \\ E + m \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(-zq - Et)}. \quad (2-42)$$

Similarmente, en la región $0 \leq z \leq L$ la función de onda es,

$$\Psi_{II}(z, t) = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ q \\ E - V_0 + m_0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(zq - Et)} + b \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -q \\ E - V_0 + m_0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(-zq - Et)}, \quad (2-43)$$

donde el primer término de la sumatoria representa la función de onda transmitida en $z = 0$, mientras que el segundo término es la función de onda reflejada en $z = L$. Finalmente, la función de onda en la última región es

$$\Psi_{III}(z, t) = \tilde{t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ p \\ E + m_0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(zp - Et)}. \quad (2-44)$$

De nuevo, para obtener los coeficientes de transmisión y reflexión se imponen las condiciones de continuidad $\Psi_I(z = 0) = \Psi_{II}(z = 0)$, y $\Psi_{II}(z = L) = \Psi_{III}(z = L)$, llegando a las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} 1 + r &= a + b, \\ \frac{p}{E + m} (1 - r) &= \frac{q}{E + m - V_0} (a - b), \\ ae^{iqL} + be^{-iqL} &= \tilde{t}e^{ipL}, \\ \frac{qe^{iqL}}{E - V_0 + m} a - \frac{qe^{-iqL}}{E - V_0 + m} b &= \frac{pe^{ipL}}{E + m} \tilde{t}. \end{aligned} \quad (2-45)$$

Una vez se soluciona el anterior sistema de ecuaciones se llega a

$$r = \frac{2i(q'^2 - p'^2) \sin(qa)}{4q'p' \cos(qa) - 2i(q'^2 + p'^2) \sin(qa)}, \quad (2-46)$$

donde se definió

$$p' = \frac{p}{E + m}, \quad (2-47)$$

$$q' = \frac{q}{E - V_0 + m}. \quad (2-48)$$

Calculando los coeficientes de transmisión y reflexión a partir de su definición dada a partir de la densidad de corriente de probabilidad, se obtienen finalmente los siguientes coeficientes de reflexión y transmisión [11]

$$R = |r|^2 = \frac{\left(\frac{mV_0}{pq}\right)^2 \sin^2(qL)}{1 + \left(\frac{mV_0}{pq}\right)^2 \sin^2(qL)}, \quad (2-49)$$

$$T = |\tilde{t}|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{mV_0}{pq}\right)^2 \sin^2(qL)}. \quad (2-50)$$

Un resultado interesante obtenido a partir de las anteriores expresiones es que se llega a condiciones de resonancia para las cuales la barrera se vuelve transparente, esto es, hay transmisión total de fermiones cuando $qL = n\pi$, con n un número entero [11]. A diferencia de lo sucedido en el problema de potencial paso, en el potencial de barrera si se cumple la conservación de la norma $R + T = 1$ para todos los valores de energía y potencial, sin embargo esto no quiere decir que para este problema no haya paradoja de Klein. El límite del coeficiente de transmisión cuando el potencial es mucho más grande que la energía de incidencia es [11]

$$T_{(V_0 \gg E)} = 1 - \frac{m^2}{E^2 - m^2} \sin^2(qL), \quad (2-51)$$

de modo que, incluso cuando el potencial tiende a infinito, existe la posibilidad de que la barrera sea transparente si se cumple la condición de resonancia ya descrita. El anterior resultado es de nuevo manifestación de la paradoja de Klein, y se explica del mismo modo a como se hizo con el potencial paso. El hecho de que haya conservación de la norma $R + T = 1$, quiere decir que el fenómeno de creación de pares partícula-antipartícula queda confinado en la región $0 \leq z \leq L$, de modo que en las regiones libres de potencial se conserva el número de fermiones.

2.3. Paradoja de Klein en dos dimensiones

Hasta ahora se ha estudiado el caso de la dispersión de fermiones cuando inciden perpendicularmente sobre los potenciales. En esta sección se presentará los coeficientes de transmisión y reflexión en donde las partículas inciden con un ángulo determinado, de

modo que las partículas están restringidas a moverse sobre un plano. De nuevo los potenciales estudiados serán el paso y la barrera. Los resultados que se muestran a continuación son resultado del estudio de los autores De Leo y Rotelli en la referencia [13].

2.3.1. Potencial paso

El potencial paso toma la misma forma que en el problema unidimensional, es decir

$$V(z) = \begin{cases} 0, & \text{si } z < 0, \\ V_0, & \text{si } z \geq 0, \end{cases} \quad (2-52)$$

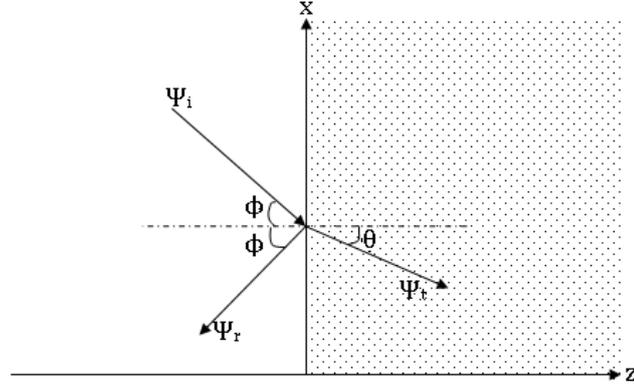


Figura 2-5: Problema de la dispersión de fermiones en un potencial paso permitiendo que la partícula incida con un ángulo ϕ . La región punteada representa la zona en la cual el potencial toma valor V_0 .

con lo cual el potencial solo depende de la coordenada z . En cada región espacial, las funciones de onda toman la siguiente forma

$$\Psi_I(x, z, t) = \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_3}{E+m} \\ \frac{p_1}{E+m} \end{pmatrix} e^{ip_3 z} + r \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{p_3}{E+m} \\ \frac{p_1}{E+m} \end{pmatrix} e^{-ip_3 z} + r' \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_1}{E+m} \\ \frac{p_3}{E+m} \end{pmatrix} e^{-ip_3 z} \right] e^{i(p_1 x - Et)}, \quad (2-53)$$

donde se ha dado la posibilidad de que exista una inversión de espín en las partículas reflejadas debido a la interacción con el potencial. El momento de la partícula incidente es $\mathbf{p} = (p_1, 0, p_3) = (p \sin \phi, 0, p \cos \phi)$, y el de la partícula reflejada es $\mathbf{p} = (p_1, 0, -p_3) = (p \sin \phi, 0, -p \cos \phi)$. En la región $z \geq 0$ la función de onda es

$$\Psi_{II}(x, z, t) = \left[\tilde{t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{q_3}{E - V_0 + m} \\ \frac{q_1}{E - V_0 + m} \end{pmatrix} e^{iq_3 z} + \tilde{t}' \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{q_1}{E - V_0 + m} \\ -\frac{q_3}{E - V_0 + m} \end{pmatrix} e^{iq_3 z} \right] e^{i(q_1 x - Et)}, \quad (2-54)$$

donde de una manera similar el momento lineal de la partícula transmitida es $\mathbf{q} = (q_1, 0, q_3) = (q \sin \theta, 0, q \cos \theta)$. Antes de resolver el problema, haciendo uso de las condiciones de continuidad, es necesario tener en cuenta que como el potencial solo depende de la coordenada z , el potencial no afecta la dirección del eje x y por lo tanto el momento en esa dirección permanece constante en toda la región espacial. Lo anterior quiere decir que $p_2 = q_2$ y por ende se llega al siguiente resultado

$$p \sin \phi = q \sin \theta. \quad (2-55)$$

Ahora, al resolver el problema imponiendo la condición de continuidad $\Psi_I(z = 0) = \Psi_{II}(z = 0)$ se llega a las siguientes soluciones para las amplitudes de probabilidad

$$r = \frac{(p_1^2 + m^2 + mE) V_0}{(E + m)(p_3^2 + p_3 q_3 - V_0 E)}, \quad (2-56)$$

$$\tilde{t} = \frac{p_3^2(E - V_0 + m) + p_3 q_3(E + m)}{(E + m)(p_3^2 + p_3 q_3 - V_0 E)}, \quad (2-57)$$

$$r' = \frac{p_1 p_3 V_0}{(E + m)(p_3^2 + p_3 q_3 - V_0 E)}, \quad (2-58)$$

$$\tilde{t}' = r', \quad (2-59)$$

y calculando los coeficientes de transmisión y reflexión, se obtiene

$$R = \left| \frac{\mathbf{j}_r \cdot \widehat{\mathbf{k}}}{\mathbf{j}_i \cdot \widehat{\mathbf{k}}} \right| = |r|^2 + |r'|^2 = \frac{V_0^2(p_1^2 + m^2)}{(p_3^2 + p_3 q_3 - V_0 E)^2}, \quad (2-60)$$

$$\begin{aligned} T &= \left| \frac{\mathbf{j}_t \cdot \widehat{\mathbf{k}}}{\mathbf{j}_i \cdot \widehat{\mathbf{k}}} \right| = \left| \frac{q_3}{p_3} \right| \frac{E + m}{|E - V_0 + m|} (|\tilde{t}|^2 + |\tilde{t}'|^2) \\ &= \left| \frac{q_3}{p_3} \right| \frac{E + m}{|E - V_0 + m|} \frac{[p_3^2(E - V_0 + m) + p_3 q_3(E + m)]^2 + p_1^2 p_3^2 V_0^2}{(E + m)^2 (p_3^2 + p_3 q_3 - V_0 E)^2}. \end{aligned} \quad (2-61)$$

Un hecho interesante asociado al anterior resultado es que se observa que es posible la inversión de espín de los fermiones cuando interactúan con el potencial. Sin embargo, uno de los objetivos planteados en esta tesis es que es posible abordar el problema de tal forma que no exista esta inversión de espín.

2.3.2. Potencial barrera

Ahora se estudia la dispersión en el potencial barrera. De forma similar al caso anterior, el potencial solamente depende de la coordenada z y toma la misma forma que en el caso unidimensional mostrada en la ecuación 2-41. Definimos ahora las funciones de onda en cada región espacial, para la región $z < 0$

$$\Psi_I(x, z, t) = \left[\begin{array}{c} \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ \frac{p_3}{E+m} \end{array} \right) e^{ip_3z} + r \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ -\frac{p_3}{E+m} \end{array} \right) e^{-ip_3z} + r' \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ \frac{p_1}{E+m} \end{array} \right) e^{-ip_3z} \\ \left(\begin{array}{c} p_1 \\ \frac{p_1}{E+m} \end{array} \right) \end{array} \right] e^{i(p_1x - Et)}, \quad (2-62)$$

donde r es la amplitud de probabilidad asociada a las partículas refejadas en $z = 0$ que no presentan inversión de espín, mientras que r' se asocia a las partículas que si presentan inversión de espín. En la región $0 \leq z \leq L$, la función de onda es

$$\Psi_{II}(x, z, t) = \left[\begin{array}{c} a \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ \frac{q_3}{E - V_0 + m_0} \end{array} \right) e^{iq_3z} + a' \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ \frac{q_1}{E - V_0 + m} \end{array} \right) e^{iq_3z} \\ \left(\begin{array}{c} q_1 \\ \frac{-q_3}{E - V_0 + m} \end{array} \right) \\ + b \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ \frac{-q_3}{E - V_0 + m} \end{array} \right) e^{-iq_3z} + b' \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ \frac{q_1}{E - V_0 + m} \end{array} \right) e^{-iq_3z} \\ \left(\begin{array}{c} q_1 \\ \frac{q_3}{E - V_0 + m} \end{array} \right) \end{array} \right] e^{i(q_1x - Et)}. \quad (2-63)$$

Las funciones de onda que van acompañadas de las amplitudes a y a' representan a las funciones de onda transmitidas en la interfaz $z = 0$, con a la amplitud de probabilidad asociada a las que no presentan inversión de espín con respecto a la función de onda incidente, mientras que a' está asociada a las que si presentan inversión de espín. De una manera similar, las funciones de onda que van acompañadas de las amplitudes b y b' son las funciones de onda reflejadas en la interfaz $z = L$. Por último en la región $z > L$

$$\Psi_{III}(x, z, t) = \left[\begin{array}{c} \tilde{t} \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ \frac{p_3}{E+m} \end{array} \right) e^{ip_3z} + \tilde{t}' \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ \frac{p_1}{E+m} \end{array} \right) e^{ip_3z} \\ \left(\begin{array}{c} p_1 \\ -\frac{p_3}{E+m} \end{array} \right) \end{array} \right] e^{i(p_1x - Et)}. \quad (2-64)$$

En este caso también se cumple el resultado $p_1 = q_1$, debido a que el potencial solo depende de la coordenada z .

Imponiendo la condición de continuidad $\Psi_I(z = 0) = \Psi_{II}(z = 0)$ y $\Psi_{II}(z = L) = \Psi_{III}(z = L)$, se obtienen las siguientes soluciones para las amplitudes de probabilidad

$$r = -i \left(m + \frac{p_1^2}{E + m} \right) V_0 \frac{\sin(q_3 L)}{p_3 q_3 F}, \quad (2-65)$$

$$r' = \frac{p_1 p_3}{E + m} V_0 \frac{\sin(q_3 L)}{p_3 q_3 F}, \quad (2-66)$$

$$\tilde{t} = \frac{e^{-ip_3 L}}{F}, \quad (2-67)$$

$$\tilde{t}' = 0, \quad (2-68)$$

con

$$F = \cos(q_3 L) - i \frac{p_3^2 - EV_0}{p_3 q_3} \sin(q_3 L), \quad (2-69)$$

de tal forma que se llega a que los coeficientes de transmisión y reflexión son

$$\begin{aligned} R &= |r|^2 + |r'|^2 \\ &= \frac{V_0^2 \sin^2(q_3 L)}{(E + m_0)^2} \frac{[m_0(E + m_0) + p_1^2]^2 + p_1^2 p_3^2}{p_3^2 q_3^2 \cos^2(q_3 L) + (EV_0 - p_3^2)^2 \sin^2(q_3 L)}, \quad (2-70) \\ &= \frac{V_0^2 \sin^2(q_3 L) (E^2 - p_3^2)}{p_3^2 q_3^2 \cos^2(q_3 L) + (EV_0 - p_3^2)^2 \sin^2(q_3 L)}, \end{aligned}$$

$$T = |\tilde{t}|^2 = \frac{q_3^2 p_3^2}{p_3^2 q_3^2 \cos^2(q_3 L) + [p_3^2 - EV_0]^2 \sin^2(q_3 L)}. \quad (2-71)$$

Observando el anterior coeficiente de transmisión, es posible observar que se obtiene una condición de resonancia muy similar al caso unidimensional, esto es, para $q_3 L = n\pi$ con n entero, la barrera se vuelve transparente. Calculando el límite del coeficiente de transmisión cuando el potencial es muy grande, se llega a

$$T_{(V_0 \gg E)} = \frac{p_1^2}{p_1^2 \cos^2(q_1 L) + E^2 \sin^2(q_1 L)}, \quad (2-72)$$

de modo que se demuestra que en el problema bidimensional también existe paradoja de Klein.

2.4. Descripción de la dinámica de los portadores de carga en el grafeno a partir de la ecuación de Dirac

El grafeno es un arreglo bidimensional de átomos de carbono organizados en una red hexagonal, la cual se puede ver como un único plano constituyente de una red de grafito[23]. Desde su descubrimiento y caracterización [23] ha llamado mucho la atención por tener

propiedades poco comunes, una de ellas es que la movilidad de los portadores de carga es del orden de $10000\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ [23], considerablemente mayor en comparación a la de semiconductores basados en Silicio, que en general es menor a $1350\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ [35]. La característica del grafeno que más nos interesa estudiar es la que afirma que los portadores de carga se comportan como fermiones no masivos descritos por la ecuación de Dirac. En la presente sección se muestra el desarrollo necesario para obtener la estructura de bandas en el grafeno a partir de la aproximación de tight-binding, y se explica por qué esta estructura de bandas implica que se puedan considerar los portadores de carga como fermiones no masivos descritos por una ecuación de Dirac efectiva.

2.4.1. Estructura de red del grafeno y primera zona de Brillouin

En las siguientes secciones se procede a realizar el desarrollo necesario para encontrar la estructura de las bandas de energía en el grafeno, utilizando el formalismo de la aproximación de Tight-Binding, y se sigue el desarrollo hecho por Wallace en la referencia [37]. Esta aproximación consta de estudiar la interacción de los electrones de conducción en el material solamente con los átomos vecinos más cercanos en la red cristalina, donde dicha red se modela como un potencial periódico que afecta a los portadores de carga. Como primera parte del formalismo, se requiere analizar la estructura de la red del grafeno, y obtener la red recíproca a partir de los vectores primitivos que generan el arreglo bidimensional.

Como ya se mencionó, la estructura cristalina de grafeno es hexagonal, de tal modo que la celda unitaria de la red está constituida por dos átomos de carbono designados como A y B [37] (ver figura 2-6), cuya distancia es $1,42\text{Å}$. Cada conjunto de átomos del tipo A y del tipo B definidos por la celda unitaria forma por si mismos una subred dentro de la estructura hexagonal. Los desplazamientos fundamentales de la red son $\mathbf{a}_1 = \mathbf{AA}'$ y $\mathbf{a}_2 = \mathbf{AA}''$ y su magnitud es $a = \sqrt{3} \times 1,42\text{Å} = 2,46\text{Å}$ [37].

A partir de los vectores de la red primitiva $\mathbf{a}_1 = \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}$ y $\mathbf{a}_2 = -a\hat{j}$, siendo \hat{i} y \hat{j} los vectores unitarios en las direcciones x y y respectivamente, se construye la red recíproca usando las siguientes definiciones para sus vectores primitivos

$$\mathbf{b}_1 = \frac{(\hat{i} \otimes \hat{j} - \hat{j} \otimes \hat{i}) \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\hat{i} \otimes \hat{j} - \hat{j} \otimes \hat{i}) \mathbf{a}_2}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{(\hat{j} \otimes \hat{i} - \hat{i} \otimes \hat{j}) \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\hat{j} \otimes \hat{i} - \hat{i} \otimes \hat{j}) \mathbf{a}_1}, \quad (2-73)$$

donde $\hat{i} \otimes \hat{j}$ representa el producto tensorial entre los vectores unitarios \hat{i} y \hat{j}^\dagger . Para \mathbf{b}_1 se tiene que [37]

[†]El álgebra de este producto es como sigue: $(\hat{i} \otimes \hat{j})\hat{i} = \hat{i}(\hat{j} \cdot \hat{i}) = 0$; $(\hat{i} \otimes \hat{j})\hat{j} = \hat{i}(\hat{j} \cdot \hat{j}) = \hat{i}$.

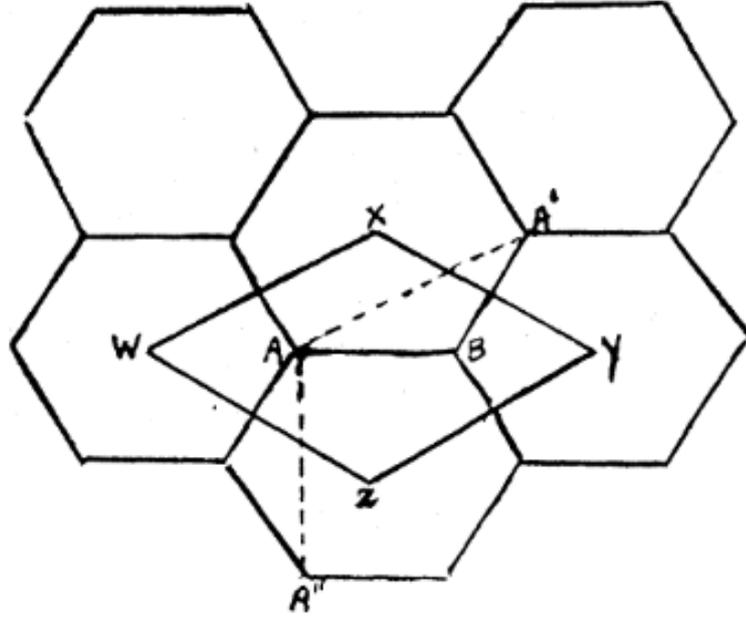


Figura 2-6: Estructura cristalina del grafeno, la celda unitaria está definida por $WXYZ$, la cual contiene dos átomos de carbono designados como A y B . Imagen tomada de la referencia [37].

$$\begin{aligned}
 \mathbf{b}_1 &= \frac{(\hat{i} \otimes \hat{j} - \hat{j} \otimes \hat{i})(-a\hat{j})}{\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}\right) \cdot (\hat{i} \otimes \hat{j} - \hat{j} \otimes \hat{i})(-a\hat{j})} \\
 &= \frac{-a\hat{i}}{\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}\right) \cdot (-a\hat{i})} \\
 &= \frac{2}{\sqrt{3}a}\hat{i}.
 \end{aligned} \tag{2-74}$$

Un procedimiento similar para \mathbf{b}_2 arroja como resultado [37]

$$\mathbf{b}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}a}\hat{i} - \frac{1}{a}\hat{j}. \tag{2-75}$$

La magnitud de \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 es $\frac{2}{\sqrt{3}a}$. Estos vectores primitivos de la red recíproca forman un arreglo hexagonal, cuya primera zona de Brillouin corresponde a un hexágono, tal y como se muestra en la figura 2-8.

2.4.2. Modelo de Tight Binding para la estructura de bandas de energía en el grafeno

En esta sección se aplica directamente el formalismo de la aproximación de Tight-Binding para obtener la relación de dispersión en el grafeno, que no es más sino la energía de un

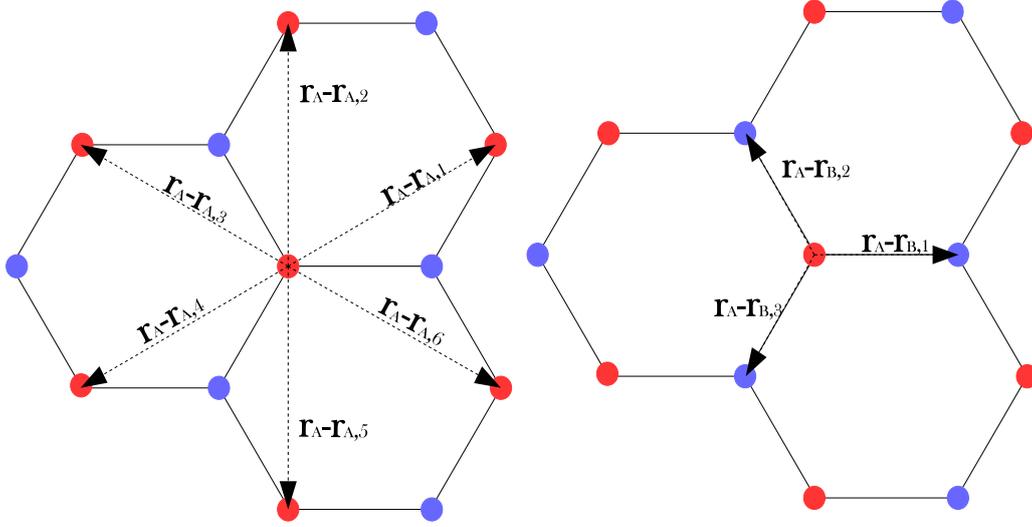


Figura 2-7: Estructura de los vecinos más cercanos a un átomo de la red del tipo A. A la izquierda, los vecinos más cercanos entre átomos de tipo A (rojos). A la derecha, los vecinos más cercanos entre los átomos de tipo B (azules).

portador de carga en función de su vector de onda \mathbf{k} . La identificación de la zona de Brillouin en el grafeno es un importante primer paso para obtener su estructura de bandas de energía, el siguiente paso es encontrar cuales son los electrones ligados al átomo de carbono que contribuyen a la conducción en el material, y estudiar en qué estado cuántico se encuentran con respecto a dicho átomo, omitiendo su interacción con los demás átomos de carbono vecinos.

El átomo de carbono tienen cuatro electrones de valencia. Tres de ellos forman enlace covalente con los tres átomos vecinos de la red [37] y sus funciones de onda son de la forma [37]

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\psi_c(2s) + \sqrt{2} \psi_c(\sigma_i 2p) \right), \quad (2-76)$$

donde $\psi_c(2s)$ es la función de onda del carbono en el estado $2s$ (esto es, con estado energético de excitación $n = 2$ y momento angular $l = 0$), y $\psi_c(\sigma_i 2p)$ es la función de onda en el estado $2p$ (estado energético $n = 2$ y momento angular $l = 1$) cuyos ejes están en las direcciones σ_i que juntan el átomo de carbono con sus tres vecinos en el plano [37]. Estos átomos no toman un rol en la conductividad[37]. El cuarto electrón se considera que está en el estado $2p_z$ (lo cual corresponde al estado energético $n = 2$, y estado de momento angular $l = 1$, $l_z = 0$), su plano nodal es el plano definido por la red, y su eje de simetría perpendicular a él [37].

El electrón en el estado $2p_z$ es el único que aporta a la conducción en el material, por eso el análisis se hará solamente sobre él [37]. Ahora se procederá a resolver el problema a partir de la aproximación de tight-binding. Si $X(r)$ es la función de onda orbital normalizada

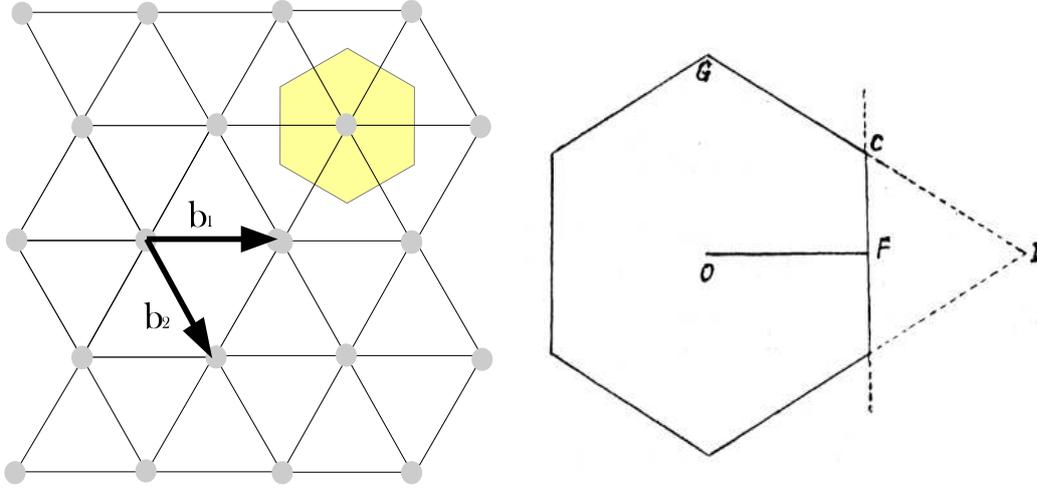


Figura 2-8: A la izquierda, estructura de la red recíproca del grafeno, donde se han mostrado los vectores generadores de la red \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 . El hexágono amarillo representa la primera zona de Brillouin de la red. A la derecha, se ha extendido la primera zona de Brillouin, definiendo algunos puntos importantes sobre ella. Imagen de la derecha tomada de la referencia [37].

para un electrón en el estado $2p_z$, en un solo átomo de carbono aislado, entonces la función de onda en la aproximación de tight-binding es [37]

$$\psi = \phi_1 + \lambda\phi_2, \quad (2-77)$$

con λ un parámetro que se va a reducir usando el principio variacional, y donde

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \sum_A \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_A) X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \\ \phi_2 &= \sum_B \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_B) X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B). \end{aligned} \quad (2-78)$$

Consideramos ahora la ecuación de Schrödinger para toda la red, siendo H el hamiltoniano de la red cristalina y E la energía del electrón en ella

$$H\psi = E\psi. \quad (2-79)$$

Reemplazando la función de onda de la ecuación (2-77) en el anterior hamiltoniano se obtiene que

$$H\phi_1 + \lambda H\phi_2 = E\phi_1 + \lambda E\phi_2. \quad (2-80)$$

Si se multiplica por la izquierda la anterior expresión por ϕ_1^* , y se integra sobre toda la red de grafeno

$$\int \phi_1^* H\phi_1 d\tau + \lambda \int \phi_1^* H\phi_2 d\tau = E \int \phi_1^* \phi_1 d\tau + \lambda E \int \phi_1^* \phi_2 d\tau, \quad (2-81)$$

y haciendo un procedimiento similar, pero esta vez con ϕ_2^* , se llega a

$$\int \phi_2^* H \phi_1 d\tau + \lambda \int \phi_2^* H \phi_2 d\tau = E \int \phi_2^* \phi_1 d\tau + \lambda E \int \phi_2^* \phi_2 d\tau. \quad (2-82)$$

En este punto es importante hacer la siguiente consideración: Se desprecia el solapamiento entre las funciones de onda en el estado p_z para las funciones de onda centradas en diferentes tipos de átomos (sean del tipo A o del tipo B) [37], es decir se asume que

$$\int X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) d\tau = 0. \quad (2-83)$$

Haciendo las definiciones

$$\begin{aligned} H_{11} &= \int \phi_1^* H \phi_1 d\tau, & H_{22} &= \int \phi_2^* H \phi_2 d\tau, \\ H_{12} = H_{21}^* &= \int \phi_1^* H \phi_2 d\tau, & S &= \int \phi_1^* \phi_1 d\tau = \int \phi_2^* \phi_2 d\tau, \end{aligned} \quad (2-84)$$

donde por la simetría de la red de grafeno se tiene que $H_{11} = H_{22}$ [37].

Teniendo en cuenta la relación (2-83), las ecuaciones (2-81) y (2-82) cambian respectivamente a

$$\begin{aligned} H_{11} + \lambda H_{12} &= ES, \\ H_{21} + \lambda H_{11} &= \lambda ES. \end{aligned} \quad (2-85)$$

Con esto realizado, el objetivo ahora es eliminar el parámetro λ de la ecuación anterior, y de este modo obtener el mejor valor para E en esta aproximación [37]. La ecuación 2-85 se puede escribir de forma matricial como

$$\begin{pmatrix} H_{11} - ES & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{11} - ES \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \end{pmatrix} = 0, \quad (2-86)$$

de modo que para que la anterior expresión se cumpla, la matriz 2×2 no debe ser invertible y por lo tanto su determinante debe ser igual a cero. Calculando explícitamente la condición impuesta para este determinante

$$\begin{vmatrix} H_{11} - ES & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{11} - ES \end{vmatrix} = 0, \quad (2-87)$$

se obtiene la siguiente expresión para la energía [37]

$$E = \frac{H_{11} \pm |H_{12}|}{S}. \quad (2-88)$$

Debido a que se desprecia el solapamiento entre las integrales de las funciones de onda para los distintos tipos de átomos en la red, se tiene que $S = N$, siendo N el número de celdas unitarias en toda la red cristalina [37]. Introduciendo los términos

$$H'_{11} = H'_{22} = \frac{H_{11}}{N} = \frac{H_{22}}{N}, \quad H'_{12} = \frac{H_{12}}{N}, \quad (2-89)$$

se obtiene finalmente

$$E = H'_{11} \pm |H'_{12}|. \quad (2-90)$$

El signo negativo del término $\pm|H'_{12}|$ de la ecuación (2-90) se cumple dentro de la zona de Brillouin, mientras que el positivo se cumple fuera de esa región [37]. Esto quiere decir que en la frontera de la zona de Brillouin hay un gap de energía de valor $\Delta E = 2|H'_{12}|$.

Ahora se procede a calcular las cantidades H'_{11} y H'_{12} , a partir de sus definiciones y de las funciones de onda ϕ_1 y ϕ_2 . Se calcula directamente para H'_{11} y H'_{12} [37]

$$\begin{aligned} H'_{11} &= \frac{1}{N} \int \phi_1^* H \phi_1 d\tau \\ &= \frac{1}{N} \int d\tau \left[\sum_{A'} \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{A'}) X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A'}) \right] H \left[\sum_A \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_A) X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) \right] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{A',A} \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_{A'})] \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A'}) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \end{aligned} \quad (2-91)$$

$$\begin{aligned} H'_{12} &= \frac{H_{12}}{N} = \frac{1}{N} \int \phi_1^* H \phi_2 d\tau \\ &= \frac{1}{N} \int d\tau \left[\sum_A \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_A) X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) \right] H \left[\sum_B \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_B) X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) \right] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{A,B} \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A)] \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B). \end{aligned} \quad (2-92)$$

La aproximación de tight binding consta en realizar la sumatoria solamente hasta los vecinos más cercanos para un átomo dado. En la figura **2-7** se muestra la estructura cristalina del grafeno y los átomos vecinos más cercanos a un átomo de la red. En el apéndice A se realizan los cálculos necesarios para obtener los valores de H'_{11} y H'_{12} , los cuales se muestran a continuación

$$H'_{11} = E_0 - 2\gamma'_0 \left[\cos(2\pi a k_y) + 2 \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) \right], \quad (2-93)$$

$$|H'_{12}| = \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos^2(\pi k_y a) + 4 \cos(\pi k_y a) \cos(\sqrt{3}\pi k_x a)}, \quad (2-94)$$

donde se han definido las siguientes cantidades

$$E_0 = \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \quad (2-95)$$

$$-\gamma'_0 = \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,j}) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \quad \text{siendo } j = 1, 2, \dots, 6. \quad (2-96)$$

$$-\gamma_0 = \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{B,j}), \quad \text{Siendo } j = 1, 2, 3. \quad (2-97)$$

En conclusión, la energía de los portadores de carga en función del vector de onda está dada por

$$E = E_0 - 2\gamma'_0 \left[\cos(2\pi a k_y) + 2 \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) \right] \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos^2(\pi k_y a) + 4 \cos(\pi k_y a) \cos(\sqrt{3}\pi k_x a)}. \quad (2-98)$$

Con estos valores encontrados, es posible hallar la energía de los portadores de carga para algunos puntos importantes dentro de la zona de Brillouin, definidos en la figura 2-8. En el apéndice A también se realizan los cálculos necesarios para demostrar que

$$\begin{aligned} E_O &= E_0 - 6\gamma'_0 - 3\gamma_0, \\ E_D &= E_0 - 6\gamma'_0 + 3\gamma_0, \\ E_C &= E_0 + 3\gamma'_0, \\ E_F &= E_0 + 2\gamma'_0 - \gamma_0 \text{ (dentro de la zona de Brillouin),} \\ &= E_0 + 2\gamma'_0 + \gamma_0 \text{ (fuera de la zona de Brillouin).} \end{aligned} \quad (2-99)$$

En este orden de ideas, la energía E_C en una de las esquinas de la zona de Brillouin está libre de gap, al demostrarse que $\Delta E = 2|H'_{12}| = 0$ para los vectores de onda en esa posición. Por este motivo, vale la pena conocer la energía asociada a un vector de onda \mathbf{k} en una vecindad de las esquinas de la zona de Brillouin, definido de la siguiente forma

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_C + \delta\mathbf{k}, \quad (2-100)$$

siendo $\delta\mathbf{k} = \delta k_x \hat{i} + \delta k_y \hat{j}$ una variación pequeña en el vector de onda, tal que $|\delta\mathbf{k}| \ll |\mathbf{k}_C|$. Para conocer la energía asociada con este vector de onda, se expande 2-98 alrededor de \mathbf{k} , llegando al siguiente resultado

$$E - E_C = \pm \sqrt{3}\gamma_0 \pi a |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|. \quad (2-101)$$

Una vez mas, en el apéndice A se demuestra la anterior ecuación. Esta relación de dispersión lineal cerca de las esquinas de la zona de Brillouin es “la característica más distintiva del grafeno, en adición a su naturaleza estrictamente bidimensional” [47]. Manipulando un poco la ecuación (2-101), redefiniendo las cantidades $E \rightarrow E - E_C$, $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{k}_C$, y $\hbar v_F = \sqrt{3}\gamma_0 \pi a$, se obtiene finalmente lo siguiente

$$E = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|, \quad (2-102)$$

donde $v_F = \sqrt{3}\gamma_0 \pi a / \hbar$ representa la velocidad de Fermi de los portadores de carga en el material. Realizando un calculo explícito, conociendo que la distancia entre dos átomos equivalentes de la red es $a = 2,46 \text{ \AA}$, y que $\gamma_0 = 2,5 \text{ eV}$ [47], se estima que $v_F \sim 10^6 \text{ m/s} \sim c/300$, lo cual ha sido comprobado experimentalmente [24]. La relación observada en la expresión (2-102) es análoga a la energía relativista de un fermión no masivo, donde v_F hace las veces de una la “velocidad de la luz efectiva” de los portadores de carga.

2.4.3. Descripción de los portadores de carga en el grafeno a partir de la ecuación de Dirac sin masa

Adicionalmente a la relación de dispersión lineal, hay otro hecho no discutido que permite establecer un vínculo entre la dinámica de los portadores de carga en el grafeno,

y la ecuación de Dirac. Como ya se observó, la estructura cristalina del grafeno tiene dos átomos por celda unitaria, lo que implica que la primera zona de Brillouin en la red recíproca asociada es hexagonal. En esta zona de Brillouin hexagonal hay dos puntos de degeneramiento [48], similares a los puntos A y B de la red directa, que en este caso se denominan K y K'. Estos puntos equivalentes en la zona de Brillouin generan el denominado "degeneramiento de valle", e indican la existencia de un nuevo número cuántico de pseudoespín, análogo al espín del electrón, pero independiente de él [36][47].

Ya se ha mencionado la importancia de la helicidad (proyección del espín en la dirección del momento) en la dinámica de un fermión descrito por la ecuación de Dirac, al ser un observable que es compatible con el hamiltoniano. En este sentido, se define la quiralidad como la proyección del pseudoespín en la dirección del momento [46]

$$\lambda = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{p}}{p}, \quad (2-103)$$

pero esta vez $\boldsymbol{\sigma}$ son las matrices de Pauli en dos dimensiones, y están asociadas al pseudoespín en vez del espín real. De este modo, una ecuación dinámica para los portadores de carga en el grafeno, que tenga en cuenta tanto la relación de dispersión lineal como la naturaleza espinorial, se plantea del siguiente modo [46][47]

$$-i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}), \quad (2-104)$$

que es válida cerca de las esquinas de la zona de Brillouin K y K', con $\nabla = \hat{i}\partial/\partial x + \hat{j}\partial/\partial y$. Esta ecuación es análoga a la ecuación de Dirac en dos dimensiones en el caso de fermiones no masivos, lo que es evidente si se observa la ecuación (2-4) y se omite el término $\partial/\partial z$. Por este motivo, se dice que los portadores de carga en el grafeno se comportan como fermiones de Dirac no masivos cerca de las esquinas de la zona de Brillouin, hecho por el cual las esquinas de la zona de Brillouin se denominan "puntos de Dirac".

En este sentido, un portador de carga libre queda descrito a partir de las siguientes funciones de onda

$$\Psi_{(K,+)}(p_1, p_2) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{v_F p_1 + i v_F p_2}{E_+} \end{pmatrix}, \quad (2-105)$$

$$\Psi_{(K',+)}(p_1, p_2) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{v_F p_1 - i v_F p_2}{E_+} \end{pmatrix}, \quad (2-106)$$

$$\Psi_{(K,-)}(p_1, p_2) = \begin{pmatrix} \frac{v_F p_1 - i v_F p_2}{E_-} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2-107)$$

$$\Psi_{(K',-)}(p_1, p_2) = \begin{pmatrix} \frac{v_F p_1 + i v_F p_2}{E_-} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2-108)$$

Las anteriores funciones de onda son las mismas que las mostradas en las ecuaciones (2-6), (2-7), (2-8) y (2-9), pero en el espacio de momentos y haciendo la correspondencia entre

la helicidad paralela (antiparalela) con el punto de Dirac K (K'). La energía está dada por $E_{\pm} = \pm \hbar v_F k$, y escribiendo los momentos en términos de los vectores de onda k_x y k_y , se tiene que

$$\Psi_{(K,+)}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k_x + ik_y}{k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi_k} \end{pmatrix}, \quad (2-109)$$

$$\Psi_{(K',+)}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k_x - ik_y}{k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\phi_k} \end{pmatrix}, \quad (2-110)$$

$$\Psi_{(K,-)}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} \frac{k_x - ik_y}{-k} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi_k} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2-111)$$

$$\Psi_{(K',-)}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} \frac{k_x + ik_y}{-k} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -e^{i\phi_k} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2-112)$$

En las anteriores ecuaciones se ha definido $\phi_k = \tan^{-1}(k_y/k_x)$, de tal modo que $k_x = k \cos \phi_k$ y $k_y = k \sin \phi_k$. Normalizando las anteriores ecuaciones, se obtiene finalmente

$$\Psi_{(K,+)}(k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi_k} \end{pmatrix}, \quad (2-113)$$

$$\Psi_{(K',+)}(k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\phi_k} \end{pmatrix}, \quad (2-114)$$

$$\Psi_{(K,-)}(k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\phi_k} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2-115)$$

$$\Psi_{(K',-)}(k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{i\phi_k} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2-116)$$

Estas funciones de onda se relacionan con las que se muestran a continuación a partir de una transformación gauge

$$\Psi_{(K,+)}(k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi_k}{2}} \\ e^{i\frac{\phi_k}{2}} \end{pmatrix}, \quad (2-117)$$

$$\Psi_{(K',+)}(k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\phi_k}{2}} \\ e^{-i\frac{\phi_k}{2}} \end{pmatrix}, \quad (2-118)$$

$$\Psi_{(K,-)}(k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi_k}{2}} \\ -e^{i\frac{\phi_k}{2}} \end{pmatrix}, \quad (2-119)$$

$$\Psi_{(K',-)}(k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\phi_k}{2}} \\ -e^{-i\frac{\phi_k}{2}} \end{pmatrix}, \quad (2-120)$$

que es la forma estándar en la que se presentan las funciones de onda libres en la literatura especializada [46][47]. Las soluciones de energía negativa en la ecuación de Dirac

corresponden a huecos en el mar de Dirac [9]. En el grafeno, estos estados están asociados a portadores de carga en la banda de valencia, mientras que los estados de energía positiva están asociados a portadores de carga en la banda de conducción. Así, los estados de energía positiva corresponden a portadores de carga electrónicos, mientras que los estados de energía negativa a huecos [36, pag. 12].

2.4.4. Tunelamiento Klein en grafeno monocapa

Con el formalismo presentado, resulta directo estudiar la paradoja de Klein en el contexto del grafeno monocapa. Se estudia la dispersión de portadores de carga en una barrera de potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x < 0 \text{ (Región I),} \\ V_0, & \text{si } 0 \leq x \leq L \text{ (Región II),} \\ 0 & \text{si } L < x \text{ (Región III).} \end{cases} \quad (2-121)$$

Así, en cada región espacial se deben definir las funciones de onda correspondientes, de una manera similar a como se hizo en la sección 2.3.2. En la región I, la función de onda es [25],

$$\Psi_{\text{I}}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{r}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{i(-k_x x + k_y y)}, \quad (2-122)$$

donde se ha definido $E = \pm \hbar v_F k_F$, con $k_F = k_x \hat{i} + k_y \hat{j}$ el vector de onda de Fermi; $s = \text{sign}(E)$, la función signo de la energía; y $\phi = \tan^{-1}(k_y/k_x)$ el ángulo de incidencia, de tal forma que $k_x = k_F \cos \phi$, $k_y = k_F \sin \phi$.

En la región II, la función de onda es [25]

$$\Psi_{\text{II}}(x, y) = \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s' e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(q_x x + k_y y)} + \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s' e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{i(-q_x x + k_y y)}. \quad (2-123)$$

En esta región espacial, la energía de los portadores de carga corresponde a $E - V_0 = \pm \hbar v_F q$, con q el vector de onda en la región II: $q = q_x \hat{i} + k_y \hat{j}$. Similarmente a la región I, el ángulo refractado corresponde a $\theta = \tan^{-1}(k_y/q_x)$, con $q_x = \sqrt{(E - V_0)^2/v_F^2 - k_y^2}$. Por último, se ha definido $s' = \text{sign}(E - V_0)$.

Finalmente, en la región III la función de onda corresponde a

$$\Psi_{\text{III}}(x, y) = \frac{t}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)}. \quad (2-124)$$

Aplicando condiciones de continuidad, se demuestra que la amplitud de probabilidad de reflexión es [25],

$$r = 2i e^{i\phi} \sin(k'_1 L) \frac{\sin \phi - s s' \sin \theta}{s s' [e^{-i k'_1 L} \cos(\phi + \theta) + e^{i k'_1 L} \cos(\phi - \theta)] - 2i \sin(k'_1 L)}, \quad (2-125)$$

con la cual se llega al siguiente coeficiente de transmisión [25]

$$T = 1 - |r|^2 = \frac{\cos^2 \theta \cos^2 \phi}{[\cos(q_x L) \cos \phi \cos \theta]^2 + \sin^2(q_x L) (1 - s s' \sin \phi \sin \theta)^2}. \quad (2-126)$$

Varios resultados se pueden obtener de este coeficiente de transmisión. Primero, se demuestra que para incidencia normal ($\phi = 0$ y $\theta = 0$) el coeficiente de transmisión es siempre igual a 1, hecho que es una manifestación de la paradoja de Klein [25], y además, porque en el caso no masivo es necesario que se conserve la quiralidad [25]. Por otro lado, si $q_x L = l\pi$, con l un número entero, el coeficiente de transmisión es siempre igual a 1, independientemente del valor de ϕ [25].

Finalmente, para ver explícitamente la aparición del tunelamiento Klein, se efectúa el límite del coeficiente de transmisión cuando el potencial es mucho más grande que la energía de incidencia

$$T_{(V_0 \gg E)} = \frac{\cos^2 \phi}{1 - \cos^2(q_x L) \sin^2 \phi}, \quad (2-127)$$

entonces es evidente que en éste límite el coeficiente de transmisión es no nulo, e incluso puede ser igual a 1 si se cumple la mencionada condición $q_x L = l\pi$.

En la figura 2-9 se muestra el comportamiento del coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia de los portadores de carga, para diferentes valores de energía de incidencia y potencial. En la gráfica se muestra explícitamente algunos de los hechos expuestos: en incidencia normal la transmisión es total, y existen ángulos para los cuales hay transmisión total, según la condición $q_x L = l\pi$, con l entero.

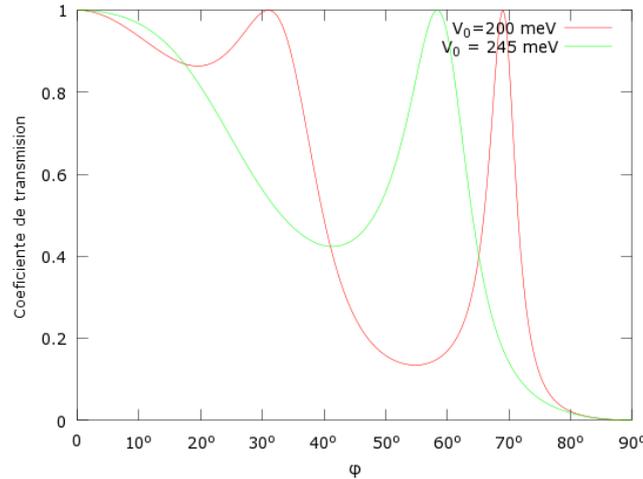


Figura 2-9: Comportamiento del coeficiente de transmisión en el grafeno monocapa como función del ángulo de incidencia ϕ , para distintos valores del potencial barrera. En ambos casos, la energía de incidencia corresponde a $E = 80$ meV y el ancho de la barrera es $L = 110$ nm.

Capítulo 3

Dispersión en potencial paso

En este capítulo se realiza el análisis del problema de la dispersión de fermiones en un potencial paso, considerando que la partícula se propaga en el plano x, y . La diferencia entre este enfoque y el presentado en el capítulo 2 sección 2.3, es que en ese desarrollo el movimiento se lleva a cabo en el plano z, x . Se observa que esta sutil diferencia hace que se obtengan resultados considerablemente diferentes a los mostrados en dicha sección, y en particular, se muestra que para este caso no hay inversión en el espín de los fermiones, sin embargo ambos resultados son equivalentes. Como un hecho interesante se muestra que para este problema no se conserva la probabilidad, es decir se tiene que la suma del coeficiente de transmisión y el coeficiente de reflexión no es igual a la unidad.

El objetivo principal es obtener los coeficientes de reflexión y transmisión a partir de las condiciones de continuidad para la función de onda en las regiones definidas por el potencial. Para ello, se plantean las funciones de onda libres en cada región del espacio, y a partir de condiciones de continuidad sobre ellas, se obtiene las amplitudes de probabilidad de reflexión y transmisión, las cuales permiten calcular directamente los coeficientes deseados. Una vez obtenidos dichos coeficientes de reflexión y transmisión, se estudia su comportamiento como función de la energía de incidencia, el valor del potencial y el valor de la masa del fermión.

El potencial es un paso de potencial que solo depende de la coordenada x , de la siguiente forma

$$e\Phi(x) = V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \text{ (Región I)} \\ V_0 & \text{si } x \geq 0 \text{ (Región II)}. \end{cases} \quad (3-1)$$

Se considera que el potencial es de naturaleza electrostática y que es repulsivo para los electrones (V_0 es positivo). Esto quiere decir que la ecuación de Dirac en representación de coordenadas, que describe la dinámica de la partícula en todas las regiones del espacio, es (se consideran unidades naturales, $c = \hbar = 1$) [9]

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - V(x) \right) \Psi(x, y, t) = \left(-i\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} - i\alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \beta m \right) \Psi(x, y, t). \quad (3-2)$$

Como el potencial no depende ni del tiempo ni de la coordenada y , se plantea una solución para la función de onda en todo el espacio a partir de separación de variables [13],

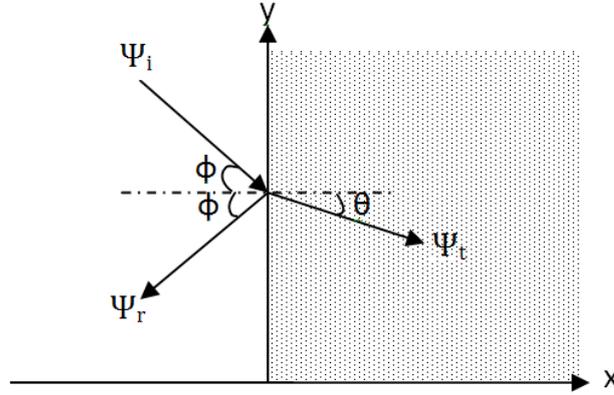


Figura 3-1: Esquema del problema de potencial paso.

$$\Psi(x, y, t) = \psi(x) e^{i(p_2 y - Et)}, \quad (3-3)$$

siendo p_2 la proyección del momento lineal en el eje espacial y , y E la energía de incidencia de la partícula. Esto quiere decir que el momento p_2 , y la energía E permanecen constantes en todas las regiones del espacio [13]. El potencial define dos regiones espaciales: la región I, que corresponde a $x < 0$, en la cual la partícula está descrita por la ecuación de Dirac libre

$$i \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t} = \left(-i\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} - i\alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \beta m \right) \Psi(x, y, t), \quad (3-4)$$

y la región II, correspondiente a $x \geq 0$, donde la partícula está sujeta a un potencial constante V_0

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - V_0 \right) \Psi(x, y, t) = \left(-i\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} - i\alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \beta m \right) \Psi(x, y, t). \quad (3-5)$$

Las anteriores observaciones implican que se debe plantear una función de onda para cada región del espacio de forma separada. La función de onda en la región I corresponde a la superposición de las funciones de onda incidente (Ψ_i), y reflejada (Ψ_r)

$$\begin{aligned} \Psi_I(x, y, t) &= \Psi_i(x, y, t) + \Psi_r(x, y, t), \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} e^{i(xp_1 + yp_2 - Et)} + r \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{-p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} e^{i(-xp_1 + yp_2 - Et)}, \end{aligned} \quad (3-6)$$

donde r es la amplitud de probabilidad de reflexión. Estas funciones de onda describen partículas cuyo espín está proyectado en el eje z , es decir, perpendicular al plano de movimiento [9]. De manera implícita en la función de onda recién mostrada, se han definido los momentos de las partículas incidentes y reflejadas de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_i &= p_1 \hat{i} + p_2 \hat{j} = p \cos \phi \hat{i} + p \sin \phi \hat{j}, \\ \mathbf{p}_r &= -p_1 \hat{i} + p_2 \hat{j} = -p \cos \phi \hat{i} + p \sin \phi \hat{j},\end{aligned}\quad (3-7)$$

cuya magnitud es p , y siendo ϕ el ángulo de incidencia del fermión incidente, acorde a lo mostrado en la figura **3-1**. Los vectores \hat{i} y \hat{j} son vectores unitarios en las direcciones de los ejes x y y , respectivamente. Por otro lado, se cumple la siguiente relación entre el momento y la energía en la región I

$$E^2 = p^2 + m^2. \quad (3-8)$$

En la región II, la función de onda se construye solamente a partir de las partículas transmitidas, representadas por la función de onda Ψ_t

$$\begin{aligned}\Psi_{II}(x, y, t) &= \Psi_t(x, y, t) \\ &= \tilde{t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \end{pmatrix} e^{i(xq_1 + yp_2 - Et)},\end{aligned}\quad (3-9)$$

con \tilde{t} la amplitud de probabilidad de transmisión (se elige este símbolo para que no haya ambigüedad con el parámetro temporal t). El momento lineal de la partícula transmitida es

$$\mathbf{q} = q_1 \hat{i} + q_2 \hat{j} = q \cos \theta \hat{i} + q \sin \theta \hat{j}, \quad (3-10)$$

con θ el ángulo refractado. En la región II, la relación entre el momento y la energía corresponde a

$$(E - V_0)^2 = q^2 + m^2. \quad (3-11)$$

En la construcción de la función de onda de la región II se ha tenido en cuenta que el el momento en la dirección y permanece constante en todo el espacio, propiedad mencionada anteriormente, la cual implica que $p_2 = q_2$. Una consecuencia directa de esta afirmación, es que la relación entre los ángulos incidente y transmitido es [13]

$$p \sin \phi = q \sin \theta. \quad (3-12)$$

El objetivo principal es calcular los coeficientes de transmisión y reflexión asociados al proceso de dispersión, y como primer paso es necesario encontrar las amplitudes de probabilidad de reflexión r y transmisión \tilde{t} . Para ello, se hace uso de la continuidad de la función de onda en $x = 0$, representada por la relación $\Psi_I(x = 0) = \Psi_{II}(x = 0)$, a partir de lo cual se llega al siguiente sistema de ecuaciones

$$1 + r = \tilde{t}, \quad (3-13)$$

$$\frac{p_1 + ip_2}{E + m} + \frac{-p_1 + ip_2}{E + m} r = \frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \tilde{t}. \quad (3-14)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones de manera directa, es sencillo demostrar que las amplitudes de probabilidad de reflexión y transmisión son

$$r = \frac{p_1(E - V_0 + m) - q_1(E + m) - ip_2V_0}{p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m) + ip_2V_0}, \quad (3-15)$$

$$\tilde{t} = \frac{2p_1(E - V_0 + m)}{p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m) + ip_2V_0}. \quad (3-16)$$

Antes de calcular los coeficientes de reflexión y transmisión a partir de estas amplitudes de probabilidad, es necesario considerar primero las distintas regiones de energía definidas por el potencial y la energía de incidencia. Como se verá a continuación, los valores de E y V_0 afectan fuertemente el comportamiento del momento q_1 , haciendo que tome valores positivos, negativos o imaginarios, de tal modo que las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} se verán modificadas por esta razón. Como primer paso, se considera la magnitud del momento lineal en la región II

$$q^2 = (E - V_0)^2 - m^2, \quad (3-17)$$

lo cual implica que el momento en la dirección x es

$$q_1 = \pm \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 - p_2^2}. \quad (3-18)$$

La elección de un signo para q_1 no es trivial, dado que esta cantidad por si sola no representa la dirección de propagación de la onda transmitida. La velocidad de grupo del paquete de onda es la cantidad física que define la dirección de propagación de la onda transmitida [9]. Esta velocidad de grupo se define como sigue [9]

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial E}{\partial q_1} \hat{i} + \frac{\partial E}{\partial p_2} \hat{j}, \quad (3-19)$$

así, en la dirección \hat{i} , la velocidad de grupo corresponde a

$$v_{g,x} = \frac{\partial E}{\partial q_1} = \frac{q_1}{E - V_0}. \quad (3-20)$$

Como las condiciones iniciales del problema imponen que la onda transmitida viaje en la dirección x^+ , entonces esta componente de la velocidad de grupo siempre debe ser positiva [9]. El anterior argumento implica que q_1 debe ser positivo si $E > V_0$, pero debe ser negativo en el caso que $E < V_0$.

Por otro lado, para que q_1 sea real, es necesario que

$$(E - V_0)^2 - m^2 - p_2^2 \geq 0, \quad (3-21)$$

y para que esto se cumpla, el potencial debe cumplir una de las siguientes condiciones

$$V_0 \leq E - \sqrt{m^2 + p_2^2} \quad \text{ó} \quad E + \sqrt{m^2 + p_2^2} \leq V_0. \quad (3-22)$$

De otro modo, si el potencial está en el intervalo

$$E - \sqrt{m^2 + p_2^2} < V_0 < E + \sqrt{m^2 + p_2^2}, \quad (3-23)$$

entonces el momento q_1 es una cantidad imaginaria. En resumen, se tienen las siguientes condiciones para q_1 en función del potencial V_0 , que definen lo que se denomina como “las regiones de energía definidas por el potencial V_0 ”

- Si $V_0 \leq E - m'$, entonces q_1 es real y positivo.
- Si $E - m' < V_0 < E + m'$, entonces q_1 es imaginario (se define $q_1 = i\bar{q}_1$, con \bar{q}_1 real).
- Si $E + m' \leq V_0$, entonces q_1 es real y negativo,

donde se ha definido $m' = \sqrt{m^2 + p_2^2}$ [13]. Estos valores para el momento lineal cambian los resultados obtenidos para las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} en las ecuaciones 3-15 y 3-16, de la siguiente manera

$$r = \begin{cases} \frac{p_1(E - V_0 + m) - q_1(E + m) - ip_2V_0}{p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m) + ip_2V_0}, & \text{si } q_1 \text{ es real,} \\ \frac{p_1(E - V_0 + m) - i[\bar{q}_1(E + m) + p_2V_0]}{p_1(E - V_0 + m) + i[\bar{q}_1(E + m) + p_2V_0]}, & \text{si } q_1 \text{ es imaginario.} \end{cases} \quad (3-24)$$

$$\tilde{t} = \begin{cases} \frac{2p_1(E - V_0 + m)}{p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m) + ip_2V_0}, & \text{si } q_1 \text{ es real,} \\ \frac{2p_1(E - V_0 + m)}{p_1(E - V_0 + m) + i[\bar{q}_1(E + m) + p_2V_0]}, & \text{si } q_1 \text{ es imaginario.} \end{cases} \quad (3-25)$$

3.1. Coeficientes de transmisión y reflexión para el potencial paso

Una vez han sido calculadas las amplitudes de probabilidad como función de las regiones de energía definidas por el potencial, se calculan los coeficientes de transmisión y reflexión obtenidos según la densidad de corriente de probabilidad de la ecuación de Dirac definida en la ecuación 2-17. En el apéndice B, se demuestra que los coeficientes de reflexión y transmisión se relacionan con las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} a partir de las siguientes ecuaciones

$$R = |r|^2, \quad T = \left| \frac{q_1}{p_1} \right| \frac{E + m}{|E - V_0 + m|} |\tilde{t}|^2. \quad (3-26)$$

Con estas relaciones, se debe calcular los coeficientes de reflexión y transmisión según q_1 sea real o imaginario. En el apéndice B, se demuestra que los coeficientes de reflexión y transmisión, para cada región definida por el potencial V_0 , corresponden a

$$R = \begin{cases} \frac{p_1^2 - p_1q_1 - EV_0}{p_1^2 + p_1q_1 - EV_0}, & \text{si } V_0 \leq m', \text{ (} q_1 \text{ es real),} \\ 1, & \text{si } E - m' < V_0 < E + m', \text{ (} q_1 \text{ es imaginario),} \\ \frac{p_1^2 + p_1|q_1| - EV_0}{p_1^2 - p_1|q_1| - EV_0}, & \text{si } E + m' \leq V_0, \text{ (} q_1 \text{ es real y negativo).} \end{cases} \quad (3-27)$$

$$T = \begin{cases} \frac{2p_1 q_1}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ |q_1| \frac{4p_1(E+m)|E-V_0+m|}{p_1^2(E-V_0+m)^2 + [\bar{q}_1(E+m) + p_2V_0]^2}, & \text{si } E - m' < V_0 < E + m', \\ -\frac{2p_1 |q_1|}{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0}, & \text{si } E + m' \leq V_0. \end{cases} \quad (3-28)$$

Con $\bar{q}_1 = |\sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 - p_2^2}|$, la norma de q_1 en caso que sea imaginario. Del anterior resultado se observa un hecho muy curioso: aunque el coeficiente de reflexión es siempre igual a 1 en la región de potencial $E - m' < V_0 < E + m'$, el coeficiente de transmisión es distinto de cero, esto es, para este caso particular $R + T \neq 1$. En consecuencia, no existe conservación de la probabilidad en la región de potencial mencionada, sin embargo es fácil ver que en los otros casos sí se conserva la probabilidad. Más adelante se estudiará con detalle la consecuencia de estos resultados.

Por otro lado, para comprobar si existe tunelamiento Klein se evalúa el limite de estas cantidades cuando V_0 tiende a infinito. Es sencillo demostrar que

$$R_{(V_0 \rightarrow \infty)} = \frac{E - p_1}{E + p_1}, \quad (3-29)$$

$$T_{(V_0 \rightarrow \infty)} = \frac{2p_1}{E + p_1}, \quad (3-30)$$

demostrando así la existencia de tunelamiento Klein debido a la transmisión finita de fermiones en este límite.

3.2. Comportamiento de los coeficientes de reflexión y transmisión en función de la energía y el potencial

Ya se observó analíticamente cómo el valor del potencial afecta al momento q_1 , implicando a su vez consecuencias en los valores de los coeficientes de reflexión y transmisión. El objetivo ahora es ver con mayor claridad el comportamiento de dichos coeficientes en función de la energía de incidencia y el valor del potencial, asignando algunos valores para estos parámetros físicos, y con éste análisis será posible sacar conclusiones que antes no habían sido consideradas. En los ejemplos que se verán a continuación, los valores de E y V_0 estarán normalizados con respecto a la masa de la partícula incidente.

Como primer caso, se considera una energía de incidencia de valor $E/m = 10$, y unos potenciales de valor $V_0/m = 0,5, 1$ y $1,5$. En la figura **3-2** se muestran los coeficientes de reflexión y transmisión asociados a estos valores en función del ángulo de incidencia ϕ . Para el coeficiente de reflexión, se observa que existe un ángulo límite a partir del cual $R = 1$, hecho que se cumple cuando q_1 es imaginario, es decir cuando el potencial está en la siguiente región de energías

$$E - \sqrt{m^2 + p_2^2} < V_0 < E + \sqrt{m^2 + p_2^2}. \quad (3-31)$$

Para valores de E , m y V_0 fijos, $p_2 = p \sin \phi$ puede tomar valores que tales que la anterior condición puede ser satisfecha. El valor mínimo del ángulo ϕ que hace cumplir esa condición está dado por

$$\sin \phi_c = \sqrt{\frac{(E - V_0)^2 - m^2}{E^2 - m^2}}. \quad (3-32)$$

Donde ϕ_c se denomina ángulo crítico. Ángulos de incidencia mayores a ϕ_c hacen que el coeficiente de reflexión sea igual a 1. En el ejemplo mostrado en la figura **3-2**, éstos ángulos de incidencia corresponden a $54,1^\circ$; $37,8^\circ$ y $23,3^\circ$ para los potenciales $V_0/m = 0,5$, 1 y $1,5$, respectivamente. Se observa que los ángulos de incidencia límites van disminuyendo conforme se aumenta el potencial, esto es por que el valor de $(E - V_0)$ va disminuyendo (en este ejemplo $V_0 < E - m$). En un ejemplo posterior se muestra que el ángulo límite aumenta conforme aumenta V_0 , si se cumple que $V_0 > E + m$. Por otro lado, el valor del momento q_1 es cero cuando el ángulo de incidencia es igual al ángulo límite ϕ_c , debido a que el momento en la dirección y toma el siguiente valor

$$p_2^2 = (E - V_0)^2 - m^2, \quad (3-33)$$

lo cual implica que el ángulo de transmisión es igual a $\pi/2$ ($\theta = \pi/2$).

Continuando el análisis de la figura **3-2**, para el coeficiente de transmisión se observa que hay ángulos para los cuales éste es mayor a 1, contrario a lo que podría esperarse de un problema de éste tipo. Este resultado tiene importantes implicaciones en nuestro análisis que serán consideradas en la siguiente sección. En primera instancia, se puede esperar que la suma entre R y T sea mayor que 1, y en consecuencia no hay conservación de la probabilidad en el proceso de dispersión. Sin embargo, hay ángulos para los cuales T sí es menor que 1.

Ahora se considera otro ejemplo. En la figura **3-3** se muestran los coeficientes de reflexión y transmisión para una energía de incidencia $E/m = 3$ y unos potenciales de valor $V_0 = 2,5$, 3 , $3,5$. En este caso todos los potenciales se encuentran en el intervalo $E - m < V_0 < E + m$ (en el ejemplo corresponde a $2 < V_0/m < 4$), lo cual garantiza que q_1 sea siempre imaginario. Por esta razón, el coeficiente de reflexión en todos los potenciales es igual a 1, sin embargo de forma similar a como se vio anteriormente, el coeficiente de transmisión es siempre distinto de cero, y no está acotado por la condición $T < 1$. Una vez más se obtiene que no existe conservación de la probabilidad en los potenciales elegidos.

Otro caso interesante que vale la pena estudiar es cuando el potencial toma los valores límites $V_0 = E - m$ y $V_0 = E + m$. Estos potenciales son muy importantes debido a que los fermiones en la región $x > 0$ están en reposo, por la razón de que el momento allí es igual a cero:

$$\begin{aligned} q^2 &= (E - V_0)^2 - m^2 \\ &= (E - V_0 + m)(E - V_0 - m). \end{aligned} \quad (3-34)$$

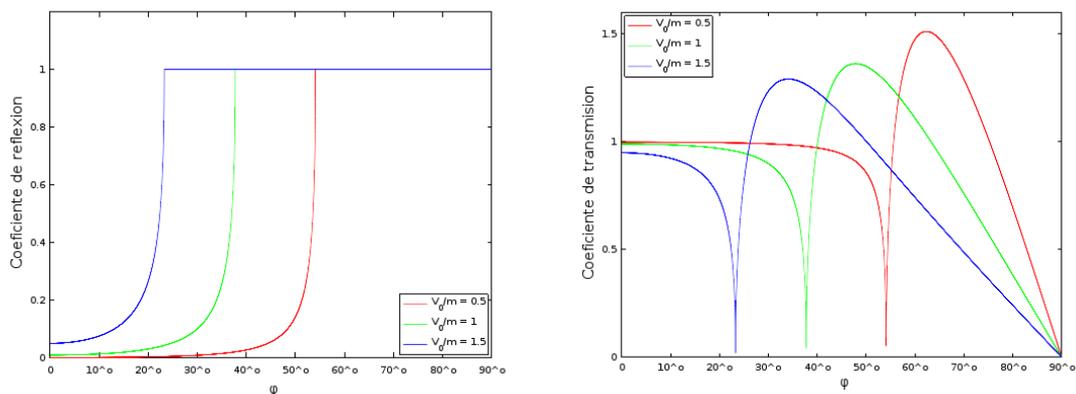


Figura 3-2: Coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 0.5, 1, 1.5$. La energía de incidencia es $E/m = 3$.

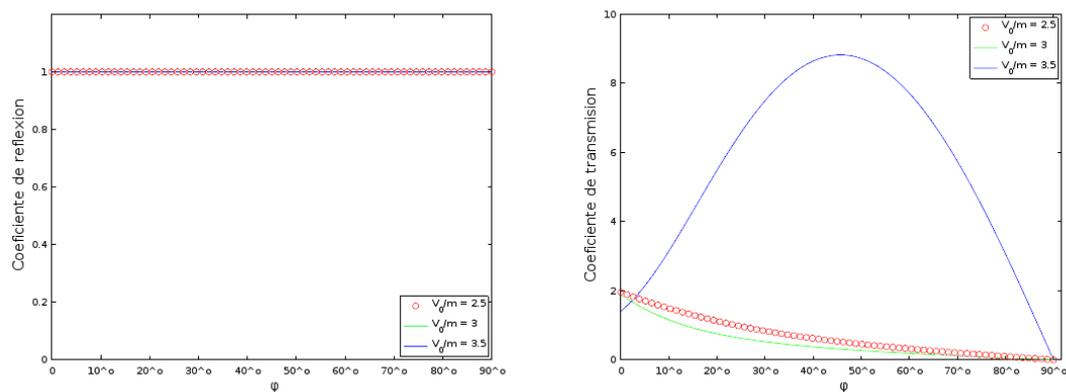


Figura 3-3: Coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 2.5, 3, 3.5$. La energía de incidencia es $E/m = 3$.

El anterior hecho quiere decir que la función de onda en $x > 0$ no está dada por la expresión (3-9), sino por la función de onda para una partícula en reposo mostrada en la ecuación (2-11). Es sencillo resolver el problema en este caso, donde se demuestra que los coeficientes de reflexión y transmisión son

$$R_{(V_0=E-m, \text{ o } V_0=E+m)} = 1, \quad T_{(V_0=E-m, \text{ o } V_0=E+m)} = 0. \quad (3-35)$$

El coeficiente de transmisión es igual a cero debido a que la densidad de corriente de probabilidad asociada a partículas en reposo es igual a cero. En la figura 3-4 se muestra con mayor claridad lo anteriormente expuesto.

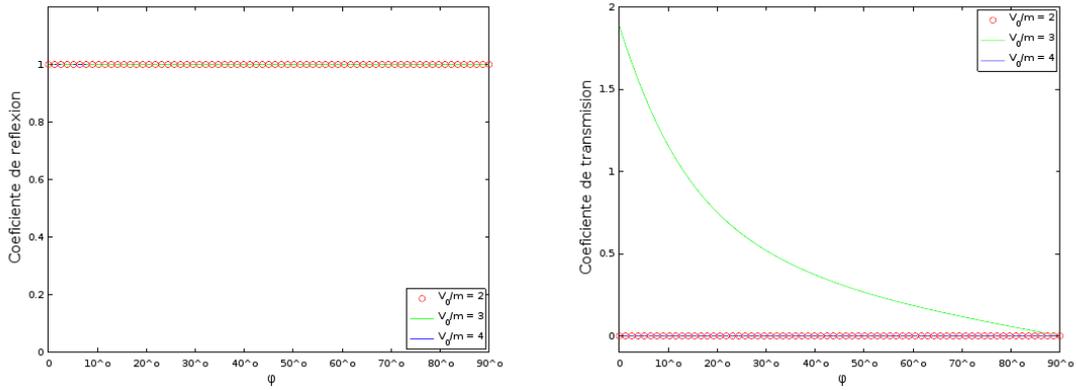


Figura 3-4: Coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 2, 3, 4$. La energía de incidencia es $E/m = 3$. Los potenciales se han elegido de tal modo que $V_0 = E - m$, $V_0 = E$ y $V_0 = E + m$. Para el primer y tercer caso, el coeficiente de transmisión es igual a cero para todos los ángulos de incidencia.

Ahora se estudian potenciales que sean mayores que $E + m$, en las figuras 3-5 y 3-6 se muestran estos casos. En la primera figura se observa que aún hay presencia de ángulos críticos, pero en la segunda desaparecen. Para entender mejor porqué para algunos potenciales no hay presencia de ángulos críticos, se debe observar que si en la ecuación (3-32) se cumple

$$\sin \phi_c = \sqrt{\frac{(E - V_0)^2 - m^2}{E^2 - m^2}} \geq 1^*,$$

entonces no existe un ángulo ϕ_c que satisfaga la condición mostrada en dicha ecuación. Los valores de potencial para los cuales no hay ángulos críticos son $V_0 \leq 0$ o $V_0 \geq 2E$. La primera opción se descarta dado que no estamos considerando potenciales atractivos para los fermiones, es decir no consideramos valores negativos de potencial. La segunda condición es independiente de la masa de la partícula, y a partir de ese valor ya no existen ángulos críticos.

*Debería ser " $>$ " en vez de " \geq ", pero se elige así porque si $\sin \phi_c = 1$ el ángulo crítico sería 90° , lo cual no es un ángulo de incidencia que tenga sentido.

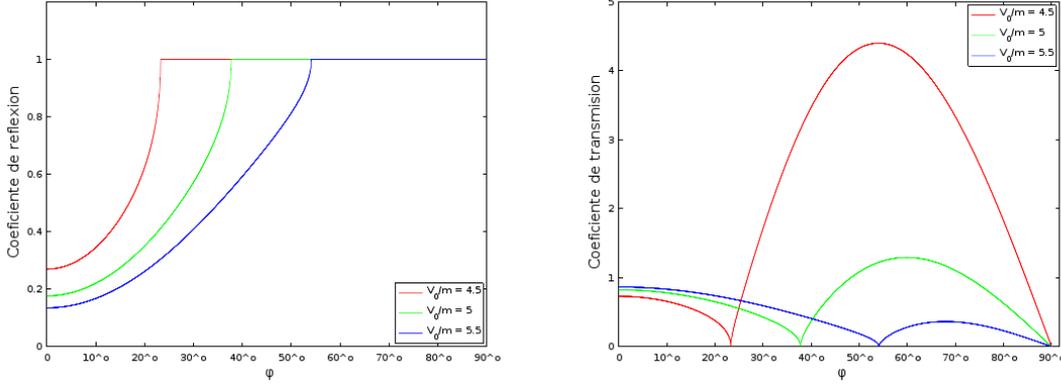


Figura 3-5: Coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 4.5, 5, \text{ y } 5.5$. La energía de incidencia es $E/m = 3$.

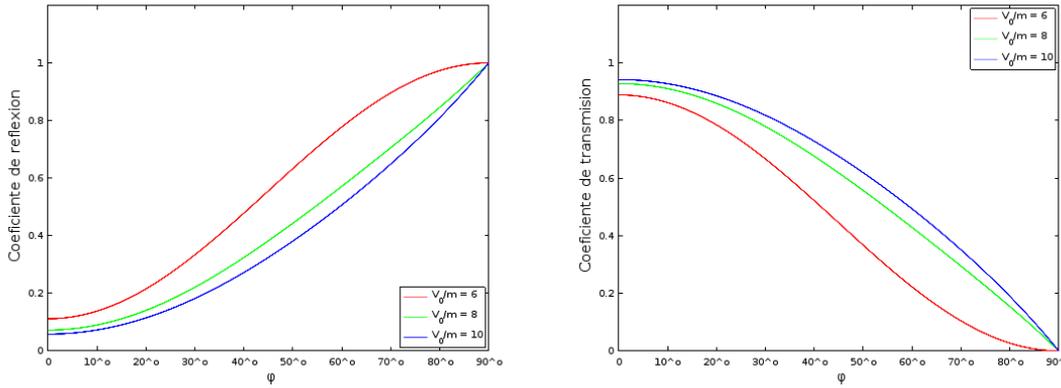


Figura 3-6: Coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso en función del ángulo de incidencia del fermión para valores de potencial $V_0/m = 6, 8, \text{ y } 10$. La energía de incidencia es $E/m = 3$. Aquí ya no hay presencia de ángulos críticos debido a que el potencial cumple la condición $V_0 \geq 2E$.

3.3. Conservación de la probabilidad

Con los análisis realizados hasta el momento se ha podido observar que para varios potenciales el coeficiente de transmisión es mayor que 1, esto muestra directamente que el problema no existe la conservación de la probabilidad al no cumplirse la condición $R + T = 1$. En esta sección se profundizará más en la anterior afirmación, mostrando el comportamiento de la suma de los coeficientes de reflexión y transmisión en función del ángulo de incidencia para distintos valores de potencial. Primero se estudia la relación analítica entre la suma de ambos coeficientes y los parámetros del problema, y luego se consideran algunos casos particulares, para ver con mayor claridad el fenómeno.

Como la forma funcional de los coeficientes de reflexión y transmisión depende de la

región de energías en la que se encuentre el potencial, vale a pena tratar el problema de forma separada para cada una de dichas regiones. En el apéndice C se demuestra que la suma entre los coeficientes de reflexión y transmisión, en cada región de potencial, es

$$R+T = \begin{cases} 1, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ 1 + |q_1| \frac{4p_1(E+m)|E-V_0+m|}{p_1^2(E-V_0+m)^2 + [\bar{q}_1(E+m) + p_2V_0]^2} & \text{si } E - m' < V_0 < E + m', \\ 1 & \text{si } E + m' \leq V_0. \end{cases} \quad (3-36)$$

Lo cual quiere decir que la probabilidad no se conserva en la región de potencial $E - m' < V_0 < E + m'$, que es cuando el momento q_1 es imaginario.

Para ilustrar este hecho se muestran las figura **3-7**, que representan el comportamiento del coeficiente de reflexión, el coeficiente de transmisión y la suma de ambos para diferentes valores de potencial y energía de incidencia. En la figura **3-7**, para el potencial $V_0/m = 1$ se observa que existe conservación de la probabilidad para ángulos de incidencia comprendidos entre $\phi = 0$ y $\phi = 37,8^\circ$, donde este último representa el ángulo crítico asociado al potencial $V_0/m = 1$ con energía de incidencia $E/m = 3$. Para ángulos mayores al ángulo crítico ya se entra en la región de violación de la conservación de la probabilidad.

Si el potencial es tal que $E - m < V_0 < E + m$ entonces no se conserva la probabilidad para ningún ángulo de incidencia, como queda manifiesto en la figura **3-7** para $V_0/m = E/m = 3$. Esto se debe a que el momento q_1 siempre es imaginario, y como ya se observó, el coeficiente de reflexión en este caso es siempre igual a 1, mientras que el coeficiente de transmisión no. Vale la pena aclarar que este hecho también se presenta en el estudio del tunelamiento Klein en una dimensión mostrado en la sección 2.2.1, aunque no se menciona explícitamente.

Ya se mencionó la relación entre la conservación de la probabilidad y la existencia de ángulos críticos en el sistema, de modo que existe dicha conservación si el ángulo es menor que ϕ_c dado por la ecuación (3-32). Sin embargo, ya se mostró que no existe un ángulo crítico en el problema si $V_0 \geq 2E$, y por este motivo para potenciales que cumplan esta condición, la probabilidad se conserva para todos los ángulos de incidencia posibles. El hecho mencionado puede verificarse en la figura **3-7** para el potencial $V_0/m = 6$. De este modo, se puede concluir que existe conservación de la probabilidad en los siguientes casos:

- Si $V_0 \leq E - m$: El ángulo de incidencia debe ser menor al ángulo crítico ϕ_c mostrado en la ecuación (3-32).
- Si $E - m < V_0 < E + m$: No se conserva la probabilidad para ningún ángulo de incidencia.
- Si $E + m \leq V_0 < 2E$: El ángulo de incidencia debe ser menor al ángulo crítico ϕ_c mostrado en la ecuación (3-32).

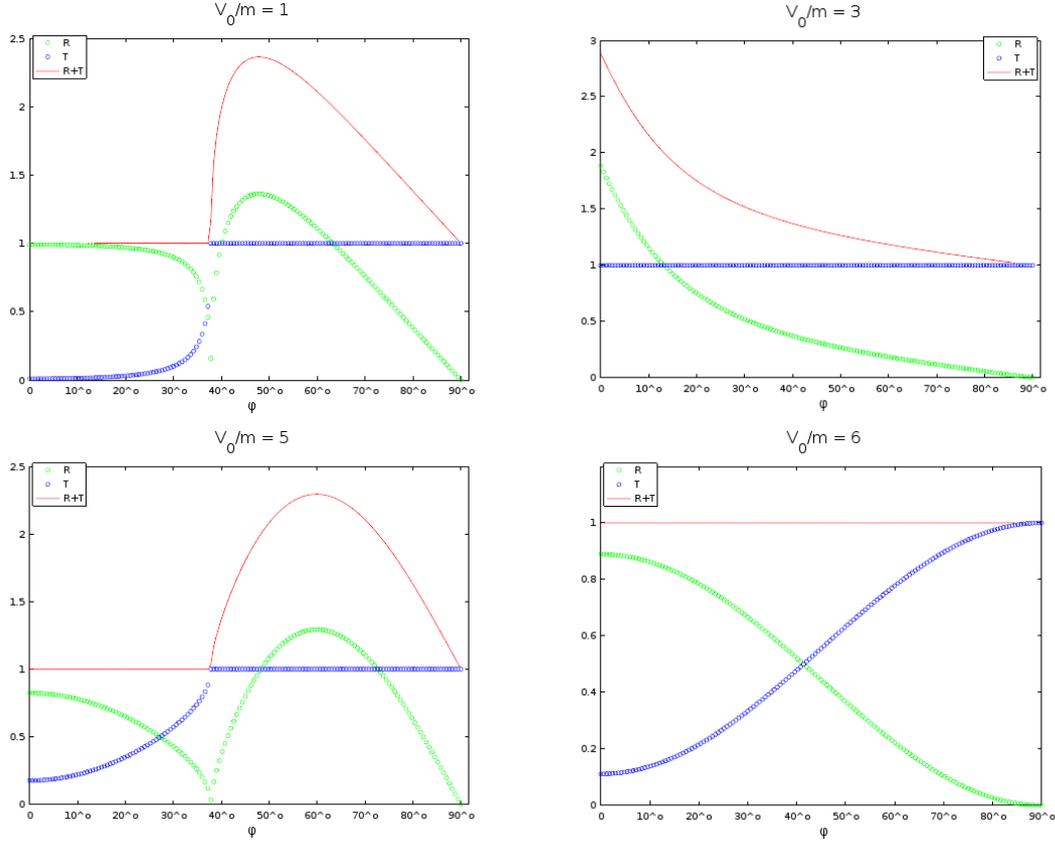


Figura 3-7: Comportamiento de los coeficientes de reflexión, transmisión, y la suma de ambos en función del ángulo de incidencia, para distintos potenciales considerados. En todos los casos la energía de incidencia es $E/m = 3$.

- Si $V_0 \geq 2E$: La probabilidad se conserva para todos los ángulos de incidencia.

En conclusión, se ha demostrado la probabilidad no se conserva para todos los valores de V_0 , E y ϕ en la dispersión bidimensional de fermiones relativistas sobre un potencial paso. Aunque este hecho es presente en el problema unidimensional, no había sido estudiado previamente en la literatura especializada para el problema bidimensional. La no conservación de la probabilidad puede deberse a que no se están teniendo en cuenta funciones de onda de antipartícula en el problema, las cuales son necesarias para la completez de las soluciones de la ecuación de Dirac; sin embargo, si se llegaran a tener en cuenta, no sería posible obtener una solución debido a que la cantidad de parámetros desconocidos aumentaría, y por las condiciones de continuidad solo es posible llegar a dos ecuaciones linealmente independientes. Debido a lo anterior, para obtener una solución que respete la conservación de la probabilidad es necesario usar teoría cuántica de campos.

Esta no conservación de la probabilidad, que no es sino manifestación de la paradoja de Klein, tiene consecuencias importantes para la interpretación de los fenómenos físicos que se llevan a cabo en el proceso de dispersión. Al estudiar el problema desde la perspectiva de la teoría cuántica de campos, se pueden sacar algunas importantes conclusiones: Primero, un fermión no puede ser confinado en una región cuyo potencial sea muy grande [16], dado

que en el límite cuando V_0 tiende a infinito, la probabilidad de transmisión es distinta de cero; y segundo, existe la creación espontánea de pares partícula-antipartícula en presencia del potencial crítico [7][8][12][19][21][22]. Teniendo en cuenta lo anterior, surgen varias hipótesis sobre el efecto que tienen los electrones incidentes sobre la tasa de creación de pares. Una de estas hipótesis es que la partícula incidente extrae positrones del potencial [19], o que estimula la creación de pares [20]. Otra hipótesis es que el electrón incidente inhibe la tasa de creación espontánea de pares [21]. En todo caso, profundizar en estos aspectos requiere de técnicas que quedan fuera del alcance de los objetivos del presente estudio.

3.4. Consistencia caso con inversión de espín

En esta sección se muestra que los resultados obtenidos para las amplitudes de probabilidad R y T son equivalentes a los mostrados previamente por los autores De Leo y Rotelli en la referencia [13]. Es necesario tener en cuenta que en ese problema se considera que los fermiones se propagan en el plano z, y , y que el potencial tiene la forma $V(z)$, es decir, solo depende de la coordenada z . Una característica importante de las funciones de onda allí consideradas es que el espín de la partícula se encuentra proyectado en la misma dirección que p_3 , es decir, el momento lineal en el eje z [13]. Lo anterior quiere decir que el potencial afecta a la polarización de espín del fermión, y por ende, existe la posibilidad de inversión de espín a partir de la interacción con el potencial [13]. Vale la pena recordar que en nuestro estudio el espín se encuentra polarizado perpendicularmente al plano de propagación, y por ello el potencial no lo afecta.

Las amplitudes de probabilidad obtenidas en el estudio realizado por De Leo y Rotelli en la referencia mencionada son los siguientes

$$r_{\text{DL}} = \frac{(p_2^2 + m^2 + mE) V_0}{(E + m)(p_3^2 + p_3 q_3 - V_0 E)}, \quad (3-37)$$

$$t_{\text{DL}} = \frac{p_3^2(E - V_0 + m) + p_3 q_3(E + m)}{(E + m)(p_3^2 + p_3 q_3 - V_0 E)}, \quad (3-38)$$

$$r'_{\text{DL}} = \frac{p_2 p_3 V_0}{(E + m)(p_3^2 + p_3 q_3 - V_0 E)}, \quad (3-39)$$

$$t'_{\text{DL}} = r'_{\text{DL}}, \quad (3-40)$$

siendo p_2 y p_3 los momentos en las direcciones y y z en la región I, respectivamente, y q_3 el momento en la dirección z para la región II. Las cantidades r_{DL} y t_{DL} son las amplitudes de probabilidad asociadas a las situaciones en las cuales el espín está proyectado paralelamente al momento en el eje z , mientras que r'_{DL} y t'_{DL} representan las amplitudes de probabilidad donde el espín está proyectado antiparalelamente al momento en la dirección z [13].

Los coeficientes de reflexión y de transmisión totales (es decir, considerando tanto los términos sin inversión de espín y los de espín invertido) se calculan de un modo similar a como se muestra en la ecuación (3-26), arrojando los siguientes resultados

$$R_{\text{DL}} = |r_{\text{DL}}|^2 + |r'_{\text{DL}}|^2 = \frac{V_0^2(p_2^2 + m^2)}{(p_3^2 + p_3q_3 - V_0E)^2} \quad (3-41)$$

$$\begin{aligned} T_{\text{DL}} &= \left| \frac{q_3}{p_3} \right| \frac{E + m}{|E - V_0 + m|} (|t_{\text{DL}}|^2 + |t'_{\text{DL}}|^2) \\ &= \left| \frac{q_3}{p_3} \right| \frac{[p_3^2(E - V_0 + m) + p_3q_3(E + m)]^2 + p_2^2p_3^2V_0^2}{(E + m)|E - V_0 + m|(p_3^2 + p_3q_3 - V_0E)^2}. \end{aligned} \quad (3-42)$$

Estos resultados son equivalentes a los mostrados en las ecuaciones (3-27) y (3-28) si se renombran los momentos según $p_1 \rightarrow p_3$ y $q_1 \rightarrow q_3$. Tomemos el coeficiente de reflexión encontrado en la ecuación (3-27), en los casos de potenciales $V_0 \leq E - \sqrt{m^2 + p_2^2}$ y $V_0 \geq \sqrt{E^2 + p_2^2}$,

$$R = \frac{p_3^2 - p_3q_3 - EV_0}{p_3^2 + p_3q_3 - EV_0}, \quad (3-43)$$

multiplicando y dividiendo por el término $p_3^2 + p_3q_3 - EV_0$, se tiene que

$$\begin{aligned} R &= \frac{(p_3^2 - p_3q_3 - EV_0)(p_1^2 + p_3q_3 - EV_0)}{(p_3^2 + p_3q_3 - EV_0)^2} \\ &= \frac{(p_3^2 - EV_0)^2 - p_3^2q_3^2}{(p_3^2 + p_3q_3 - EV_0)^2} \\ &= \frac{V_0^2(E^2 - p_3^2)}{(p_3^2 + p_3q_3 - EV_0)^2}, \end{aligned} \quad (3-44)$$

y como $E^2 - p_3^2 = p_2^2 + m^2$, se prueba finalmente que

$$R = R_{\text{DL}}. \quad (3-45)$$

Por ende, se ha probado la consistencia entre los dos enfoques. En la figura **3-8** se muestra numéricamente, para un caso particular, la validez de la anterior afirmación.

En conclusión, aunque los dos enfoques son consistentes en el sentido que la suma de los coeficientes de reflexión para espín invertido y no invertido corresponden al resultado obtenido en la presente sección, mostrado en la ecuación 3-27, los dos problemas corresponden a situaciones físicas distintas, porque desde el punto de vista experimental se deben preparar previamente los espines de los fermiones de manera diferente (perpendicular al plano de transmisión en nuestro caso, y paralelo al eje de propagación en el presente caso). En última instancia y considerando el caso de la referencia [13], como las partículas reflejadas sin inversión de espín y con espín invertido se reflejan con el mismo ángulo, entonces un detector de partículas posicionado en un ángulo específico va a detectar ambos tipos de partículas a la vez, es decir, su medición va a ser proporcional a $|r_{\text{DL}}|^2 + |r'_{\text{DL}}|^2$ y no cada uno de forma separada, y por ende va a ser proporcional a nuestro coeficiente de reflexión planteado en la ecuación 3-27.

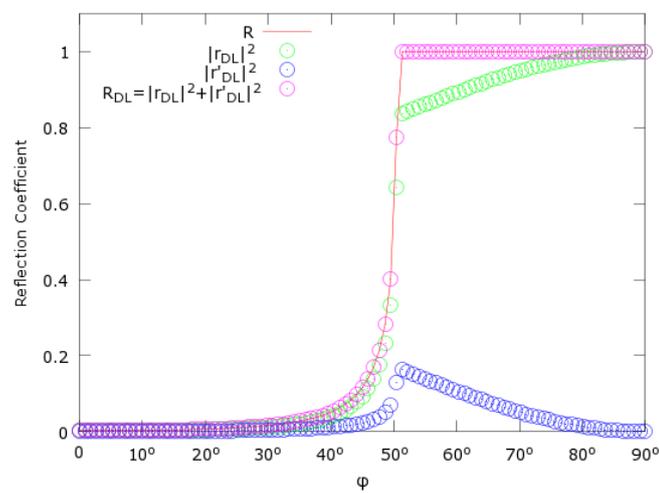


Figura **3-8**: Consistencia entre el coeficiente de reflexión calculado en la referencia [13] y el coeficiente de reflexión en la ecuación 3-27. Se muestra la contribución de los fermiones sin inversión de espín $|r_{DL}|^2$ y la contribución de los fermiones que presentan inversión de espín $|r'_{DL}|^2$. Los valores de referencia usados son $V/m = 0,5$ y $E/m = 3$.

Capítulo 4

Dispersión en potencial barrera

En el capítulo anterior se obtuvo los resultados de la dispersión de fermiones sobre un potencial tipo paso, considerando que ellos inciden con cierto ángulo sobre el potencial. Para ese problema se llegó a resultados muy importantes, como por ejemplo que la polarización de espín de los fermiones no interviene en su transmisión y reflexión, y que la probabilidad se conserva solamente en algunos casos excepcionales. En el presente capítulo el objetivo es hacer el mismo análisis, pero considerando que el potencial es ahora una barrera de longitud espacial L y de valor V_0 , y obteniendo los coeficientes de transmisión y reflexión. Se comprueba que para éste caso si se conserva la probabilidad, y que existen ángulos de incidencia para los cuales el coeficiente de transmisión es igual a 1.

El problema estudiado es igual: Se considera un fermión que incide con cierto ángulo en una región de potencial de naturaleza electrostática, con el objetivo de encontrar los coeficientes de transmisión y reflexión del proceso de dispersión llevado a cabo en el potencial, teniendo en cuenta que el fermión está descrito a partir de la ecuación de Dirac. En la figura 4-1 se muestra un esquema del proceso de dispersión estudiado.

El potencial barrera tendrá la siguiente forma

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x < 0 \text{ (Región I),} \\ V_0, & \text{si } 0 \leq x \leq L \text{ (Región II),} \\ 0, & \text{si } L < x \text{ (Región III).} \end{cases} \quad (4-1)$$

En las regiones I y III las partículas son libres, y debido a ello su energía es

$$E^2 = p^2 + m^2, \quad (4-2)$$

mientras que en la región II la energía sufre un corrimiento de valor V_0

$$(E - V_0)^2 = q^2 + m^2, \quad (4-3)$$

con q la norma del momento de la partículas en esta región espacial.

Similarmente al problema del potencial paso, se plantean las funciones de onda en cada región del espacio. En la región I la partícula es libre, por eso la función de onda

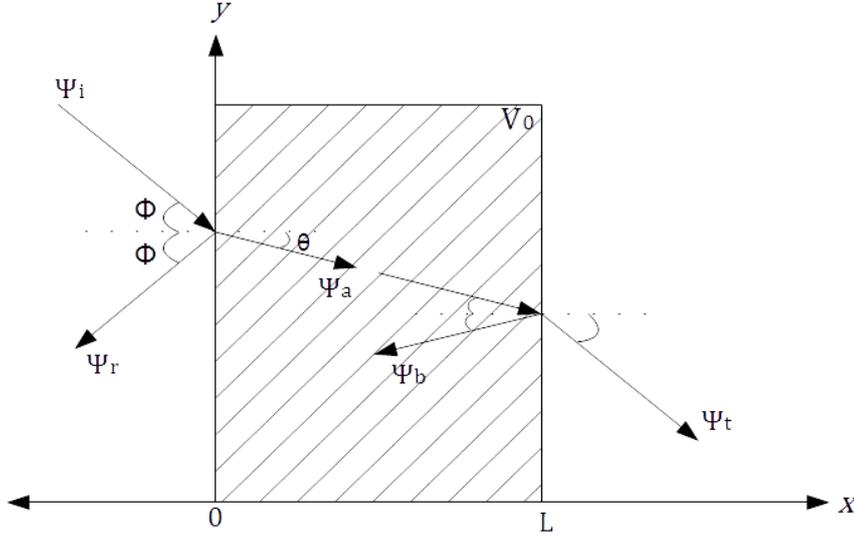


Figura 4-1: Esquema del problema de dispersión en el potencial barrera. Se muestran las funciones de onda que luego se definen para resolver el problema.

corresponde a la superposición de la onda incidente Ψ_i y la onda reflejada en $x = 0$, que se denomina Ψ_r

$$\begin{aligned} \Psi_I(x, y, t) &= \Psi_i(x, y, t) + \Psi_r(x, y, t) \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} e^{i(xp_1 + yp_2 - Et)} + r \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{-p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} e^{i(-xp_1 + yp_2 - Et)}, \end{aligned} \quad (4-4)$$

donde solamente se ha considerado una proyección de espín determinada. Si la superposición se hiciera considerando funciones de onda reflejadas con espín invertido, un análisis posterior indicaría que su amplitud de probabilidad es cero, y por ello se omite este tipo de funciones de onda. Considerando que la partícula incide con un ángulo ϕ , el momento lineal del fermión incidente se define como

$$\mathbf{p}_i = p_1 \hat{i} + p_2 \hat{j} = p \cos \phi \hat{i} + p \sin \phi \hat{j}, \quad (4-5)$$

y para el fermión reflejado en $x = 0$, en momento lineal cambia a

$$\mathbf{p}_r = -p_1 \hat{i} + p_2 \hat{j} = -p \cos \phi \hat{i} + p \sin \phi \hat{j}, \quad (4-6)$$

de tal modo que se cumple que tanto la magnitud del momento del fermión incidente, como la magnitud del momento del fermión reflejado, son iguales

$$p^2 = |\mathbf{p}_i|^2 = |\mathbf{p}_r|^2, \quad (4-7)$$

implicando que la energía del fermión en la región libre de potencial es

$$E^2 = p_1^2 + p_2^2 + m^2. \quad (4-8)$$

En la región II la función de onda es superposición de la función de onda transmitida en $x = 0$, que se denominará Ψ_a , y la función de onda reflejada en $x = L$, la cual llamaremos Ψ_b

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{II}}(x, y, t) &= \Psi_a(x, y, t) + \Psi_b(x, y, t) \\ &= a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \end{pmatrix} e^{i(xq_1 + yp_2 - Et)} + b \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{-q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \end{pmatrix} e^{i(-xq_1 + yp_2 - Et)}, \end{aligned} \quad (4-9)$$

con a y b las amplitudes de probabilidad asociadas a cada función de onda. En las funciones de onda anteriores están implícitos los momentos lineales de los fermiones transmitidos en $x = 0$ y $x = L$, que corresponden respectivamente a

$$\mathbf{q}_a = q_1 \hat{i} + p_2 \hat{j} = q \cos \theta \hat{i} + q \sin \theta \hat{j} \quad (4-10)$$

$$\mathbf{q}_b = -q_1 \hat{i} + p_2 \hat{j} = -q \cos \theta \hat{i} + q \sin \theta \hat{j}, \quad (4-11)$$

donde θ corresponde al ángulo de transmisión (ver figura 4-1). La magnitud de ambos momentos lineales es la misma ($q^2 = q_1^2 + p_2^2$), y debido a ello, la energía del fermión en la región espacial $0 \leq x \leq L$ es

$$(E - V_0)^2 = q_1^2 + p_2^2 + m^2. \quad (4-12)$$

Cabe destacar que el ángulo de incidencia ϕ y el ángulo de transmisión θ se relacionan de la misma forma que en el potencial paso, y esto se debe a que p_2 , el momento en la dirección y , permanece constante en todo el espacio

$$p \sin \phi = q \sin \theta. \quad (4-13)$$

Finalmente, la función de onda en la región III es la función de onda transmitida, que tiene la siguiente forma

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{III}}(x, y, t) &= \Psi_t(x, y, t) \\ &= \tilde{t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} e^{i(xp_1 + yp_2 - Et)}. \end{aligned} \quad (4-14)$$

La cantidad \tilde{t} es la amplitud de probabilidad de transmisión.

Para encontrar las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} se imponen las condiciones de continuidad para la función de onda en cada región, esto es, $\Psi_{\text{I}}(x = 0) = \Psi_{\text{II}}(x = 0)$

y $\Psi_{\text{II}}(x = L) = \Psi_{\text{III}}(x = L)$. Aplicando las condiciones de continuidad se obtiene un sistema de cuatro ecuaciones

$$\begin{aligned}
r - a - b &= -1 \\
\left(\frac{-p_1 + ip_2}{E + m}\right)r - \left(\frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m}\right)a - \left(\frac{-q_1 + ip_2}{E - V_0 + m}\right)b &= -\left(\frac{p_1 + ip_2}{E + m}\right) \\
(e^{iLq_1})a + (e^{-iLq_1})b - (e^{iLp_1})\tilde{t} &= 0 \\
\left(\frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m}\right)e^{iLq_1}a + \left(\frac{-q_1 + ip_2}{E - V_0 + m}\right)e^{-iLq_1}b - \left(\frac{p_1 + ip_2}{E + m}\right)e^{iLp_1}\tilde{t} &= 0.
\end{aligned} \tag{4-15}$$

En el apéndice D se muestra detalladamente el procedimiento para obtener las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} . Antes de plasmar los resultados, es necesario considerar de nuevo las regiones de energía definidas por el potencial, deducidas en el capítulo anterior, y cómo depende el valor del momento q_1 en cada una de ellas

- Si $V_0 \leq E - m'$, entonces q_1 es real y positivo,
- Si $E - m' < V_0 < E + m'$, entonces q_1 es imaginario (definimos $q_1 = i\bar{q}_1$, con \bar{q}_1 real),
- Si $E + m' \leq V_0$, entonces q_1 es real y negativo,

donde se ha definido $m' = \sqrt{m^2 + p_2^2}$. Como se observó en el estudio del potencial paso, los coeficientes de transmisión y reflexión dependen fuertemente de estas regiones de energía.

En el apéndice D se demuestra que las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} , en función del momento q_1 , son

$$r = \begin{cases} \frac{-V_0 \sin(q_1 L) [p_1 p_2 + i(E m + m^2 + p_2^2)]}{(E + m) \{ p_1 q_1 \cos(q_1 L) + (E V_0 - p_1^2) i \sin(q_1 L) \}}, & \text{si } q_1 \text{ es real,} \\ \frac{V_0 \sinh(\bar{q}_1 L) (E m + m^2 + p_2^2 - i p_1 p_2)}{(E + m) \{ i p_1 \bar{q}_1 \cosh(\bar{q}_1 L) - (E V_0 - p_1^2) \sinh(\bar{q}_1 L) \}}, & \text{si } q_1 \text{ es imaginario,} \end{cases} \tag{4-16}$$

$$\tilde{t} = \begin{cases} \frac{q_1 p_1 e^{-ip_1 L}}{p_1 q_1 \cos(q_1 L) + (E V_0 - p_1^2) i \sin(q_1 L)}, & \text{si } q_1 \text{ es real,} \\ \frac{i \bar{q}_1 p_1 e^{-ip_1 L}}{i p_1 \bar{q}_1 \cosh(\bar{q}_1 L) - (E V_0 - p_1^2) \sinh(\bar{q}_1 L)}, & \text{si } q_1 \text{ es imaginario,} \end{cases} \tag{4-17}$$

con $q_1 = i\bar{q}_1$, y $\bar{q}_1 = |\sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 - p_2^2}|$.

4.1. Coeficientes de reflexión y transmisión para el potencial barrera

Los coeficientes de transmisión y reflexión se calculan a partir de la densidad de corriente de probabilidad, del mismo modo en que se calcularon en el capítulo 3 sección 3.1. Para el presente problema se procede de un modo similar, donde los coeficientes de reflexión y transmisión se relacionan con las amplitudes de probabilidad como sigue

$$R = |r|^2, \quad T = |\tilde{t}|^2. \quad (4-18)$$

Primero, consideramos las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} para el caso en el que q_1 es real, esto es, el potencial cumple la condición $V_0 \leq E - m'$ o $V_0 \geq E + m'$

$$R = |r|^2 = \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sin^2(q_1 L)}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, \quad (4-19)$$

$$T = |\tilde{t}|^2 = \frac{q_1^2 p_1^2}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, \quad (4-20)$$

mientras que si q_1 es imaginario, los coeficientes de reflexión y transmisión cambian a

$$R = |r|^2 = \frac{V_0^2(E^2 - p_1) \sinh^2(\bar{q}_1 L)}{p_1^2 \bar{q}_1^2 \cosh^2(\bar{q}_1 L) + (EV_0 - p_1)^2 \sinh^2(\bar{q}_1 L)}, \quad (4-21)$$

$$T = |\tilde{t}|^2 = \frac{p_1^2 \bar{q}_1^2}{p_1^2 \bar{q}_1^2 \cosh^2(\bar{q}_1 L) + (EV_0 - p_1)^2 \sinh^2(\bar{q}_1 L)}. \quad (4-22)$$

En conclusión, los coeficientes de reflexión y transmisión, en cada región de potencial, corresponden a

$$R = \begin{cases} \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sin^2(q_1 L)}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sinh^2(\bar{q}_1 L)}{p_1^2 \bar{q}_1^2 \cosh^2(\bar{q}_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sinh^2(\bar{q}_1 L)}, & \text{si } E - m' \leq V_0 \leq E + m', \\ \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sin^2(q_1 L)}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, & \text{si } E + m' \leq V_0, \end{cases} \quad (4-23)$$

$$T = \begin{cases} \frac{q_1^2 p_1^2}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ \frac{\bar{q}_1^2 p_1^2}{p_1^2 \bar{q}_1^2 \cosh^2(\bar{q}_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sinh^2(\bar{q}_1 L)}, & \text{si } E - m' < V_0 < E + m', \\ \frac{q_1^2 p_1^2}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, & \text{si } E + m' \leq V_0. \end{cases} \quad (4-24)$$

Ahora, el objetivo es estudiar el comportamiento de R y T para algunos casos particulares. Como primer caso, se considera que los fermiones tienen incidencia normal sobre la barrera, es decir $\phi = 0$, o equivalentemente, $p_2 = 0$

$$R_{(\phi=0)} = \frac{V_0^2(E^2 - p^2) \sin^2(qL)}{p^2 q^2 \cos^2(qL) + (EV_0 - p^2)^2 \sin^2(qL)}, \quad (4-25)$$

$$T_{(\phi=0)} = \frac{q^2 p^2}{p^2 q^2 \cos^2(qL) + (EV_0 - p^2)^2 \sin^2(qL)}. \quad (4-26)$$

Estos resultados coinciden con lo reportado por los autores Ru-Keng, *et. al* en la referencia [11], para el problema unidimensional, y mostrados en el capítulo 2, sección 2.2.2.

Ahora, al evaluar el coeficiente de transmisión T en el límite $V_0 \gg E$, se obtiene

$$T_{(V_0 \gg E)} = \frac{p_1^2}{p_1^2 \cos^2(q_1 L) + E^2 \sin^2(q_1 L)}, \quad (4-27)$$

lo cual muestra de nuevo la aparición de paradoja de Klein en el problema en dos dimensiones. En este límite, para incidencia normal ($\phi = 0$), el coeficiente de transmisión es el siguiente

$$T_{(V_0 \gg E, \phi=0)} = \frac{p^2}{E^2 - m^2 \cos^2(qL)}. \quad (4-28)$$

Si la masa del fermión es cero, se cumple que $E = p$ y por lo tanto el coeficiente de transmisión es 1 (en incidencia normal). Si la masa del fermión es distinta de cero, la barrera es transparente solo en el caso particular $qL = n\pi$, con n entero. Este hecho es tenido en cuenta más adelante cuando se estudie la paradoja de Klein en el grafeno.

En la figura 4-2 se muestra el comportamiento del coeficiente de transmisión en la barrera en función del ángulo de incidencia, para varios valores de potencial. Allí se observa que hay algunos ángulos para los cuales hay completa transmisión de los fermiones, y a medida que el potencial aumenta, los ángulos críticos aumentan también de modo que si el potencial es suficientemente grande ya no hay ángulos para los cuales la barrera es transparente. Por otro lado, en la figura 4-3 se puede evidenciar cómo afecta la masa del fermión al coeficiente de transmisión. En incidencia normal, valores altos de masa implican un menor coeficiente de transmisión, sin embargo, la presencia de ángulos de transmisión total permanece. En general, los ángulos para los cuales hay transmisión total se encuentran con la condición

$$q_1 L = l\pi \quad \text{con } l \text{ entero.} \quad (4-29)$$

También se analiza el comportamiento del coeficiente de transmisión en función del ancho de la barrera. En la figura 4-4 se observa que mientras más alto es el valor de L aparecen más ángulos de transmisión total (ver ecuación 4-29), y también un hecho curioso que se observa es que hay un ángulo para el cual la barrera es transparente *independientemente del valor del ancho de la barrera*. Este ángulo es común para todo L siempre y cuando L sea entero, y se encuentra usando la siguiente expresión, que es equivalente a la ecuación 4-29

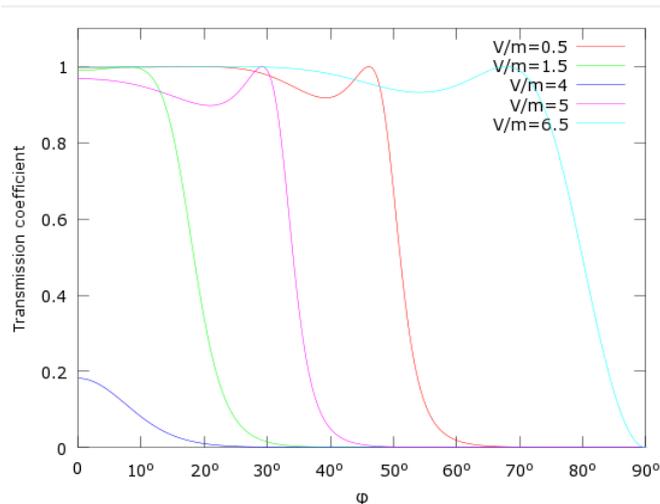


Figura 4-2: Coeficiente de transmisión en el potencial tipo barrera en función del ángulo de incidencia ϕ . Los valores de referencia usados son $E/m = 3$, $Lm = 3$ (valores normalizados con respecto a la masa). El coeficiente de transmisión es cero cuando se cumple la condición $p_2 \geq \sqrt{(E - V_0)^2 - m_0^2}$, pero para valores grandes de potencial esta condición no se satisface, debido a ello el coeficiente de transmisión para el potencial $V/m = 6,5$ es distinto de cero para todos los ángulos de incidencia (salvo el caso trivial $\phi = 90^\circ$).

$$\cos^2 \phi = \frac{q^2}{p^2} - \frac{l^2 \pi^2}{p^2 L^2}, \quad (4-30)$$

de modo que si L es entero y $\frac{l}{L} = l'$ (l' entero también y con unidades de inverso a L) se tiene que

$$\cos^2 \phi = \frac{q^2}{p^2} - \frac{n'^2 \pi^2}{p^2}, \quad (4-31)$$

entonces, para distintos valores de $n' = 1, 2, 3, \dots$ se obtienen los distintos ángulos para los cuales hay completa transmisión, independientemente de L (siempre y cuando sea entero).

4.2. Conservación de la probabilidad para el potencial barrera

En el problema del tunelamiento Klein en potencial paso, se observó que la suma del coeficiente de reflexión y transmisión era distinto de 1 en el caso más general, e incluso, hay casos en los que es mayor que 1. En la presente sección se plantea la misma pregunta para el potencial barrera, y se concluye que hay importantes diferencias entre los dos procesos de dispersión considerados hasta ahora.

Se procede de manera directa, sumando los coeficientes de reflexión y transmisión mostrados en las ecuaciones (4-23) y (4-24). En el apéndice E se realizan detalladamente

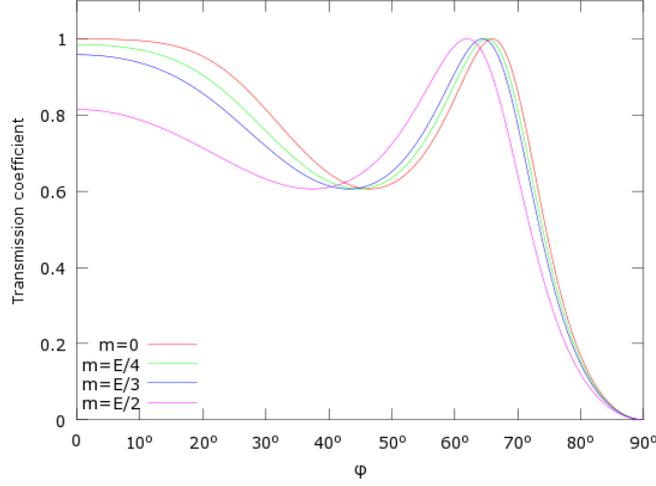


Figura 4-3: Coeficiente de transmisión en el potencial tipo barrera en función del ángulo de incidencia ϕ para distintos valores de la masa del fermión. Los valores de referencia usados son $E/m = 3$, $Lm = 20$ y $V/m = 30$.

los cálculos para demostrar que, en todas las regiones de potencial, se tiene el siguiente resultado

$$R + T = 1, \quad (4-32)$$

es decir se conserva la probabilidad para la dispersión en el potencial barrera, en todo los casos posibles. Recordemos que en el potencial paso la no conservación de la probabilidad estaba asociada a procesos de creación espontánea de pares partícula-antipartícula, así que el hecho de que se conserve la probabilidad permite inferir que la creación de pares queda confinada dentro de la barrera de potencial.

4.3. Consistencia con el caso de inversión de espín

Los autores De Leo y Rotelli en la referencia [13] estudian éste mismo problema, teniendo en cuenta que las partículas se propagan en el plano (z, y) y el potencial barrera depende de la coordenada z . En ese caso, ellos calculan y llegan a las siguientes amplitudes de probabilidad

$$r_{\text{DL}} = -i \left(m + \frac{p_2^2}{E + m} \right) V_0 \frac{\sin(q_3 L)}{p_3 q_3 F}, \quad (4-33)$$

$$r'_{\text{DL}} = \frac{p_2 p_3}{E + m} V_0 \frac{\sin(q_3 L)}{p_3 q_3 F}, \quad (4-34)$$

$$t_{\text{DL}} = \frac{e^{-ip_3 L}}{F}, \quad (4-35)$$

$$t'_{\text{DL}} = 0, \quad (4-36)$$

con

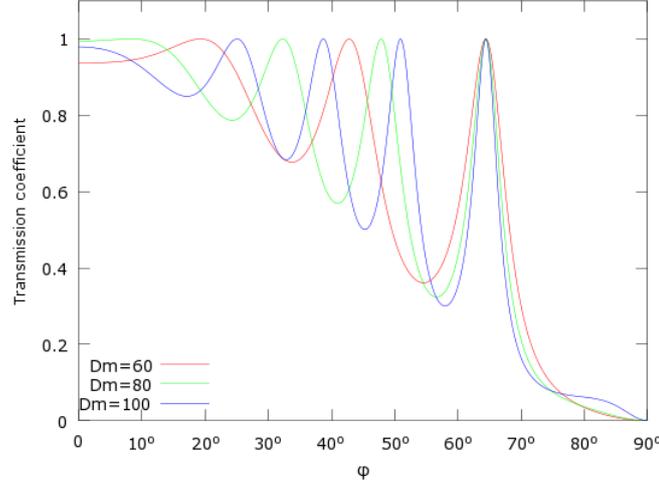


Figura 4-4: Coeficiente de transmisión en el potencial tipo barrera en función del ángulo de incidencia ϕ para distintos valores de ancho de la barrera. Los valores de referencia usados son $E/m = 3$, y $V/m = 30$. Se observa que existe un ángulo para el cual hay transmisión total, independientemente del valor de Lm ; esto se debe a que cada uno de estos anchos es entero.

$$F = \cos(q_3 L) - i \frac{p_3^2 - EV_0}{p_3 q_3} \sin(q_3 L). \quad (4-37)$$

Similarmente a los resultados mostrados en el potencial paso, r_{DL} y t_{DL} son amplitudes de probabilidad asociadas a fermiones con polarización de espín igual a la polarización de espín de las partículas incidentes, mientras que r'_{DL} y t'_{DL} están asociadas a partículas con espín invertido en comparación a las partículas incidentes.

Los anteriores resultados son consistentes con los mostrados en las ecuaciones (4-16) y (4-17). De hecho, la amplitud de probabilidad t_{DL} es igual a la amplitud de probabilidad señalada en la ecuación (4-17), y por ende se debe obtener el mismo coeficiente de transmisión en ambos casos (teniendo en cuenta que $t'_{DL} = 0$). Al calcular el coeficiente de reflexión a partir de las ecuaciones (4-33) y (4-34) se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned} R_{DL} &= |r_{DL}|^2 + |r'_{DL}|^2 \\ &= \frac{V_0^2 \sin^2(q_1 L)}{(E + m)^2} \frac{[m(E + m) + p_2^2]^2 + p_1^2 p_2^2}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, \\ &= \frac{V_0^2 \sin^2(q_1 L) (E^2 - p_1^2)}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, \end{aligned} \quad (4-38)$$

el cual es igual al coeficiente de reflexión hallado en la presente tesis de maestría, plasmado en la ecuación (4-19).

La figura 4-5 muestra la consistencia para un caso particular, señalando las contribuciones del coeficiente de reflexión de los términos con inversión de espín y sin inversión de

espín. Se observa claramente que la suma de cada contribución corresponde al coeficiente de reflexión señalado en la ecuación (4-23), soportando lo afirmado en esta sección.

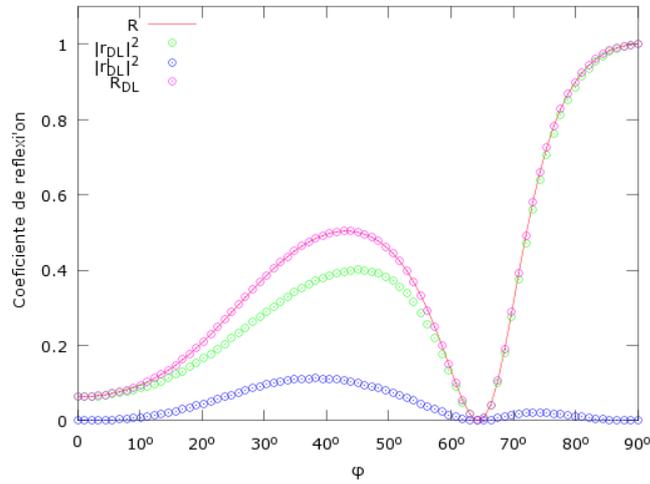


Figura 4-5: Consistencia entre los coeficientes de reflexión en el problema con inversión de espín, estudiado en la referencia [13], y los obtenidos en la ecuación (4-23). La suma de la contribución del término sin inversión de espín ($|r_{DL}^2|$), y con inversión de espín ($|r'_{DL}{}^2|$), denotada por R_{DL} , concuerda con nuestro resultado.

Capítulo 5

Tunelamiento Klein en grafeno con gap

Previamente, en el capítulo 2, sección 2.4, se ha mencionado que hay propiedades que hacen del grafeno un material poco convencional. Entre ellas, dos propiedades se destacan: La primera es que la relación de dispersión, cerca de las esquinas de la primera zona de Brillouin, es lineal con respecto a la función de onda, en vez de ser parabólica [37]; la segunda es que, debido a la presencia de dos puntos equivalentes en la celda unitaria de la red cristalina, el comportamiento de los portadores de carga es quirral (propiedad física análoga a la helicidad, definida en la ecuación (2-10)) [36][46]. Estos hechos permiten describir la dinámica de los portadores de carga a partir de la ecuación de Dirac con masa igual a cero [48][24], y debido a ello, es posible la realización de la paradoja de Klein en este sistema físico [25][27]. En este capítulo se presenta un modelo para extender el problema de la paradoja de Klein al grafeno con gap, donde los portadores de carga en este caso adquieren una masa efectiva [26], y se estudia el comportamiento de los coeficientes de reflexión y transmisión en función del gap.

5.1. Relación de dispersión en el grafeno con gap

Para iniciar, se muestra cómo un gap afecta la relación de dispersión en el material. Como ya se mencionó, una de las características que hacen del grafeno un material interesante desde el punto de vista de la mecánica cuántica relativista, es que la relación de dispersión, cerca de las esquinas de la primera zona de Brillouin, es lineal [37]

$$|E - E_C| = \hbar v_F |\delta \mathbf{k}|, \quad (5-1)$$

con E la energía del portador de carga, E_C la energía en el punto de Dirac, $\delta \mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_C$ el desplazamiento del vector de onda \mathbf{k} , con respecto a una esquina de la zona de Brillouin, representado por \mathbf{k}_C . La cantidad v_F corresponde a la velocidad de Fermi de los portadores de carga en el sistema, que tiene un valor aproximado de $c/300 \approx 10^6$ m/s, la cual depende de los parámetros de la red [37] (ver el apéndice A, ecuación (A-46) para ver esta dependencia), y ha sido comprobada experimentalmente [24].

Haciendo una redefinición de los parámetros de la siguiente manera: $E - E_C \rightarrow E$ y $\delta \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}$, la ecuación 5-1 cambia a

$$|E| = \hbar v_F |\mathbf{k}|. \quad (5-2)$$

Si se observa esta ecuación, y la energía de un fermión relativista no masivo

$$E = \pm \hbar c k, \quad (5-3)$$

se concluye su semejanza, donde la velocidad de Fermi en el grafeno toma el papel de la velocidad de la luz en el vacío.

Si se induce un gap de magnitud Δ en el material, el resultado es que los portadores de carga ahora van a adquirir una masa efectiva proporcional a este gap [26], y la hipótesis es que esta masa será pequeña, es decir, tal que se siga cumpliendo la aproximación relativista a partir de la ecuación de Dirac (de otro modo, la energía en reposo sería lo suficientemente grande como para considerar aproximaciones no relativistas). Se propone que la relación de dispersión en este caso toma la siguiente forma [26]

$$|E| = \sqrt{\hbar^2 v_F^2 k^2 + \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2}. \quad (5-4)$$

En la referencia [26] se plantea la misma relación de dispersión, pero con Δ en lugar de $\Delta/2$; nosotros efectuamos ese cambio en analogía con el gap en el mar de Dirac, que corresponde a $2mc^2$, es decir, el gap es dos veces la masa del fermión [9, pag. 292].

La relación de dispersión corresponde a la energía de una partícula relativista con momento $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, y de nuevo, la velocidad de Fermi hace el papel de velocidad de la luz. El gap de energía hace el papel de la masa, y se justifica porque en física del estado sólido el gap “es la energía mínima para añadir una excitación al sistema” [41, Pag. 140], mientras que en teoría cuántica de campos, donde las excitaciones son partículas, “el gap corresponde a la masa de la partícula” [41, Pag. 140]. En este caso, observando la estructura de bandas modificada, se infiere que la masa efectiva de los portadores de carga corresponde a $m_{ef} = \Delta/(2v_F^2)$.

Una ecuación equivalente a la mostrada en (5-4) es

$$E^2 - \hbar^2 v_F^2 k^2 = \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2, \quad (5-5)$$

lo cual quiere decir que, para el caso de portadores de carga masivos, la relación de dispersión es hiperbólica.

Debido a esta relación de dispersión, y considerando además que la naturaleza quiral de los portadores de carga no es modificada por el gap, es posible estudiar la dinámica de los portadores de carga en el grafeno con gap a partir de la ecuación de Dirac para fermiones masivos, y en particular, se pueden aplicar los resultados de los coeficientes de transmisión y reflexión del tunelamiento Klein obtenidos en el capítulo 4, sección 4.1.

Para finalizar esta sección, y con el objetivo de dar sustento experimental a las hipótesis recién planteadas, vale la pena mencionar que recientemente se ha logrado dotar de gap al grafeno a partir de diversas técnicas experimentales. Por ejemplo, el crecimiento epitaxial de grafeno sobre un sustrato de SiC, logra abrir un gap de valor $\Delta = 0,26\text{eV}$ [30], o el dopaje de material con átomos de Nitrógeno (N-doped graphene), determina uno de $\Delta = 0,16\text{eV}$ [38]. Los anteriores son apenas algunos ejemplos de como en el grafeno monocapa los portadores de carga pueden adquirir una masa efectiva diferente de cero (ver referencia [40] para una revisión a los métodos experimentales para el dopaje de grafeno). Otra forma de inducir gap al material, sin necesidad de dopaje, es a partir de restringir el grafeno a un sistema de solo una dimensión, reduciendo el ancho del material a solo unos cuantos átomos, resultando en lo que se conoce como “nanocintas de grafeno”, o GNR (por las siglas en inglés de Graphene nanoribbons). Esto logra abrir un gap en el material que es indirectamente proporcional al ancho del material [49], y puede ser tan grande como 1 eV [49]. Sin embargo, los GNR no se pretenden estudiar debido a la naturaleza unidimensional del sistema.

5.2. Gas de Fermi relativista en dos dimensiones para fermiones masivos

La hipótesis que se ha planteado es que en presencia de gap, los portadores de carga se siguen comportando como fermiones libres, salvo que ahora poseen una masa efectiva. Con esto en cuenta, y con el objetivo de establecer una conexión clara entre el problema de la paradoja de Klein y un problema similar en el grafeno con gap, se introduce el formalismo del gas de fermiones relativista, para fermiones masivos. Con este análisis, es posible obtener la relación entre la concentración de portadores de carga en el material y energía de Fermi del sistema, que en última instancia, corresponderá a la energía de incidencia y el valor del potencial en el tunelamiento Klein.

Se considera un sistema de fermiones libres con energía $E^2 = \hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4$, confinados en una región espacial cuadrada de área $A = L^2$, de modo que no hay interacción entre las partículas. En este sistema, a una temperatura T dada, el número de portadores de carga está dado por el producto entre la densidad de estados del sistema, y la distribución de Fermi-Dirac, de la siguiente forma

$$N = \int_{mc^2}^{\infty} g(E) f(E) dE = \frac{g' A}{2\pi \hbar^2 c^2} \int_{mc^2}^{\infty} \frac{E}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} dE, \quad (5-6)$$

donde g' es el degeneramiento por estado de onda plana, μ es el potencial químico y k_B la constante de Boltzmann. En el apéndice F se presenta un desarrollo exhaustivo del formalismo del gas relativista para fermiones masivos, y se demuestra que el número de estados de onda plana para una energía dE corresponde a

$$g(E) dE = \frac{g' A}{2\pi \hbar^2 c^2} E dE. \quad (5-7)$$

Para conocer el número de partículas en función de la energía de Fermi, es necesario hacer la aproximación $T \rightarrow 0\text{K}$, debido que en éste límite el potencial químico corresponde a la

energía de Fermi [41]. En el apéndice F se demuestra que el número de partículas en el sistema se relaciona con la energía de Fermi a partir de la siguiente relación

$$N = \left(\frac{g' A}{4\pi\hbar^2 c^2} \right) ((E_F + mc^2)^2 - m^2 c^4), \quad (5-8)$$

de donde despejando E_F , se obtiene finalmente

$$E_F = \left(\frac{4\pi\hbar^2 c^2}{g'} n + m^2 c^4 \right)^{1/2} - mc^2, \quad (5-9)$$

siendo $n = N/A$ la densidad de portadores de carga en el material.

Para completar la analogía del tunelamiento Klein en la ecuación de Dirac con el problema en el grafeno con gap, es necesario tener en cuenta que la energía de Fermi corresponde a la energía del estado electrónico más energético del sistema (en el caso de estados continuos) [42, Pag. 28], y debido a ello, solo los portadores de carga que tengan esta energía pueden interactuar en el sistema, dado que los estados de menor energía se encuentran totalmente ocupados. En conclusión, se puede considerar que la energía de los electrones libres en el problema de tunelamiento Klein (discutido en la sección 4.1), corresponde a la energía de Fermi mostrada en la ecuación 5-9.

Como paso previo a mostrar los coeficientes de transmisión y reflexión, resulta útil mostrar la equivalencia entre las cantidades físicas en ambos problemas: Tunelamiento Klein en mecánica cuántica relativista y un problema equivalente en el grafeno con gap. La tabla **5-1** muestra estas equivalencias.

Cantidad física	Mecánica cuántica relativista	Equivalencia en grafeno con gap
Velocidad de la luz	c	v_F
Energía en reposo	mc^2	$m_{ef} v_F^2 = \frac{\Delta}{2}$
Degeneramiento (g')	$g_s = 2$	$g_s g_v = 4$

Tabla **5-1**: Equivalencias entre algunas cantidades físicas para el problema de la paradoja de Klein en mecánica cuántica relativista, y un problema equivalente en grafeno con gap. La cantidad g_s corresponde al degeneramiento por el espín del electrón (portador de carga), mientras que $g_v = 2$ corresponde al degeneramiento de valle, es decir debido a los dos átomos equivalentes en la celda unitaria de la red cristalina del grafeno.

5.3. Tunelamiento Klein

Con el formalismo desarrollado hasta ahora, es posible estudiar el tunelamiento Klein en el contexto del grafeno con gap. El problema estudiado será el siguiente: Se realiza un juntura del tipo npn a partir de grafeno monocapa con gap, esto es, una región de ancho L dopada con portadores de carga positivos (huecos), rodeada de dos regiones dopadas con electrones. La diferencia entre las energías de Fermi en las regiones genera una barrera de potencial similar a la estudiada en el capítulo 4, así que los portadores de carga sufren un proceso de dispersión similar al allí descrito. En la figura **5-1** se muestra esquemáticamente como es el proceso de dispersión, y también la relación de dispersión hiperbólica

de los portadores de carga en cada región.

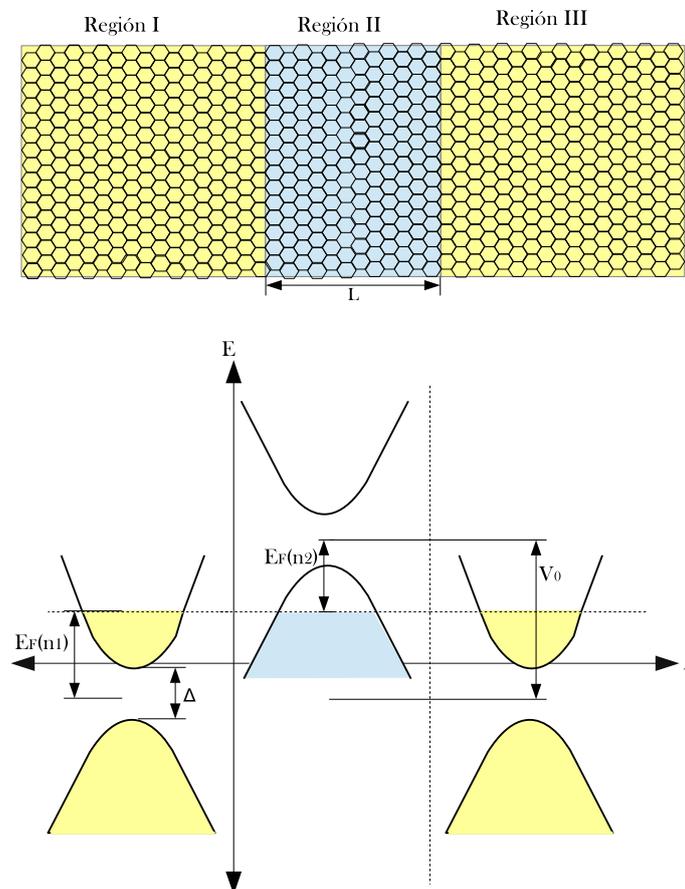


Figura 5-1: Esquema de la juntura del tipo npn para probar el proceso de dispersión de los portadores de carga en grafeno monocapa con gap. En la parte superior, se definen las regiones del sistema, en las regiones I y III hay una densidad de portadores por unidad de área n_1 negativos, mientras que en la región II hay una densidad n_2 de portadores de carga positivos (huecos). En la parte inferior, se muestra la relación de dispersión hiperbólica en cada región, identificando la energía de Fermi E_F en función de la densidad de portadores n , el gap entre las bandas de valencia y conducción Δ , y el potencial V_0 que corresponde a la suma de las energía de Fermi en cada región.

Si en las regiones espaciales I y III (ver figura 5-1) hay una densidad de portadores de carga electrónicos n_1 , y en la región II una densidad de huecos n_2 , entonces la energía de incidencia de los portadores de carga y el potencial se pueden escribir en términos de la energía de Fermi en la ecuación (5-9). Como se mencionó previamente, la energía de Fermi es la energía de los estados más energéticos del sistema, y por ello, solo los portadores con esta energía pueden interactuar [42, Pag. 28]. Así, la energía de incidencia corresponde a la energía de Fermi en la región I, calculada a partir de la densidad n_1 . De este modo, si en la ecuación (5-9) se aplican las equivalencias mostradas en la tabla 5-1, la energía de

incidencia es

$$E = \left(\pi \hbar^2 v_F^2 n_1 + \frac{\Delta^2}{4} \right)^{1/2} - \frac{\Delta}{2}. \quad (5-10)$$

El degeneramiento corresponde a $g' = 4$ debido al degeneramiento de espín 1/2, y el degeneramiento debido a la existencia de dos puntos equivalentes en las esquinas de la zona de Brillouin, también llamado degeneramiento de valle [47].

Por otro lado, el valor del potencial V_0 corresponde a la suma entre las energías de Fermi de ambas regiones

$$V_0 = \left(\pi \hbar^2 v_F^2 n_1 + \frac{\Delta^2}{4} \right)^{1/2} + \left(\pi \hbar^2 v_F^2 n_2 + \frac{\Delta^2}{4} \right)^{1/2} - \Delta, \quad (5-11)$$

de este modo, es posible aplicar las ecuaciones (4-23) y (4-24), que representan los coeficientes de transmisión y reflexión para la barrera de potencial

$$R = \begin{cases} \frac{V_0^2 (E^2 - c^2 p_1^2) \sin^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right)}{p_1^2 q_1^2 c^4 \cos^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right) + (E V_0 - c^2 p_1^2)^2 \sin^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right)}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ \frac{V_0^2 (E^2 - c^2 p_1^2) \sinh^2 \left(\frac{\bar{q}_1 L}{\hbar} \right)}{p_1^2 \bar{q}_1^2 c^4 \cosh^2 \left(\frac{\bar{q}_1 L}{\hbar} \right) + (E V_0 - c^2 p_1^2)^2 \sinh^2 \left(\frac{\bar{q}_1 L}{\hbar} \right)}, & \text{si } E - m' \leq V_0 \leq E + m', \\ \frac{V_0^2 (E^2 - c^2 p_1^2) \sin^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right)}{p_1^2 q_1^2 c^4 \cos^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right) + (E V_0 - c^2 p_1^2)^2 \sin^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right)}, & \text{si } E + m' \leq V_0, \end{cases} \quad (5-12)$$

$$T = \begin{cases} \frac{q_1^2 p_1^2 c^4}{p_1^2 q_1^2 c^4 \cos^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right) + (E V_0 - c^2 p_1^2)^2 \sin^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right)}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ \frac{p_1^2 \bar{q}_1^2 c^4}{p_1^2 \bar{q}_1^2 c^4 \cosh^2 \left(\frac{\bar{q}_1 L}{\hbar} \right) + (E V_0 - c^2 p_1^2)^2 \sinh^2 \left(\frac{\bar{q}_1 L}{\hbar} \right)}, & \text{si } E - m' < V_0 < E + m', \\ \frac{q_1^2 p_1^2 c^4}{p_1^2 q_1^2 c^4 \cos^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right) + (E V_0 - c^2 p_1^2)^2 \sin^2 \left(\frac{q_1 L}{\hbar} \right)}, & \text{si } E + m' \leq V_0, \end{cases} \quad (5-13)$$

donde $m' = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p_2^2}$ y $\bar{q}_1 = |\sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 c^4 - c^2 p_2^2}|$ (en caso que q_1 sea imaginario). En las anteriores ecuaciones se ha recuperado el caso $\hbar \neq 1$ y $c \neq 1$. Para poder aplicar estas ecuaciones al presente caso de estudio, se debe hacer el cambio $c \rightarrow v_F$, y además definir los vectores de onda en cada región como sigue

$$\mathbf{k} = \hbar \mathbf{p}, \quad \mathbf{k}' = \hbar \mathbf{q}, \quad (5-14)$$

de tal forma que sus componentes quedan definidas como

$$\begin{aligned} k_1 &= \hbar p_1, & k_2 &= \hbar p_2, \\ k'_1 &= \hbar q_1, & k'_2 &= k_2. \end{aligned} \quad (5-15)$$

La relación de dispersión para cada región espacial es

$$\begin{aligned} E^2 &= \hbar^2 v_F^2 k^2 + \frac{\Delta^2}{4}, & \text{en las regiones I y II,} \\ (E - V_0)^2 &= \hbar^2 v_F^2 k'^2 + \frac{\Delta^2}{4}, & \text{en la región II,} \end{aligned} \quad (5-16)$$

por lo que las ecuaciones (5-12) y (5-13), para el caso del grafeno con gap, toman la siguiente forma

$$R = \begin{cases} \frac{\frac{V_0^2}{\hbar^2 v_F^2} \left(\frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{k_1^2}{\hbar^2} \right) \sin^2(k'_1 L)}{k_1^2 (k'_1)^2 \cos^2(k'_1 L) + \left(\frac{E V_0}{\hbar^2 v_F^2} - k_1^2 \right)^2 \sin^2(k'_1 L)}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ \frac{\frac{V_0^2}{\hbar^2 v_F^2} \left(\frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{k_1^2}{\hbar^2} \right) \sinh^2(\bar{k}'_1 L)}{k_1^2 (\bar{k}'_1)^2 \cosh^2(\bar{k}'_1 L) + \left(\frac{E V_0}{\hbar^2 v_F^2} - k_1^2 \right)^2 \sinh^2(\bar{k}'_1 L)}, & \text{si } E - m' \leq V_0 \leq E + m', \\ \frac{\frac{V_0^2}{\hbar^2 v_F^2} \left(\frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{k_1^2}{\hbar^2} \right) \sin^2(k'_1 L)}{k_1^2 (k'_1)^2 \cos^2(k'_1 L) + \left(\frac{E V_0}{\hbar^2 v_F^2} - k_1^2 \right)^2 \sin^2(k'_1 L)}, & \text{si } E + m' \leq V_0. \end{cases} \quad (5-17)$$

$$T = \begin{cases} \frac{k_1^2(k'_1)^2}{k_1^2(k'_1)^2 \cos^2(k'_1 L) + \left(\frac{EV_0}{\hbar^2 v_F^2} - k_1^2\right)^2 \sin^2(k'_1 L)}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ \frac{k_1^2(\bar{k}'_1)^2}{k_1^2(\bar{k}'_1)^2 \cosh^2(k'_1 L) + \left(\frac{EV_0}{\hbar^2 v_F^2} - k_1^2\right)^2 \sinh^2(\bar{k}'_1 L)}, & \text{si } E - m' < V_0 < E + m', \\ \frac{k_1^2(k'_1)^2}{k_1^2(k'_1)^2 \cos^2(k'_1 L) + \left(\frac{EV_0}{\hbar^2 v_F^2} - k_1^2\right)^2 \sin^2(k'_1 L)}, & \text{si } E + m' \leq V_0, \end{cases} \quad (5-18)$$

donde $m' = \sqrt{(\Delta/2)^2 + \hbar^2 v_F^2 k_2^2}$. No sobra mencionar que para este caso la probabilidad se conserva: $R + T = 1$.

Una vez caracterizados los coeficientes de reflexión y transmisión para la juntura npn, en el contexto del grafeno con gap, se procede a estudiar su comportamiento en términos de algunos valores reportados en la literatura para n_1 , n_2 y Δ . Siempre se contrastarán los resultados obtenidos con el tunelamiento Klein para grafeno puro, reportados en la referencia [25].

En las figuras **5-2** y **5-3** se encuentra el comportamiento del coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia de los fermiones, considerando que la densidad de electrones es $n_1 = 0,5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ y que la concentración de huecos es $n_2 = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, esto con el objetivo de comparar los resultados con los obtenidos previamente para grafeno sin gap [25]. Para grafeno monocapa sin gap, la amplitud de probabilidad de reflexión está dada por [25],

$$r_{(\text{sin gap})} = 2ie^{i\phi} \sin(k'_1 L) \frac{\sin \phi - ss' \sin \theta}{ss' [e^{-ik'_1 L} \cos(\phi + \theta) + e^{ik'_1 L} \cos(\phi - \theta)] - 2i \sin(k'_1 L)}, \quad (5-19)$$

con $s = \text{sign}(E)$ y $s' = \text{sign}(E - V_0)$, las funciones signo de E y $E - V_0$, respectivamente. Los demás términos tienen los mismos significados que los que se han trabajado hasta ahora, teniendo en cuenta que $m = 0$. Así, en las figuras **5-2** y **5-3** se muestra que el coeficiente de transmisión calculado a partir de la ecuación (5-19), haciendo $T = 1 - |r_{(\text{sin gap})}|^2$, y como se puede observar, concuerda exactamente con el coeficiente de transmisión calculado a partir de la ecuación (5-18) en el caso $\Delta = 0$, lo cual supone un soporte sólido al formalismo aquí desarrollado.

Observando las gráficas **5-2** y **5-3** se comprueba que para incidencia normal ($\phi = 0$), todos los fermiones son transmitidos en el grafeno sin gap, lo cual constituye una característica importante de este material [25]. Sin embargo, esta situación es distinta en el caso del grafeno con gap, en donde el coeficiente de transmisión toma un valor distinto de 1 en incidencia normal, reforzando lo reportado previamente en un problema similar [26].

La existencia de ángulos de transmisión total (*i.e.* ángulos para los cuales el coeficiente de transmisión es igual a 1, y por ende la barrera se vuelve transparente), se presenta también en el caso del grafeno con gap, sin embargo, cuando el valor del gap aumenta en comparación con la energía de incidencia del fermión, se evidencia la reducción progresiva del número de estos ángulos, hasta desaparecer completamente. La desaparición de los picos de transmisión se muestra claramente en la figura 5-2 cuando $\Delta = 80$ meV, que corresponde a una masa efectiva de $mv_F^2 = 40$ meV, y según la densidad de portadores de carga planteada para ese ejemplo se tiene una energía de incidencia $E = 51,63$ meV y un potencial de valor $V_0 = 134,88$ meV. Lo anterior implica que la energía en reposo de la partícula corresponde a un 80% de la energía total de incidencia. Valores muy altos de gap hacen que el sistema ya no sea considerado como relativista, y por ende el presente modelo no puede ser aplicado a esos casos.

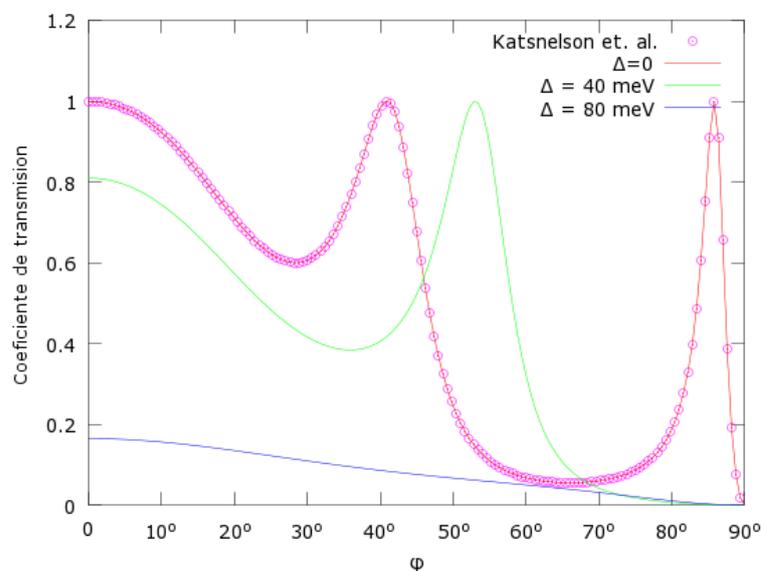


Figura 5-2: Coeficiente de transmisión en grafeno con gap considerando que el ancho de la barrera tiene un valor de $L = 100$ nm, la densidad de portadores de carga electrónicos en las regiones I y III es $n_1 = 0,5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ y la densidad de huecos en la región II es $n_2 = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Se consideran las situaciones de grafeno sin gap, y grafeno con gaps de valores $\Delta = 0,040$ eV y $\Delta = 0,080$ eV, de modo que las masas efectivas de los fermiones en cada sistema son, 0, 20 meV y 40 meV, respectivamente. Las energías de incidencia son 82.44 meV, 64.83 meV y 51.63 meV, respectivamente, y los potenciales son 199.02 meV, 163.11 meV y 134.88 meV, respectivamente. Los círculos rosados corresponden al coeficiente de transmisión asociado a la amplitud de probabilidad en la ecuación (5-19).

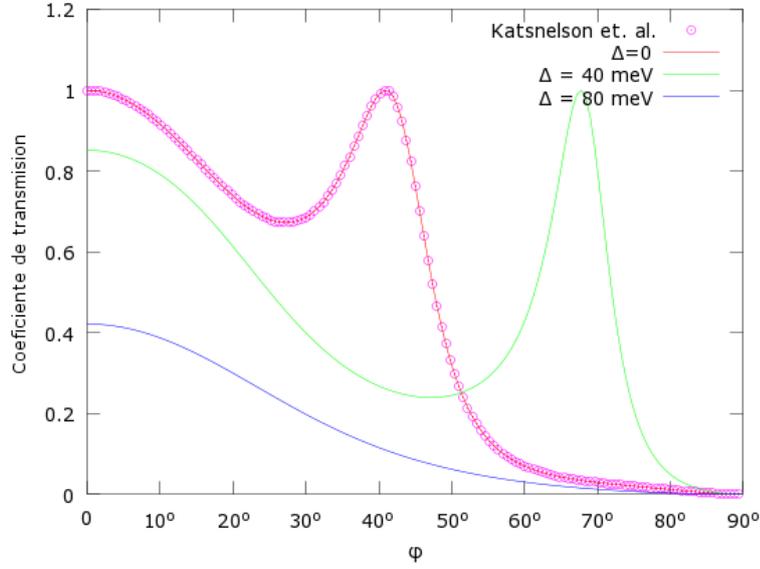


Figura 5-3: Coeficiente de transmisión en grafeno con gap considerando que el ancho de la barrera tiene un valor de $L = 80\text{nm}$, la densidad de portadores de carga electrónicos en las regiones I y III es $n_1 = 0,5 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ y la densidad de huecos en la región II es $n_2 = 1 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$. De este modo, los valores de masa efectiva de los fermiones, energía de incidencia y potencial son los mismos que los mostrados en la figura 5-2.

Valores de gap tan grandes como $\Delta = 0,26\text{eV}$ reportados en la referencia [30], o $\Delta = 0,16\text{eV}$ reportado en la referencia [38], hacen que sea necesario aumentar la densidad de portadores de carga para que la energía cinética de los portadores sea comparable con su energía en reposo. En particular, se considera en las figuras 5-4 y 5-5 unas densidades de portadores de carga de valor $n_1 = 0,5 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$ y $n_2 = 1 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$, es decir, un orden de magnitud mayor que el considerado previamente, las cuales son posibles de obtener experimentalmente para grafeno sin gap [43]. En este caso también se observan ángulos de incidencia normal que se ven suprimidos a medida que el gap aumenta, ocurriendo algo similar al disminuir el ancho del potencial. De este modo, el efecto del gap en el grafeno juega un rol principal a la hora de manipular las propiedades de la transmisión, del cual se infieren dos conclusiones principales: la primera, es que se evita la transmisión total de fermiones para incidencia normal, y la segunda, se limita la aparición de ángulos de transmisión total, llegando incluso a suprimir su existencia totalmente. En particular, estos ángulos de transmisión total cumplen la relación mostrada en la ecuación 4-29, que modificada para el caso de grafeno con gap es

$$\sqrt{k'^2 - k^2 \sin^2 \phi} = \frac{\pi l}{L}, \quad \text{Siendo } l \text{ un número entero,} \quad (5-20)$$

así, para que se supriman completamente los ángulos de transmisión total, se debe cumplir que

$$\sin \phi = \sqrt{\frac{k'^2}{k^2} - \frac{\pi^2 l^2}{k^2 L^2}} > 1. \quad (5-21)$$

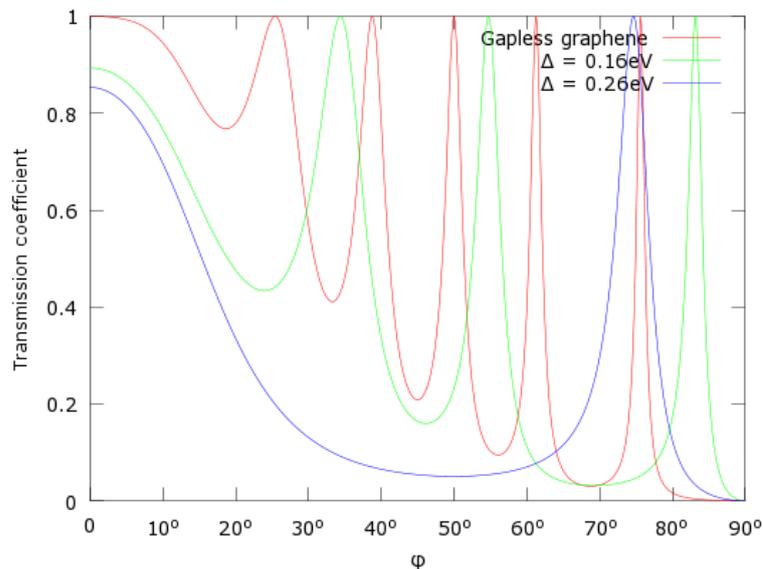


Figura 5-4: Coeficiente de transmisión en grafeno con gap considerando que el ancho de la barrera tiene un valor de $L = 100\text{nm}$, la densidad de portadores de carga electrónicos en las regiones I y III es $n_1 = 0,5 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$ y la densidad de huecos en la región II es $n_2 = 1 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$. Se consideran las situaciones de grafeno sin gap, y grafeno con gaps de valores $\Delta = 0,16\text{eV}$ y $\Delta = 0,26\text{eV}$, de modo que las masas efectivas de los fermiones en cada sistema son, 0, 80meV y 130meV, respectivamente. Las energías de incidencia son 261meV, 193meV y 161meV, respectivamente, y los potenciales son 629meV, 490meV y 422meV, respectivamente.

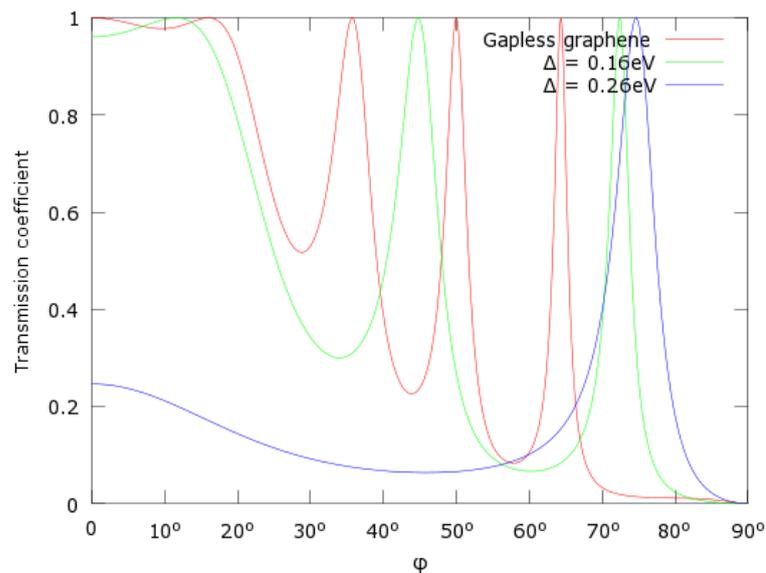


Figura 5-5: Coeficiente de transmisión en grafeno con gap considerando que el ancho de la barrera tiene un valor de $L = 80\text{nm}$, la densidad de portadores de carga electrónicos en las regiones I y III es $n_1 = 0,5 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$ y la densidad de huecos en la región II es $n_2 = 1 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$. De este modo, los valores de masa efectiva de los fermiones, energía de incidencia y potencial son los mismos que los mostrados en la figura 5-4.

En el presente capítulo se ha desarrollado un formalismo novedoso para el estudio del tunelamiento Klein en el grafeno con gap, logrando reproducir exitosamente los resultados obtenidos en el grafeno monocapa sin gap [25]. En estudios previos, se ha intentado obtener los coeficientes de transmisión y reflexión para grafeno con gap usando el formalismo de la mecánica cuántica relativista [26], sin embargo, al no considerar la hipótesis del gas de fermiones relativista para establecer la conexión entre las energías de incidencia y el potencial, y las energías de Fermi en cada región, no hay una manera directa de relacionar sus resultados con lo reportado previamente en la literatura. De este modo, nuestro enfoque puede ser considerado como un aporte sustancial para el estudio del tunelamiento Klein en el grafeno con gap, y los resultados propuestos quedan pendientes para su demostración experimental.

Capítulo 6

Conclusiones

En la presente tesis de maestría se estudió el tunelamiento Klein en dos dimensiones en el contexto de la mecánica cuántica relativista, específicamente, bajo el formalismo de la ecuación de Dirac. Para los dos potenciales estudiados, el potencial paso y el potencial barrera, se obtuvo que el comportamiento de los fermiones al ser dispersados es diferente en cada caso, por eso es necesario analizar los resultados por separado, como se muestra a continuación.

Al realizar el estudio sobre el potencial paso en dos dimensiones, hemos demostrado dos resultados principales: Primero, existe la posibilidad, para algunos ángulos de incidencia, de que el coeficiente de transmisión sea mayor que 1; segundo, existe conservación de la probabilidad sólo para algunos casos específicos de energía de incidencia, ángulo de incidencia y potencial. En este segundo caso, hemos demostrado que si $V_0 < 2E$ existe un ángulo crítico a partir del cual el coeficiente de reflexión es siempre igual a 1, mientras que el coeficiente de transmisión no. Además, se logra establecer la conexión entre este ángulo crítico y la conservación de la probabilidad en el problema, de la siguiente forma

- *Si $V_0 \leq E - m$* : La probabilidad se conserva si el ángulo de incidencia es menor al ángulo crítico ϕ_c mostrado en la ecuación (3-32).
- *Si $E - m < V_0 < E + m$* : No se conserva la probabilidad para ningún ángulo de incidencia.
- *Si $E + m \leq V_0 < 2E$* : La probabilidad se conserva si el ángulo de incidencia es menor al ángulo crítico ϕ_c mostrado en la ecuación (3-32).
- *Si $V_0 \geq 2E$* : La probabilidad se conserva para todos los ángulos de incidencia. No hay existencia de ángulo crítico.

Analizar estos resultados desde el punto de vista de la ecuación de Dirac no es sencillo, debido a que sin segunda cuantización ella describe el comportamiento de una partícula, mientras que en este problema empiezan a manifestarse efectos de muchos cuerpos, como la creación espontánea de pares partícula-antipartícula [9] [19]. Esta no conservación de la probabilidad, que no es sino manifestación de la paradoja de Klein, tiene consecuencias importantes para la interpretación de los fenómenos físicos que se llevan a cabo en el proceso de dispersión, sin embargo, es necesario usar teoría cuántica de campos para

desarrollar un adecuado análisis. Bajo ese formalismo, el consenso general de la comunidad científica afirma que la creación espontánea de pares es un mecanismo fundamental para la explicación y solución de la paradoja de Klein [7][8][12][19][21][22].

En el análisis de la dispersión en dos dimensiones sobre el potencial barrera, se demuestra que sí se conserva la probabilidad en todos los casos posibles. Esto no quiere decir que en el problema no haya creación espontánea de pares partícula-antipartícula, sino que este proceso queda confinado en la región definida por el potencial. Por otro lado, los resultados reproducen satisfactoriamente aspectos reportados previamente en la literatura, como son la existencia de ángulos para los cuales hay transmisión total [13][25], e incluso, proponemos que para un valor dado de potencial V_0 , existe un ángulo para el cual hay transmisión total para un amplio conjunto de anchos de potencial, siempre y cuando ellos cumplan las condiciones mencionadas en el capítulo 4, sección 4.1 (ver figura 4-4).

Previamente se había estudiado la dispersión en dos dimensiones sobre potencial paso y potencial barrera, en el formalismo de la ecuación de Dirac, con el objetivo de hallar los coeficientes de transmisión y reflexión, en particular, mencionamos los trabajos planteados en las referencias [13] y [15]. En dichos trabajos se propone que el plano de movimiento de los fermiones es tal que la proyección de espín de las partículas puede ser afectada por la interacción con el potencial, y por ende, es posible que haya inversión de espín en el proceso de dispersión [13][15]. En nuestro estudio se ha considerado que el espín está proyectado perpendicularmente al plano de movimiento, y por este motivo los potenciales no afectan el espín de las partículas, lo que finalmente conduce a que no haya probabilidad de reflexión o transmisión asociada a términos de inversión de espín. Sin embargo, como prueba de la consistencia de los resultados mostrados en la presente tesis, hemos demostrado que la suma entre los coeficientes de reflexión con inversión y sin inversión de espín, reportados en la referencia [13], es igual al coeficiente de reflexión obtenido por nosotros (para los dos potenciales considerados), lo cual da validez a nuestro estudio.

Por otro lado, se plantea la aplicación de los resultados obtenidos en la barrera de potencial para la dispersión en una juntura de tipo npn en grafeno monocapa con gap. Para lograr la conexión entre el problema en mecánica cuántica relativista, y el problema en este sistema de estado sólido, hemos aplicado el formalismo del gas de Fermi relativista para fermiones masivos en dos dimensiones, obteniendo una relación entre la densidad de portadores de carga en el material y la energía de Fermi en cada región de la juntura. La analogía se completa teniendo en cuenta que el gap en el grafeno monocapa dota de una masa efectiva a los portadores de carga. De este modo, se propone que la dinámica de los portadores de carga, en el grafeno con gap, es descrita por una ecuación de Dirac efectiva con portadores de carga masivos, a diferencia que en el grafeno monocapa sin gap, donde los portadores se describen por una ecuación de Dirac sin masa. Así, con el formalismo introducido hemos obtenido los coeficientes de transmisión y reflexión en función de la densidad de portadores de carga en la juntura npn, y en función del gap en el material.

Con el modelo propuesto se ha reproducido exitosamente los coeficientes de transmisión y reflexión en grafeno sin gap, reportados en la referencia [25]. Un hecho particular en el grafeno monocapa, es que en incidencia normal el coeficiente de transmisión siempre es

igual a 1 [25], hecho que se debe a la conservación de la quiralidad de los portadores de carga [25][36]. Sin embargo, en el grafeno monocapa con gap demostramos que lo anterior ya no es válido, en concordancia con lo reportado previamente [26], de hecho, entre más aumenta el gap, menor es el coeficiente de transmisión en incidencia normal. También es conocido que en el grafeno existen ángulos de incidencia para los cuales la barrera es transparente (esto es, el coeficiente de transmisión es igual a 1) [25], en conformidad a lo que sucede en la paradoja de Klein en potencial barrera. En nuestro análisis se observa que también hay presencia de dichos ángulos, sin embargo, se demuestra que a medida que aumenta el gap en el material se limita la existencia de ellos, llegando incluso a suprimirse totalmente (ver por ejemplo la figura **5-3**).

En conclusión, se ha presentado un formalismo novedoso para el estudio de la dispersión de portadores de carga en una juntura del tipo npn, en el contexto del grafeno monocapa con gap. Bajo este desarrollo ha sido posible reproducir completamente los resultados previos para el grafeno sin gap, y con el cual se plantean analíticamente nuevos resultados para el desarrollo de nuevos materiales basados en grafeno dopado o con impurezas, que se caracterizan por presencia de gap en la estructura de bandas de energía.

Apéndice A

Modelo de Tight Binding para obtener la relación de dispersión en el grafeno monocapa

En el capítulo 2, sección 2.4.2 se ha mostrado el formalismo necesario para encontrar la relación de dispersión en el grafeno monocapa bajo el modelo de tight binding. El objetivo en el presente apéndice es realizar los cálculos explícitos para encontrar la energía de los portadores de carga en función del vector de onda $\mathbf{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j}$. Con este fin, se calculará la energía de los electrones en función de su dependencia con las posiciones relativas entre los átomos más cercanos a un átomo de referencia, la cual está dada a partir de la siguiente ecuación

$$E = H'_{11} \pm |H'_{12}|. \quad (\text{A-1})$$

Siendo,

$$H'_{11} = \frac{1}{N} \sum_{A',A} \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_{A'})] \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A'}) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \quad (\text{A-2})$$

$$H'_{12} = \frac{1}{N} \sum_{A,B} \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A)] \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B). \quad (\text{A-3})$$

Donde N representa el número de celdas unitarias en la red cristalina del grafeno; A, A' son subíndices que representan a los átomos del tipo A en la red del grafeno (ver figura **A-1**), mientras que el subíndice B representa átomos de ese tipo; la sumatoria se hace sobre cada uno de los índices mencionados. $X(\mathbf{r})$ representa la función de onda orbital de los electrones en el estado $2p_z$ para un átomo de carbono aislado [37]. El término “ \pm ” se elige negativo si el vector de onda se encuentra dentro de la primera zona de Brillouin, y positivo fuera de ella [37].

Ahora se procede a calcular explícitamente las cantidad H'_{11} a partir de los átomos vecinos de la red. Como primera aproximación, se consideran en la sumatoria solamente los términos que contienen hasta los vecinos más cercanos para un átomo del tipo A dado [37]. En la figura **A-1** se muestra que para un átomo del tipo A existen seis vecinos cercanos del mismo tipo, denotados como $A, 1; \dots; A, 6$. Con esto en mente, H'_{11} cambia a,

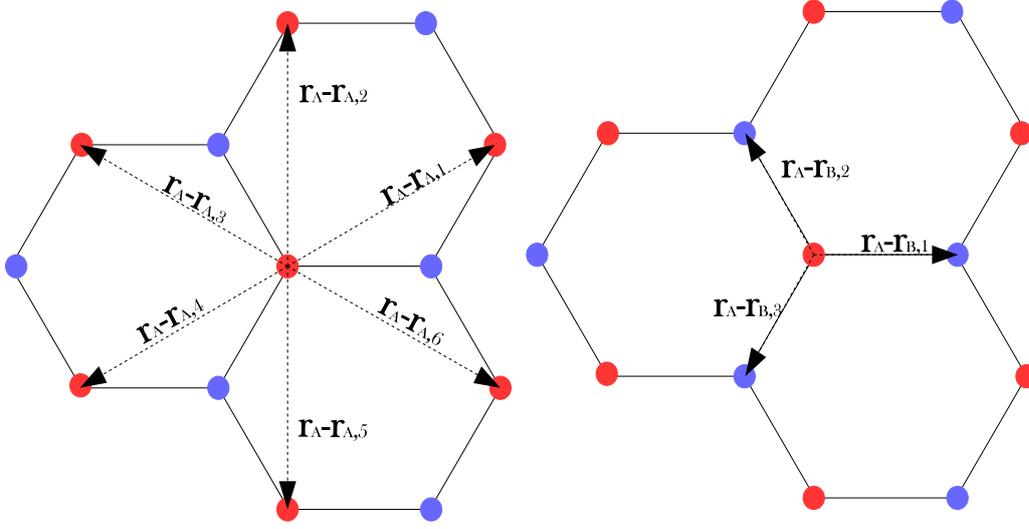


Figura A-1: Estructura cristalina del grafeno y vectores posición de los vecinos más cercanos a un átomo dado. La celda unitaria (no representada en la figura) define dos tipos de átomos, llamados tipo *A* (en color rojo) y tipo *B* (en color azul). A la izquierda, los vecinos más cercanos entre átomos de tipo *A*. A la derecha, los vecinos más cercanos entre los átomos de tipo *B*.

$$\begin{aligned}
 H'_{11} = & \frac{1}{N} \sum_A \left\{ \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_A)] \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) \right. \\
 & + \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_{A,1})] \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,1}) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) \\
 & + \dots \\
 & \left. + \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_{A,6})] \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,6}) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) \right\}. \tag{A-4}
 \end{aligned}$$

Se definen las siguientes cantidades,

$$E_0 = \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \tag{A-5}$$

$$-\gamma'_0 = \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,j}) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \quad \text{siendo } j = 1, 2, \dots, 6. \tag{A-6}$$

La anterior relación es válida para cualquier $j = 1, 2, \dots, 6$ debido a la simetría de la red. De este modo, la expresión para H'_{11} es ahora,

$$H'_{11} = \frac{1}{N} \sum_A \left\{ E_0 - \gamma'_0 \sum_{j=1}^6 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,j}]) \right\}. \tag{A-7}$$

El paso siguiente es calcular cada termino de la forma $\exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,j}])$ para cada átomo vecino A, j . Para ello, se expresan los vectores $\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,j}$ en sus componentes cartesianas, según lo mostrado en la figura 2-7. Cada uno de estos vectores se muestra a continuación,

$$\begin{aligned}
\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,1} &= a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{1}{2} \hat{j} \right), \\
\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,2} &= a \hat{j}, \\
\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,3} &= a \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{1}{2} \hat{j} \right), \\
\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,4} &= a \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - \frac{1}{2} \hat{j} \right), \\
\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,5} &= -a \hat{j}, \\
\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,6} &= a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - \frac{1}{2} \hat{j} \right).
\end{aligned} \tag{A-8}$$

Y con los anteriores vectores se obtiene de manera directa los siguientes resultados,

$$\begin{aligned}
\exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,1}]) &= \exp \left(2\pi a i \left[\frac{\sqrt{3}}{2} k_x + \frac{1}{2} k_y \right] \right) \\
&= \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) - \sin(\sqrt{3}\pi a k_x) \sin(\pi a k_y) \\
&\quad + i \sin(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) + i \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \sin(\pi a k_y).
\end{aligned} \tag{A-9}$$

$$\begin{aligned}
\exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,2}]) &= \exp(2\pi i a k_y) \\
&= \cos(2\pi a k_y) + i \sin(2\pi a k_y).
\end{aligned} \tag{A-10}$$

$$\begin{aligned}
\exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,3}]) &= \exp \left(2\pi a i \left[-\frac{\sqrt{3}}{2} k_x + \frac{1}{2} k_y \right] \right) \\
&= \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) + \sin(\sqrt{3}\pi a k_x) \sin(\pi a k_y) \\
&\quad - i \sin(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) + i \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \sin(\pi a k_y).
\end{aligned} \tag{A-11}$$

$$\begin{aligned}
\exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,4}]) &= \exp \left(2\pi a i \left[-\frac{\sqrt{3}}{2} k_x - \frac{1}{2} k_y \right] \right) \\
&= \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) - \sin(\sqrt{3}\pi a k_x) \sin(\pi a k_y) \\
&\quad - i \sin(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) - i \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \sin(\pi a k_y).
\end{aligned} \tag{A-12}$$

$$\begin{aligned}
\exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,5}]) &= \exp(-2\pi i a k_y) \\
&= \cos(2\pi a k_y) - i \sin(2\pi a k_y).
\end{aligned} \tag{A-13}$$

$$\begin{aligned}
 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,6}]) &= \exp\left(2\pi a i \left[\frac{\sqrt{3}}{2}k_x - \frac{1}{2}k_y\right]\right) \\
 &= \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) + \sin(\sqrt{3}\pi a k_x) \sin(\pi a k_y) \\
 &+ i \sin(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) - i \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \sin(\pi a k_y).
 \end{aligned} \tag{A-14}$$

Sumando cada uno de los términos se obtiene fácilmente que

$$\sum_{j=1}^6 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A,j}]) = 2 \cos(2\pi a k_y) + 4 \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y), \tag{A-15}$$

y por lo tanto, el resultado para el término H'_{11} es,

$$H'_{11} = \sum_A \frac{1}{N} \left[E_0 - 2\gamma'_0 \left\{ \cos(2\pi a k_y) + 2 \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) \right\} \right]. \tag{A-16}$$

Como el término dentro de la sumatoria no depende del átomo A , entonces el valor de dicha sumatoria es igual al número de átomos del tipo A en la red multiplicado por el término mencionado; y además debido a que el número de átomos del tipo A es igual a N , el número de celdas unitarias en toda la red, se llega al siguiente resultado final [37],

$$H'_{11} = E_0 - 2\gamma'_0 \left[\cos(2\pi a k_y) + 2 \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) \right]. \tag{A-17}$$

Se realiza ahora un procedimiento similar para calcular H'_{12} . De nuevo, se considera la aproximación en la cual solamente los términos de primeros vecinos entre los átomos considerados en la sumatoria, en los cuales los átomos mas cercanos a uno del tipo A es uno del tipo B , y *vice versa* [37],

$$H'_{12} = -\frac{1}{N} \sum_A \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{B,j}) \left\{ \sum_{j=1}^3 \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_{B,j} - \mathbf{r}_A)] \right\}. \tag{A-18}$$

En la anterior ecuación se consideran solamente los tres átomos vecinos del tipo B más cercanos a uno del tipo A , según se muestra en la figura **A-1**. Adicionalmente, se define la siguiente cantidad [37],

$$-\gamma_0 = \int d\tau X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{B,j}), \quad \text{Siendo } j = 1, 2, 3. \tag{A-19}$$

Con las anteriores consideraciones, H'_{12} aproximado hasta los primeros vecinos mas cercanos es,

$$H'_{12} = -\frac{1}{N} \sum_A \gamma_0 \left\{ \sum_{j=1}^3 \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_{B,j} - \mathbf{r}_A)] \right\}. \tag{A-20}$$

Por lo tanto, calculando los términos de la forma $\exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_{B,j} - \mathbf{r}_A)]$ para cada uno de los tres átomos vecinos más cercanos, ya se tendría el valor de H'_{12} en la aproximación de tight binding. La posición de los vectores vecinos más cercanos a un átomo A dado son,

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_{B,1} &= \frac{a}{\sqrt{3}} \hat{i}, \\ \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_{B,2} &= \frac{a}{\sqrt{3}} \left(-\frac{1}{2} \hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} \right), \\ \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_{B,3} &= \frac{a}{\sqrt{3}} \left(-\frac{1}{2} \hat{i} - \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} \right).\end{aligned}\tag{A-21}$$

Se calcula directamente del siguiente modo,

$$\begin{aligned}\exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_{B,1} - \mathbf{r}_A)] &= \exp\left(-2\pi i k_x \frac{a}{\sqrt{3}}\right) \\ &= \cos\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}} a k_x\right) - i \sin\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}} a k_x\right)\end{aligned}\tag{A-22}$$

$$\begin{aligned}\exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_{B,2} - \mathbf{r}_A)] &= \exp\left(-\frac{i\pi a}{3}(-\sqrt{3}k_x + 3k_y)\right) \\ &= \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \cos(\pi a k_y) + \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \sin(\pi a k_y) \\ &\quad + i \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \cos(\pi a k_y) - i \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \sin(\pi a k_y).\end{aligned}\tag{A-23}$$

$$\begin{aligned}\exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_{B,3} - \mathbf{r}_A)] &= \exp\left(-\frac{i\pi a}{3}(-\sqrt{3}k_x - 3k_y)\right) \\ &= \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \cos(\pi a k_y) - \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \sin(\pi a k_y) \\ &\quad + i \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \cos(\pi a k_y) + i \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \sin(\pi a k_y).\end{aligned}\tag{A-24}$$

Por lo tanto, el valor de H'_{12} es,

$$\begin{aligned}H'_{12} &= -\gamma_0 \left[\cos\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}} a k_x\right) - i \sin\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}} a k_x\right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \cos(\pi a k_y) + 2i \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\pi a k_x\right) \cos(\pi a k_y) \right].\end{aligned}\tag{A-25}$$

Finalmente, se encuentra que

$$|H'_{12}|^2 = \gamma_0^2 \left(1 + 4 \cos^2(\pi k_y a) + 4 \cos(\pi k_y a) \cos(\sqrt{3}\pi k_x a) \right)\tag{A-26}$$

Juntando ambos resultados, se llega finalmente a la expresión para la energía en función del vector de onda \mathbf{k} [37],

$$E = E_0 - 2\gamma'_0 \left[\cos(2\pi a k_y) + 2 \cos(\sqrt{3}\pi a k_x) \cos(\pi a k_y) \right] \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos^2(\pi k_y a) + 4 \cos(\pi k_y a) \cos(\sqrt{3}\pi k_x a)}. \quad (\text{A-27})$$

Una vez encontrado este resultado, se calcula ahora la energía para algunos valores importantes del vector de onda dentro de la zona de Brillouin. En la figura **A-2** se muestra la estructura de la red recíproca del grafeno, cuyos vectores generadores son $\mathbf{b}_1 = \frac{2}{a\sqrt{3}}\hat{i}$ y $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{a\sqrt{3}}\hat{i} - \frac{1}{a}\hat{j}$, de modo que la red recíproca es un arreglo hexagonal y la (primera) zona de Brillouin es un hexágono. Según la figura **A-2**, es fácil ver que los puntos O, F, C y G de la primera zona de Brillouin corresponden a los siguientes vectores de onda,

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_O &= 0, \\ \mathbf{k}_F &= \frac{1}{a\sqrt{3}}\hat{i}, \\ \mathbf{k}_C &= \frac{1}{a\sqrt{3}}\hat{i} + \frac{1}{3a}\hat{j}, \\ \mathbf{k}_G &= \frac{2}{3a}\hat{j}. \end{aligned} \quad (\text{A-28})$$

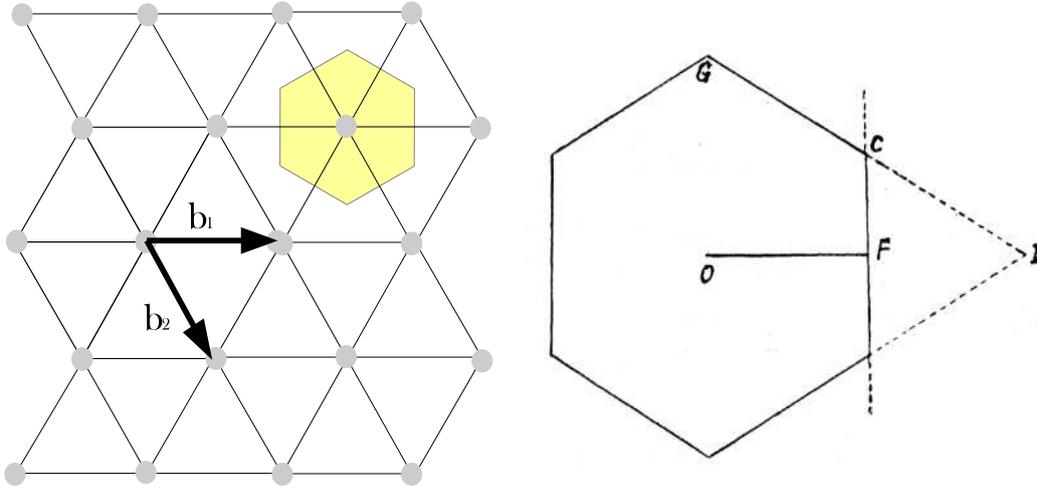


Figura **A-2**: A la izquierda, estructura de la red recíproca del grafeno, donde se han mostrado los vectores generadores de la red \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 ; el hexágono amarillo representa la primera zona de Brillouin de la red. A la derecha, se ha extendido la primera zona de Brillouin, definiendo algunos puntos importantes sobre ella. Imagen de la derecha tomada de [37].

Reemplazando los valores de los vectores de onda en la ecuación (A-27), se encuentra la energía correspondiente a cada punto de la zona de Brillouin. Por ejemplo, para \mathbf{k}_O la energía corresponde a

$$\begin{aligned}
E_O &= E_0 - 2\gamma'_0(\cos(0) + 2\cos(0)\cos(0)) \\
&\quad - \gamma_0 \sqrt{1 + 4\cos^2(0) + 4\cos(0)\cos(0)} \\
&= E_0 - 6\gamma'_0 - 3\gamma_0.
\end{aligned} \tag{A-29}$$

Al punto F de la zona de Brillouin le corresponde la siguiente energía,

$$\begin{aligned}
E_F &= E_0 - 2\gamma'_0(\cos(0) + 2\cos(\pi)\cos(0)) \\
&\quad \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4\cos^2(0) + 4\cos(0)\cos(\pi)} \\
&= E_0 + 2\gamma'_0 \pm \gamma_0
\end{aligned} \tag{A-30}$$

De modo que dentro de la zona de Brillouin $E_F = E_0 + 2\gamma'_0 - \gamma_0$ y fuera de ella $E_F = E_0 + 2\gamma'_0 + \gamma_0$. Esto quiere decir que para este vector de onda hay un gap de energía de valor $2\gamma_0$, y recordar que según se había mencionado en el capítulo 2, sección 2.4.2, el gap de energía tiene valor $2|H'_{12}|$ en la frontera de la zona de Brillouin [37].

Finalmente, para una de las esquinas de la zona de Brillouin el vector de onda es \mathbf{k}_C , y su energía se calcula como sigue,

$$\begin{aligned}
E_C &= E_0 - 2\gamma'_0 \left[\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) + 2\cos(\pi)\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) \right] \\
&\quad \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4\cos^2\left(\frac{\pi}{3}\right) + 4\cos\left(\frac{\pi}{3}\right)\cos(\pi)} \\
&= E_0 + 3\gamma'_0.
\end{aligned} \tag{A-31}$$

De modo que para este caso no hay gap de energía porque se cumple que $H'_{12} = 0$. Sobre esto, se menciona que “el hecho de no haya gap de energía en una de las esquinas es consecuencia de la simetría de la red, y es independiente de las aproximaciones consideradas” [37]. Este es uno de los hechos que hacen que el grafeno sea tan especial, pero no es el único de ellos.

A.1. Relación de dispersión en una vecindad de \mathbf{k}_C

Ahora, el objetivo es conocer como se comporta la energía en una vecindad de una de las esquinas de la zona de Brillouin. Para ello, se expande cierto vector de onda \mathbf{k} alrededor de \mathbf{k}_C . Se define el vector de onda:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_C + \delta\mathbf{k}, \tag{A-32}$$

con $\delta\mathbf{k} = \delta k_x \hat{i} + \delta k_y \hat{j} \ll \mathbf{k}_C$. La idea es conocer la energía asociada al vector de onda \mathbf{k} , usando la ecuación (A-27), y expandiendo hasta términos de segundo orden en $\delta\mathbf{k}$. Realizando el procedimiento recién mencionado, se obtiene lo siguiente,

$$\begin{aligned}
E(\mathbf{k}) &= E_0 - 2\gamma'_0 \left[\cos(2\pi a(k_y + \delta k_y)) + 2\cos(\sqrt{3}\pi a(k_x + \delta k_x))\cos(\pi a(k_y + \delta k_y)) \right] \\
&\quad \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4\cos^2(\pi a(k_y + \delta k_y)) + 4\cos(\pi a(k_y + \delta k_y))\cos(\sqrt{3}\pi a(k_x + \delta k_x))}.
\end{aligned} \tag{A-33}$$

Para evitar el abuso de subíndices, de ahora en adelante las cantidades k_x y k_y corresponderán a las componentes del vector de onda en una de las esquinas de la zona de Brillouin, \mathbf{k}_C , en las direcciones usuales. Por simplicidad y orden, se manipula cada término individualmente,

$$\begin{aligned}\cos(2\pi a(k_y + \delta k_y)) &= \cos(2\pi a k_y) \cos(2\pi a \delta k_y) - \sin(2\pi a k_y) \sin(2\pi a \delta k_y) \\ &\approx \cos(2\pi a k_y) (1 - 2\pi^2 a^2 \delta k_y^2) - \sin(2\pi a k_y) (2\pi a \delta k_y)\end{aligned}\quad (\text{A-34})$$

En todas las esquinas de la zona de Brillouin se debe obtener un comportamiento similar, por eso se elige el caso particular $\mathbf{k}_C = \frac{1}{a\sqrt{3}}\hat{i} + \frac{1}{3a}\hat{j}$, y de este modo la ecuación (A-34) cambia a,

$$\begin{aligned}\cos(2\pi a(k_y + \delta k_y)) &\approx \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) (1 - 2\pi^2 a^2 \delta k_y^2) - \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) (2\pi a \delta k_y) \\ &\approx -\frac{1}{2} - \sqrt{3} \pi a \delta k_y + \pi^2 a^2 \delta k_y^2.\end{aligned}\quad (\text{A-35})$$

Calculando los siguientes términos,

$$\begin{aligned}\cos(\sqrt{3} \pi a(k_x + \delta k_x)) &= \cos(\sqrt{3} \pi a k_x) \cos(\sqrt{3} \pi a \delta k_x) - \sin(\sqrt{3} \pi a k_x) \sin(\sqrt{3} \pi a \delta k_x) \\ &\approx \cos(\sqrt{3} \pi a k_x) \left(1 - \frac{3}{2} \pi^2 a^2 \delta k_x^2\right) - \sin(\sqrt{3} \pi a k_x) (\sqrt{3} \pi a \delta k_x) \\ &\approx \cos(\pi) \left(1 - \frac{3}{2} \pi^2 a^2 \delta k_x^2\right) - \sin(\pi) (\sqrt{3} \pi a \delta k_x) \\ &\approx -1 + \frac{3}{2} \pi^2 a^2 \delta k_x^2.\end{aligned}\quad (\text{A-36})$$

$$\begin{aligned}\cos(\pi a(k_y + \delta k_y)) &= \cos(\pi a k_y) \cos(\pi a \delta k_y) - \sin(\pi a k_y) \sin(\pi a \delta k_y) \\ &\approx \cos(\pi a k_y) \left(1 - \frac{1}{2} \pi^2 a^2 \delta k_y^2\right) - \sin(\pi a k_y) (\pi a \delta k_y) \\ &\approx \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) \left(1 - \frac{1}{2} \pi^2 a^2 \delta k_y^2\right) - \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) (\pi a \delta k_y) \\ &\approx \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \pi a \delta k_y - \frac{1}{4} \pi^2 a^2 \delta k_y^2.\end{aligned}\quad (\text{A-37})$$

Efectuando otros cálculos intermedios,

$$\begin{aligned}\cos(\sqrt{3} \pi a(k_x + \delta k_x)) \cos(\pi a(k_y + \delta k_y)) &\approx \left(-1 + \frac{3}{2} \pi^2 a^2 \delta k_x^2\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \pi a \delta k_y - \frac{1}{4} \pi^2 a^2 \delta k_y^2\right) \\ &\approx -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \pi a \delta k_y + \frac{1}{4} \pi^2 a^2 \delta k_y^2 + \frac{3}{4} \pi^2 a^2 \delta k_x^2.\end{aligned}\quad (\text{A-38})$$

Donde se han mantenido hasta términos de segundo orden en δk_x y δk_y . El último término necesario para calcular $E(\mathbf{k})$ es,

$$\begin{aligned}\cos^2(\pi a(k_y + \delta k_y)) &\approx \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \pi a \delta k_y - \frac{1}{4} \pi^2 a^2 \delta k_y^2 \right)^2 \\ &\approx \frac{1}{4} + \frac{3}{4} \pi^2 a^2 \delta k_y^2 - \frac{\sqrt{3}}{2} \pi a \delta k_y - \frac{1}{4} \pi^2 a^2 \delta k_y^2 \\ &\approx \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{2} \pi a \delta k_y + \frac{1}{2} \pi^2 a^2 \delta k_y^2.\end{aligned}\quad (\text{A-39})$$

Con estos resultados, es posible calcular fácilmente la energía $E(\mathbf{k})$, a partir de los siguientes procedimientos. Primero se calcula el coeficiente que acompaña a γ'_0 en la ecuación (A-33),

$$\begin{aligned}\cos(2\pi a(k_y + \delta k_y)) + 2 \cos(\sqrt{3}\pi a(k_x + \delta k_x)) \cos(\pi a(k_y + \delta k_y)) \\ = -\frac{1}{2} - \sqrt{3} \pi a \delta k_y + \pi^2 a^2 \delta k_y^2 - 1 + \sqrt{3} \pi a \delta k_y + \frac{1}{2} \pi^2 a^2 \delta k_y^2 + \frac{3}{2} \pi^2 a^2 \delta k_x^2 \\ = -\frac{3}{2} + \frac{3}{2} \pi^2 a^2 \delta k_y^2 + \frac{3}{2} \pi^2 a^2 \delta k_x^2.\end{aligned}\quad (\text{A-40})$$

En este punto es importante notar que $\delta k_x^2 + \delta k_y^2 = |\delta \mathbf{k}|^2$, y debido a la ecuación (A-32), se concluye que $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|^2 = \delta k_x^2 + \delta k_y^2$. Así, la ecuación (A-40) toma la forma final,

$$\begin{aligned}\cos(2\pi a(k_y + \delta k_y)) + 2 \cos(\sqrt{3}\pi a(k_x + \delta k_x)) \cos(\pi a(k_y + \delta k_y)) \\ = -\frac{3}{2} + \frac{3}{2} \pi^2 a^2 |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|^2.\end{aligned}\quad (\text{A-41})$$

Por otro lado, calculando el término dentro de la raíz de la ecuación (A-33),

$$\begin{aligned}1 + 4 \cos^2(\pi a(k_y + \delta k_y)) + 4 \cos(\pi a(k_y + \delta k_y)) \cos(\sqrt{3}\pi a(k_x + \delta k_x)) \\ = 1 + 1 - 2\sqrt{3} \pi a \delta k_y + 2\pi^2 a^2 \delta k_y^2 \\ - 2 + 2\sqrt{3} \pi a \delta k_y + \pi^2 a^2 \delta k_y^2 + 3\pi^2 a^2 \delta k_x^2 \\ = 3\pi^2 a^2 \delta k_y^2 + 3\pi^2 a^2 \delta k_x^2.\end{aligned}\quad (\text{A-42})$$

Por lo tanto, se demuestra que

$$\begin{aligned}1 + 4 \cos^2(\pi a(k_y + \delta k_y)) + 4 \cos(\pi a(k_y + \delta k_y)) \cos(\sqrt{3}\pi a(k_x + \delta k_x)) \\ = 1 + 1 - 2\sqrt{3} \pi a \delta k_y + 2\pi^2 a^2 \delta k_y^2 \\ - 2 + 2\sqrt{3} \pi a \delta k_y + \pi^2 a^2 \delta k_y^2 + 3\pi^2 a^2 \delta k_x^2 \\ = 3\pi^2 a^2 |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|^2.\end{aligned}\quad (\text{A-43})$$

Reemplazando las ecuaciones (A-41) y (A-43) en la ecuación (A-33), se obtiene la relación de dispersión para una vecindad de las esquinas de la zona de Brillouin [37],

$$E = E_0 + 3\gamma'_0 - 3\gamma'_0 \pi^2 a^2 |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|^2 \pm \sqrt{3} \gamma_0 \pi a |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|. \quad (\text{A-44})$$

Identificando el término $E_0 + 3\gamma'_0$ como la energía en la esquina de la zona de Brillouin (ver la ecuación (A-31)), se obtiene finalmente,

$$E - E_C = -3\gamma'_0\pi^2 a^2 |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|^2 \pm \sqrt{3}\gamma_0\pi a |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|. \quad (\text{A-45})$$

A.2. Relación de dispersión en el grafeno monocapa en una vecindad de \mathbf{k}_C

La ecuación (A-45) por si sola representa la relación de dispersión cerca de las esquinas de la primera zona de Brillouin, sin embargo, se puede seguir manipulando para llegar al resultado deseado. Los valores de los parámetros γ'_0 y γ_0 son aproximadamente 0.1 eV y 2.5 eV, respectivamente [47], por lo tanto, despreciando el efecto de γ'_0 en la relación de dispersión, la ecuación (A-45) se simplifica de la siguiente manera [37],

$$E - E_C = \pm\sqrt{3}\gamma_0\pi a |\mathbf{k} - \mathbf{k}_C|. \quad (\text{A-46})$$

Esta es precisamente la relación de dispersión lineal para el grafeno monocapa cerca de las esquinas de la zona de Brillouin, que permite posteriormente inferir que los portadores de carga cerca de estos puntos se describen a partir de una ecuación de Dirac para fermiones no masivos.

Apéndice B

Cálculo de los coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso

En el presente apéndice se encontrarán los coeficientes de transmisión y reflexión para el problema de la dispersión de fermiones en un potencial paso. Para ello, la relación entre dichos coeficientes y las amplitudes de probabilidad será obtenida a partir de las densidades de corriente de probabilidad. Al obtener los resultados de R y T , se tendrá la precaución de estudiar su comportamiento en función del potencial, específicamente, de la región de energías a la cual pertenece el potencial en relación con la energía de incidencia y la masa de las partículas.

B.1. Definición de los coeficientes de reflexión y transmisión a partir de la densidad de corriente de probabilidad

En el presente apéndice se calcularán los mencionados coeficientes a partir de la densidad de corriente de probabilidad de la ecuación de Dirac. Retomando la ecuación (2-19), donde se definen los coeficientes de reflexión y transmisión

$$R = \left| \frac{\mathbf{j}_r \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\mathbf{j}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}} \right|, \quad T = \left| \frac{\mathbf{j}_t \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\mathbf{j}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}} \right|. \quad (\text{B-1})$$

Donde $\hat{\mathbf{n}}$ corresponde al vector unitario normal a la superficie donde se dispersan los fermiones, que en nuestro caso particular corresponde a \hat{z} . Las densidades de corriente de probabilidad incidente, reflejada y transmitida corresponden a

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_i(x, y, t) &= \Psi_i^\dagger(x, y, t) \boldsymbol{\alpha} \Psi_i(x, y, t) \\ \mathbf{j}_r(x, y, t) &= \Psi_r^\dagger(x, y, t) \boldsymbol{\alpha} \Psi_r(x, y, t) \\ \mathbf{j}_t(x, y, t) &= \Psi_t^\dagger(x, y, t) \boldsymbol{\alpha} \Psi_t(x, y, t). \end{aligned} \quad (\text{B-2})$$

Con Ψ_i , Ψ_r y Ψ_t las funciones de onda incidente, reflejada y transmitida, respectivamente.

Es necesario entonces calcular las densidades de corriente de probabilidad asociada a cada una de las ondas recién mencionadas. Para la primera de ellas se procede como sigue,

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_i(x, y, t) &= \Psi_i^\dagger(x, y, t)\boldsymbol{\alpha}\Psi_i(x, y, t) \\ &= \Psi_i^\dagger\alpha_1\Psi_i\hat{i} + \Psi_i^\dagger\alpha_2\Psi_i\hat{j}.\end{aligned}\quad (\text{B-3})$$

Con \hat{i} y \hat{j} los vectores unitarios en las direcciones del eje x y y respectivamente. Recordando que la función de onda incidente en el problema del potencial paso es

$$\Psi_i(x, y, t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} e^{i(xp_1 + yp_2 - Et)}, \quad (\text{B-4})$$

y con ella se calcula directamente la densidad de corriente de probabilidad asociada a la onda incidente,

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_i(x, y, t) &= \left[\begin{pmatrix} 1, 0, 0, \frac{p_1 - ip_2}{E + m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} \hat{i} \right. \\ &\quad \left. + \begin{pmatrix} 1, 0, 0, \frac{p_1 - ip_2}{E + m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} \hat{j} \right] \\ &\quad \times e^{-i(xp_1 + yp_2 - Et)} e^{i(xp_1 + yp_2 - Et)}. \\ &= \frac{2p_1}{E + m}\hat{i} + \frac{2p_2}{E + m}\hat{j}.\end{aligned}\quad (\text{B-5})$$

Por lo tanto, la componente de la densidad de corriente que es normal a la interfase dispersora es

$$|\mathbf{j}_i \cdot \hat{i}| = \left| \frac{2p_1}{E + m} \right|. \quad (\text{B-6})$$

Para la densidad de corriente de probabilidad de reflexión se realiza un cálculo similar. La función de onda asociada a las partículas reflejadas corresponde a

$$\Psi_r(x, y, t) = r \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{-p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} e^{i(-xp_1 + yp_2 - Et)}. \quad (\text{B-7})$$

Con ella se calcula la densidad de corriente de probabilidad reflejada como sigue,

$$\mathbf{j}_r(x, y, t) = \Psi_r^\dagger\alpha_1\Psi_r\hat{i} + \Psi_r^\dagger\alpha_2\Psi_r\hat{j}. \quad (\text{B-8})$$

Explícitamente,

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}_r(x, y, t) &= \left[rr^* \left(1, 0, 0, \frac{-p_1 - ip_2}{E + m} \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{-p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} \hat{i} \right. \\
&\quad \left. + rr^* \left(1, 0, 0, \frac{-p_1 - ip_2}{E + m} \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{-p_1 + ip_2}{E + m} \end{pmatrix} \hat{j} \right] \\
&\quad \times e^{-i(-xp_1 + yp_2 - Et)} e^{i(-xp_1 + yp_2 - Et)} \\
&= \frac{2p_1}{E + m} |r|^2 \hat{i} + \frac{2p_2}{E + m} |r|^2 \hat{j}.
\end{aligned} \tag{B-9}$$

Donde r^* es el complejo conjugado de la amplitud de probabilidad r . Así, la componente normal de la densidad de corriente de probabilidad es

$$|\mathbf{j}_r(x, y, t) \cdot \hat{i}| = \left| \frac{2p_1}{E + m} \right| |r|^2. \tag{B-10}$$

Por último, para la densidad de corriente de probabilidad de transmisión es necesario retomar la función de onda asociada a las partículas transmitidas,

$$\Psi_t(x, y, t) = \tilde{t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \end{pmatrix} e^{i(xq_1 + yp_2 - Et)}. \tag{B-11}$$

La densidad de corriente de probabilidad corresponde entonces a,

$$\mathbf{j}_t(x, y, t) = \Psi_t^\dagger \alpha_1 \Psi_t \hat{i} + \Psi_t^\dagger \alpha_2 \Psi_t \hat{j}. \tag{B-12}$$

Esto es,

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}_t(x, y, t) &= \left[\tilde{t}\tilde{t}^* \left(1, 0, 0, \frac{q_1 - ip_2}{E - V_0 + m} \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \end{pmatrix} \hat{i} \right. \\
&\quad \left. + \tilde{t}\tilde{t}^* \left(1, 0, 0, \frac{q_1 - ip_2}{E - V_0 + m} \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \end{pmatrix} \hat{j} \right] \\
&\quad \times e^{-i(xq_1 + yp_2 - Et)} e^{i(xq_1 + yp_2 - Et)} \\
&= \frac{2q_1}{E - V_0 + m} |\tilde{t}|^2 \hat{i} + \frac{2p_2}{E - V_0 + m} |\tilde{t}|^2 \hat{j}.
\end{aligned} \tag{B-13}$$

Finalmente, componente normal de la densidad de corriente de probabilidad es

$$|\mathbf{j}_t(x, y, t) \cdot \hat{i}| = \left| \frac{2q_1}{E - V_0 + m} \right| |\tilde{t}|^2. \quad (\text{B-14})$$

En conclusión, usando las definiciones mencionadas en la ecuación (B-1), la relación entre los coeficientes de reflexión y transmisión y las amplitudes de probabilidad es,

$$R = |r|^2, \quad (\text{B-15})$$

$$T = \left| \frac{q_1}{p_1} \right| \frac{E + m}{|E - V_0 + m|} |\tilde{t}|^2. \quad (\text{B-16})$$

B.2. Obtención de los coeficientes de transmisión y reflexión a partir de las amplitudes de probabilidad

Una vez obtenidas las ecuaciones (B-15) y (B-16) se procede a calcular de manera directa los coeficientes de reflexión y transmisión a partir de las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} . Las amplitudes de probabilidad se encuentran imponiendo condiciones de continuidad sobre las funciones de onda, definidas para cada región espacial determinada por el potencial. Según el formalismo presentado en el capítulo 3, sección 3.1, se encuentra que,

$$r = \begin{cases} \frac{p_1(E - V_0 + m) - q_1(E + m) - ip_2V_0}{p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m) + ip_2V_0}, & \text{si } q_1 \text{ es real,} \\ \frac{p_1(E - V_0 + m) - i[\bar{q}_1(E + m) + p_2V_0]}{p_1(E - V_0 + m) + i[\bar{q}_1(E + m) + p_2V_0]}, & \text{si } q_1 \text{ es imaginario.} \end{cases} \quad (\text{B-17})$$

$$\tilde{t} = \begin{cases} \frac{2p_1(E - V_0 + m)}{p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m) + ip_2V_0}, & \text{si } q_1 \text{ es real,} \\ \frac{2p_1(E - V_0 + m)}{p_1(E - V_0 + m) + i[\bar{q}_1(E + m) + p_2V_0]}, & \text{si } q_1 \text{ es imaginario.} \end{cases} \quad (\text{B-18})$$

Recordando que q_1 es imaginario si $E - \sqrt{m^2 + p_2^2} < V_0 < E + \sqrt{m^2 + p_2^2}$, y es real de otro modo. Además, se ha definido que $|q_1| = \bar{q}_1$ en el caso que q_1 sea imaginario.

Calculemos el coeficiente de reflexión en el caso en que q_1 es real,

$$R_{(q_1 \text{ real})} = |r|^2 = \frac{[p_1(E - V_0 + m) - q_1(E + m)]^2 + p_2^2V_0^2}{[p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m)]^2 + p_2^2V_0^2}. \quad (\text{B-19})$$

Aunque esta expresión para el coeficiente de reflexión es aceptable, es posible llegar a una más simplificada. Manipulando el denominador de la ecuación (B-19),

$$\begin{aligned}
& [p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m)]^2 + p_2^2 V_0^2 \\
&= p_1^2(E - V_0 + m)^2 + q_1^2(E + m)^2 + 2p_1 q_1(E - V_0 + m)(E + m) + p_2^2 V_0^2 \\
&= p_1^2(E + m)^2 + p_1^2 V_0^2 - 2p_1^2 V_0(E + m) + q_1^2(E + m)^2 \\
&+ 2p_1 q_1(E + m)^2 - 2p_1 q_1 V_0(E + m) + p_2^2 V_0^2 \\
&= (E + m)^2(p_1^2 + q_1^2 + 2p_1 q_1) + V_0 [p_1^2 V_0 + p_2^2 V_0 - 2p_1^2(E + m) - 2p_1 q_1(E + m)].
\end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que $p_1^2 + p_2^2 = E^2 - m^2 = (E + m)(E - m)$, entonces la anterior expresión cambia a,

$$\begin{aligned}
& [p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m)]^2 + p_2^2 V_0^2 \\
&= (E + m)^2(p_1^2 + p_2^2 + 2p_1 q_1) + V_0(E + m) [V_0(E - m) - 2p_1^2 - 2p_1 q_1] \\
&= (E + m) [p_1^2(E + m) + q_1^2(E + m) + 2p_1 q_1(E + m) \\
&+ V_0^2 E - V_0^2 m - 2p_1^2 V_0 - 2p_1 q_1 V_0].
\end{aligned}$$

Como la energía en cada región del espacio es

$$\begin{aligned}
E^2 &= p_1^2 + p_2^2 + m^2 \quad (\text{si } x < 0) \\
(E - V_0)^2 &= q_1^2 + p_2^2 + m^2 \quad (\text{si } x \geq 0),
\end{aligned} \tag{B-20}$$

es sencillo demostrar que,

$$q_1^2 = p_1^2 + V_0^2 - 2EV_0. \tag{B-21}$$

Usando esta relación y continuando con los cálculos,

$$\begin{aligned}
& [p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m)]^2 + p_2^2 V_0^2 \\
&= (E + m) [2p_1^2(E + m) - 2EV_0(E + m) + 2V_0^2 E \\
&+ 2p_1 q_1(E + m) - 2p_1^2 V_0 - 2p_1 q_1 V_0].
\end{aligned}$$

De modo que se llega al siguiente resultado para el denominador de la ecuación (B-19),

$$\begin{aligned}
& [p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m)]^2 + p_2^2 V_0^2 \\
&= 2(E + m)(E - V_0 + m)(p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0).
\end{aligned} \tag{B-22}$$

Manipulemos ahora el numerador de la ecuación (B-19),

$$\begin{aligned}
& [p_1(E - V_0 + m) - q_1(E + m)]^2 + p_2^2 V_0^2 \\
&= p_1^2(E + m)^2 + p_1^2 V_0^2 - 2p_1^2 V_0(E + m) + q_1^2(E + m)^2 \\
&+ 2p_1 q_1 V_0(E + m) - 2p_1 q_1(E + m)^2 + p_2^2 V_0^2 \\
&= (E + m)^2(p_1^2 + q_1^2 - 2p_1 q_1) + V_0^2(E + m)(E - m) + V_0(E + m)(2p_1 q_1 - 2p_1^2).
\end{aligned}$$

Factorizando $E + m$ de la última igualdad,

$$\begin{aligned} & [p_1(E - V_0 + m) - q_1(E + m)]^2 + p_2^2 V_0^2 \\ & = (E + m) [(E + m)(p_1^2 + q_1^2 - 2p_1 q_1) + V_0^2(E - m) + V_0(2p_1 q_1 - 2p_1^2)] \end{aligned}$$

Expresando q_1^2 según la igualdad (B-21), la anterior ecuación cambia a,

$$\begin{aligned} & [p_1(E - V_0 + m) - q_1(E + m)]^2 + p_2^2 V_0^2 \\ & = (E + m) [(E + m)(2p_1^2 + V_0^2 - 2EV_0 - 2p_1 q_1) \\ & \quad + V_0^2(E - m) + 2V_0(p_1 q_1 - p_1^2)] \\ & = (E + m) [2(E + m)(p_1^2 - p_1 q_1 - EV_0) + V_0^2(E + m) \\ & \quad + V_0^2(E - m) + 2V_0(p_1 q_1 - p_1^2)] \\ & = (E + m) [2(E + m)(p_1^2 - p_1 q_1 - EV_0) \\ & \quad + 2V_0^2 E + 2V_0(p_1 q_1 - p_1^2)]. \end{aligned}$$

Y luego de algo de álgebra, se llega finalmente al siguiente resultado,

$$\begin{aligned} & [p_1(E - V_0 + m) - q_1(E + m)]^2 + p_2^2 V_0^2 \\ & = 2(E + m)(E - V_0 + m)(p_1^2 - p_1 q_1 - EV_0). \end{aligned} \quad (\text{B-23})$$

En conclusión, el coeficiente de reflexión se simplifica del siguiente modo,

$$\begin{aligned} R_{(q_1 \text{ real})} & = \frac{2(E + m)(E - V_0 + m)(p_1^2 - p_1 q_1 - EV_0)}{2(E + m)(E - V_0 + m)(p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0)} \\ & = \frac{p_1^2 - p_1 q_1 - EV_0}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0}. \end{aligned} \quad (\text{B-24})$$

Con las anteriores consideraciones también es posible simplificar el coeficiente de transmisión, en el caso en que q_1 es real. T toma la forma

$$T_{(q_1 \text{ real})} = \left| \frac{q_1}{p_1} \right| \frac{4p_1^2(E + m)|E - V_0 + m|}{[p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m)]^2 + p_2^2 V_0^2}. \quad (\text{B-25})$$

Usando la expresión que ya se había calculado para el denominador de R , se llega a

$$T_{(q_1 \text{ real})} = |q_1| \frac{2p_1|E - V_0 + m|}{(E - V_0 + m)(p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0)}. \quad (\text{B-26})$$

Para simplificar aún más el anterior resultado, se considera lo siguiente: como la cantidad $|E - V_0 + m|/(E - V_0 + m)$ solo puede tomar los valores 1 o -1 , se define

$$s = \text{sign}(E - V_0 + m) = \frac{|E - V_0 + m|}{E - V_0 + m}, \quad (\text{B-27})$$

que corresponde a la función signo de $E - V_0 + m$. Con esto en cuenta, se obtiene el siguiente coeficiente de transmisión para el potencial paso,

$$T_{(q_1 \text{ real})} = \frac{2s p_1 |q_1|}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0}. \quad (\text{B-28})$$

El momento q_1 es real si $V_0 \leq E - \sqrt{m^2 + p_2^2}$ o si $V_0 \geq E + \sqrt{m^2 + p_2^2}$. Para la primera de las opciones, V_0 es siempre menor que $E + m$ y por lo tanto $s = 1$. Por otro lado, en la segunda opción V_0 es mayor que $E + m$ y por ende $s = -1$. Además, es necesario recordar que q_1 es positivo si $V_0 \leq E - \sqrt{m^2 + p_2^2}$, o negativo si $V_0 \geq E + \sqrt{m^2 + p_2^2}$ *. Así, finalmente se obtienen los siguientes resultados para el coeficiente de transmisión

$$T_{(V_0 \leq E - \sqrt{m^2 + p_2^2})} = \frac{2p_1 q_1}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0}. \quad (\text{B-29})$$

$$T_{(V_0 \geq E + \sqrt{m^2 + p_2^2})} = -\frac{2p_1 |q_1|}{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0}. \quad (\text{B-30})$$

Donde en la última expresión se ha tenido en cuenta que $q_1 = -|q_1|$, dado que es negativo.

Ahora se obtendrán los coeficientes R y T en el caso que q_1 es imaginario. Observando la ecuación (B-17), el coeficiente de reflexión corresponde a

$$R_{(q_1 \text{ imaginario})} = \frac{p_1^2(E - V_0 + m)^2 + [\bar{q}_1(E + m) + p_2 V_0]^2}{p_1^2(E - V_0 + m)^2 + [\bar{q}_1(E + m) + p_2 V_0]^2} \quad (\text{B-31})$$

$$= 1.$$

Es decir, independientemente del valor de potencial y de la energía de incidencia de las partículas, el coeficiente de reflexión es siempre igual a 1. Realizando el cálculo para el coeficiente de transmisión, se comprueba que,

$$T = \frac{|q_1|}{|p_1|} \frac{4p_1^2(E + m)|E - V_0 + m|}{p_1^2(E - V_0 + m)^2 + [\bar{q}_1(E + m) + p_2 V_0]^2}. \quad (\text{B-32})$$

En conclusión, se llega a los siguientes resultados para los coeficientes de transmisión y reflexión, dependiendo del valor del potencial,

$$R = \begin{cases} \frac{p_1^2 - p_1 q_1 - EV_0}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0}, & \text{si } V_0 \leq E - \sqrt{m^2 + p_2^2}, (q_1 \text{ es real}), \\ 1, & \text{si } E - \sqrt{m^2 + p_2^2} < V_0 < E + \sqrt{m^2 + p_2^2}, (q_1 \text{ es imaginario}). \\ \frac{p_1^2 + p_1 |q_1| - EV_0}{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0}, & \text{si } E + \sqrt{m^2 + p_2^2} \leq V_0, (q_1 \text{ es real}) \end{cases} \quad (\text{B-33})$$

$$T = \begin{cases} \frac{2p_1 q_1}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0}, & \text{si } V_0 \leq E - \sqrt{m^2 + p_2^2}, \\ |q_1| \frac{4p_1(E + m)|E - V_0 + m|}{p_1^2(E - V_0 + m)^2 + [\bar{q}_1(E + m) + p_2 V_0]^2}, & \text{si } E - \sqrt{m^2 + p_2^2} < V_0 < E + \sqrt{m^2 + p_2^2}, \\ -\frac{2p_1 |q_1|}{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0}, & \text{si } E + \sqrt{m^2 + p_2^2} \leq V_0. \end{cases} \quad (\text{B-34})$$

*Ver argumento de la dirección de la velocidad de grupo en la página 38.

En la región de potencial $E + \sqrt{m^2 + p_2^2} \leq V_0$ se ha tenido en cuenta que allí q_1 es negativo, y por lo tanto se ha escrito $q_1 = -|q_1|$.

Apéndice C

Demostración de la no conservación de la probabilidad en el potencial paso

Con la obtención de los coeficientes de reflexión y transmisión en el potencial paso, se estudia si su suma es igual a 1, es decir, si hay conservación de la probabilidad en el proceso de dispersión. En el presente apéndice se realizarán los cálculos necesarios para demostrar que la probabilidad no se conserva para todos los casos de ángulo de incidencia y de potencial, más específicamente, no se conserva en el caso que q_1 es imaginario.

Se parte desde las expresiones para los coeficientes de reflexión y transmisión hallados en las ecuaciones (3-27) y (3-28),

$$R = \begin{cases} \frac{p_1^2 - p_1 q_1 - EV_0}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \text{ (} q_1 \text{ es real),} \\ 1, & \text{si } E - m' < V_0 < E + m', \text{ (} q_1 \text{ es imaginario),} \\ \frac{p_1^2 + p_1 |q_1| - EV_0}{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0}, & \text{si } E + m' \leq V_0, \text{ (} q_1 \text{ es real).} \end{cases} \quad (\text{C-1})$$

$$T = \begin{cases} \frac{2p_1 q_1}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ |q_1| \frac{4p_1(E + m)|E - V_0 + m|}{p_1^2(E - V_0 + m)^2 + [\bar{q}_1(E + m) + p_2 V_0]^2}, & \text{si } E - m' < V_0 < E + m', \\ -\frac{2p_1 |q_1|}{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0}, & \text{si } E + m' \leq V_0. \end{cases} \quad (\text{C-2})$$

Siendo $m' = \sqrt{m^2 + p_2^2}$ y $\bar{q}_1 = |\sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 - p_2^2}|$.

Como el comportamiento de R y T depende del valor del potencial con respecto a la energía de incidencia y la masa del fermión, es necesario hacer el análisis separadamente

para cada una de las regiones energéticas a las que pertenece V_0 . Se inicia primero considerando los casos en los cuales q_1 es real, así cuando $V_0 \leq E - m'$ q_1 es positivo y entonces la suma de los coeficientes de reflexión y transmisión es

$$\begin{aligned} (R + T)_{V_0 \leq E - m'} &= \frac{p_1^2 - p_1 q_1 - EV_0}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0} + \frac{2p_1 q_1}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0} \\ &= \frac{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0}{p_1^2 + p_1 q_1 - EV_0} \\ &= 1. \end{aligned} \tag{C-3}$$

De tal modo que en este caso se conserva la probabilidad. Ahora observemos el caso cuando $V_0 \geq E + m'$, ahora q_1 es real pero negativo, según lo discutido en el capítulo 3, y se llega a que la suma de los coeficientes de reflexión y transmisión es

$$\begin{aligned} (R + T)_{V_0 \geq E + m'} &= \frac{p_1^2 + p_1 |q_1| - EV_0}{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0} - \frac{2p_1 |q_1|}{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0} \\ &= \frac{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0}{p_1^2 - p_1 |q_1| - EV_0} \\ &= 1. \end{aligned} \tag{C-4}$$

De modo que en este caso de potencial también se conserva la probabilidad.

Finalmente, consideremos el caso cuando q_1 es imaginario, es decir, cuando el potencial se encuentra en las regiones $E - m' < V_0 < E + m'$. Aquí el coeficiente de reflexión es siempre 1, sin embargo el coeficiente de transmisión es distinto de cero en todos los casos, así que se obtiene

$$(R + T)_{E - m' < V_0 < E + m'} = 1 + |q_1| \frac{4p_1(E + m)|E - V_0 + m|}{p_1^2(E - V_0 + m)^2 + [\bar{q}_1(E + m) + p_2 V_0]^2} \tag{C-5}$$

Lo cual es siempre una cantidad mayor que 1. Esto quiere decir que la probabilidad no se conserva en todos los casos posibles, hecho que incluso se hace presente en la paradoja de Klein en una dimensión para el potencial paso.

Apéndice D

Cálculo de las amplitudes de probabilidad de reflexión y transmisión en el potencial barrera

En el problema del potencial barrera se observó que para obtener las amplitudes de probabilidad r y \tilde{t} era necesario resolver el sistema de cuatro ecuaciones que resultaba de imponer las condiciones de continuidad para las funciones de onda en $x = 0$ y $x = L$, que eran las posiciones espaciales en las cuales se definen los límites del potencial barrera. En este apéndice se mostrará el proceso matemático necesario para obtener dichas amplitudes de probabilidad, y se encontrará además las amplitudes de probabilidad a y b asociadas a las funciones de onda en la región espacial $0 \leq x \leq L$, que se muestran en la ecuación 4-9.

El sistema de ecuaciones que se quiere resolver es el siguiente,

$$\begin{aligned}
 r - a - b &= -1 \\
 \left(\frac{-p_1 + ip_2}{E + m} \right) r - \left(\frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \right) a - \left(\frac{-q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \right) b &= - \left(\frac{p_1 + ip_2}{E + m} \right) \\
 (e^{iLq_1}) a + (e^{-iLq_1}) b - (e^{iLp_1}) \tilde{t} &= 0 \\
 \left(\frac{q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \right) e^{iLq_1} a + \left(\frac{-q_1 + ip_2}{E - V_0 + m} \right) e^{-iLq_1} b - \left(\frac{p_1 + ip_2}{E + m} \right) e^{iLp_1} \tilde{t} &= 0.
 \end{aligned} \tag{D-1}$$

donde las cantidades r y \tilde{t} son las amplitudes de probabilidad que se quieren encontrar, y a y b son amplitudes de probabilidad asociadas a las partículas que se transmiten y se reflejan dentro de la barrera de potencial. Haciendo las siguientes definiciones,

$$\begin{aligned}
 P_1 &= \frac{p_1}{E + m}, & P_2 &= \frac{p_2}{E + m}, \\
 Q_1 &= \frac{q_1}{E - V_0 + m}, & Q_2 &= \frac{p_2}{E - V_0 + m}, \\
 \alpha &= Lp_1, & \beta &= Lq_1.
 \end{aligned} \tag{D-2}$$

Se puede escribir el sistema de ecuaciones de una manera más compacta,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & -1 \\ -P_1 + iP_2 & 0 & -Q_1 - iQ_2 & Q_1 - iQ_2 \\ 0 & -e^{i\alpha} & e^{i\beta} & e^{-i\beta} \\ 0 & -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ \tilde{t} \\ a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -P_1 - iP_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{D-3})$$

siendo M la matriz,

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & -1 \\ -P_1 + iP_2 & 0 & -Q_1 - iQ_2 & Q_1 - iQ_2 \\ 0 & -e^{i\alpha} & e^{i\beta} & e^{-i\beta} \\ 0 & -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{pmatrix}. \quad (\text{D-4})$$

De este modo, se observa que si se invierte la matriz M automáticamente se obtienen las amplitudes de probabilidad deseadas. Definiendo las componentes de M^{-1} de la siguiente manera,

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} & n_{13} & n_{14} \\ n_{21} & n_{22} & n_{23} & n_{24} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} & n_{34} \\ n_{41} & n_{42} & n_{43} & n_{44} \end{pmatrix}, \quad (\text{D-5})$$

se obtienen las siguientes relaciones para las amplitudes de probabilidad,

$$\begin{pmatrix} r \\ \tilde{t} \\ a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} & n_{13} & n_{14} \\ n_{21} & n_{22} & n_{23} & n_{24} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} & n_{34} \\ n_{41} & n_{42} & n_{43} & n_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ -P_1 - iP_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D-6})$$

De esta forma, las amplitudes de probabilidad que se pretenden encontrar están dadas por

$$\begin{aligned} r &= -n_{11} - (P_1 + iP_2)n_{12}, \\ \tilde{t} &= -n_{21} - (P_1 + iP_2)n_{22}, \\ a &= -n_{31} - (P_1 + iP_2)n_{32}, \\ b &= -n_{41} - (P_1 + iP_2)n_{42}. \end{aligned} \quad (\text{D-7})$$

Entonces no es necesario encontrar todas las componentes de la matriz inversa M^{-1} para obtener las amplitudes de probabilidad.

Se procederá ahora a calcular cada componente a partir del método de la matriz de cofactores,

$$n_{ij} = \frac{(-1)^{i+j}c_{ji}}{\det M}, \quad (\text{D-8})$$

con c_{ji} el determinante de la matriz que se obtiene al omitir la fila j -ésima y la columna i -ésima de la matriz M . Primero se calculará el determinante de M y se procede de la forma estándar,

$$\det M = \begin{vmatrix} 0 & -Q_1 - iQ_2 & Q_1 - Q_2 \\ -e^{i\alpha} & e^{i\beta} & e^{-i\beta} \\ -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{vmatrix} - (-P_1 + iP_2) \begin{vmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -e^{i\alpha} & e^{i\beta} & e^{-i\beta} \\ -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{vmatrix}. \quad (\text{D-9})$$

llegando al siguiente resultado,

$$\begin{aligned} \det M &= [4P_1Q_1 \cos \beta + 2i(-P_1^2 - P_2^2 - Q_1^2 - Q_2^2 + 2P_2Q_2) \sin \beta] e^{i\alpha}, \\ &= \frac{1}{(E+m)(E-V_0+m)} [4p_1q_1 \cos \beta + 4i(V_0E - p_1^2) \sin \beta] e^{iLp_1}. \end{aligned} \quad (\text{D-10})$$

Calculamos ahora los primeros elementos de la matriz de cofactores necesarios para obtener la amplitud de probabilidad r ,

$$\begin{aligned} c_{11} &= \begin{vmatrix} -Q_1 - iQ_2 & Q_1 - iQ_2 & e^{-i\beta} \\ -e^{i\alpha} & e^{i\beta} & \\ -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{vmatrix}, \\ &= [2Q_1(P_1 + iP_2) \cos \beta - 2i(Q_1^2 + Q_2^2 - P_2Q_2 + iP_1Q_2) \sin \beta] e^{i\alpha} \end{aligned} \quad (\text{D-11})$$

$$\begin{aligned} c_{21} &= \begin{vmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -e^{i\alpha} & e^{i\beta} & e^{-i\beta} \\ -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{vmatrix}, \\ &= [2Q_1 \cos \beta - 2i(P_1 + iP_2 - iQ_2) \sin \beta] e^{i\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{D-12})$$

Así, usando las ecuaciones D-7 y D-8, la amplitud de probabilidad r es,

$$\begin{aligned} r &= \frac{-c_{11} + (P_1 + iP_2)c_{21}}{\det M} \\ &= \frac{2i(Q_1^2 + Q_2^2 - P_1^2 + P_2^2 - 2P_2Q_2 + 2iP_1Q_2 - 2iP_1P_2) \sin \beta e^{i\alpha}}{[4P_1Q_1 \cos \beta + 2i(-P_1^2 - P_2^2 - Q_1^2 - Q_2^2 + 2P_2Q_2) \sin \beta] e^{i\alpha}}. \end{aligned} \quad (\text{D-13})$$

Lo que finalmente arroja como resultado,

$$r = \frac{-V_0 \sin(q_1L) [p_1p_2 + i(Em + m^2 + p_2^2)]}{(E+m) \{ p_1q_1 \cos(q_1L) + (EV_0 - p_1^2) i \sin(q_1L) \}}. \quad (\text{D-14})$$

Siendo válido solo en el caso en que q_1 es real. Para extender r en caso que q_1 es imaginario, se tendrá en cuenta que $q_1 = i\bar{q}_1$, con q_1 real, y que $\cos(i\theta) = \cosh(\theta)$, $\sin(i\theta) = i \sinh(\theta)$; con lo cual se obtiene

$$r(q_1 \text{ imaginario}) = \frac{V_0 \sinh(\bar{q}_1L) (Em + m^2 + p_2^2 - ip_1p_2)}{(E+m) \{ ip_1\bar{q}_1 \cosh(\bar{q}_1L) - (EV_0 - p_1^2) \sinh(\bar{q}_1L) \}}. \quad (\text{D-15})$$

Se procede similarmente para obtener la amplitud de probabilidad \tilde{t} , calculando primero los elementos correspondientes de la matriz de cofactores,

$$c_{12} = \begin{vmatrix} -P_1 + iP_2 & -Q_1 - iQ_2 & Q_1 - iQ_2 \\ 0 & e^{i\beta} & e^{-i\beta} \\ 0 & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{vmatrix}, \quad (D-16)$$

$$= 2Q_1(P_1 - iP_2).$$

$$c_{22} = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 0 & e^{i\beta} & e^{-i\beta} \\ 0 & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{vmatrix}, \quad (D-17)$$

$$= -2Q_1.$$

De tal modo que la amplitud de probabilidad de transmisión es ,

$$\tilde{t} = \frac{c_{12} - (P_1 + iP_2)c_{22}}{\det M} \quad (D-18)$$

$$= \frac{2Q_1(P_1 - iP_2) + 2Q_1(P_1 + iP_2)}{[4P_1Q_1 \cos \beta + 2i(-P_1^2 - P_2^2 - Q_1^2 - Q_2^2 + 2P_2Q_2) \sin \beta] e^{i\alpha}},$$

y reemplazado los valores de P_1 , P_2 , Q_1 y Q_2 según las definiciones mostradas en la ecuación D-2, se llega al resultado final,

$$\tilde{t} = \frac{q_1 p_1 e^{-ip_1 L}}{p_1 q_1 \cos(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2) i \sin(q_1 L)}. \quad (D-19)$$

Este resultado es válido solamente cuando q_1 es real. Teniendo en cuenta las mismas consideraciones hechas al calcular r cuando q_1 es imaginario, se obtiene la siguiente amplitud de probabilidad, válida para el caso en que q_1 es imaginario,

$$\tilde{t} = \frac{i\bar{q}_1 p_1 e^{-ip_1 L}}{ip_1 \bar{q}_1 \cosh(\bar{q}_1 L) - (EV_0 - p_1^2) \sinh(\bar{q}_1 L)}. \quad (D-20)$$

Aunque no es necesario para los propósitos del presente documento, por completez se mostrarán las amplitudes de probabilidad a y b , relacionadas con las funciones de onda en la región espacial $0 \leq x \leq L$. Primero, se precede para la amplitud de probabilidad a , primero calculando los cofactores asociados,

$$c_{13} = \begin{vmatrix} -P_1 + iP_2 & 0 & Q_1 - iQ_2 \\ 0 & -e^{i\alpha} & e^{-i\beta} \\ 0 & -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{vmatrix}, \quad (D-21)$$

$$= (-P_1 + iP_2)(P_1 + Q_1 + iP_2 - iQ_2)e^{-i\beta} e^{i\alpha}.$$

$$c_{23} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & -e^{i\alpha} & e^{-i\beta} \\ 0 & -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (-Q_1 + iQ_2)e^{-i\beta} \end{vmatrix}, \quad (D-22)$$

$$= (P_1 + Q_1 + iP_2 - iQ_2)e^{-i\beta} e^{i\alpha}.$$

Y usando las relaciones D-7, se llega al siguiente resultado para a , válido solo para el caso q_1 real,

$$\begin{aligned}
a &= \frac{-c_{13} + c_{23}(P_1 + iP_2)}{\det M}, \\
&= \frac{p_1 e^{-iLq_1} [p_1(E - V_0 + m) + q_1(E + m) - ip_2 V_0]}{(E + m) \{2p_1 q_1 \cos(q_1 L) + 2i(EV_0 - p_1^2) \sin(q_1 L)\}}
\end{aligned} \tag{D-23}$$

y si q_1 es imaginario,

$$a = \frac{p_1 e^{L\bar{q}_1} [p_1(E - V_0 + m) + i\bar{q}_1(E + m) - ip_2 V_0]}{(E + m) \{2ip_1 \bar{q}_1 \cosh(\bar{q}_1 L) - 2(EV_0 - p_1^2) \sinh(\bar{q}_1 L)\}}. \tag{D-24}$$

Finalmente, para b ,

$$\begin{aligned}
c_{14} &= \begin{vmatrix} -P_1 + iP_2 & 0 & -(Q_1 + iQ_2) \\ 0 & -e^{i\alpha} & e^{i\beta} \\ 0 & -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} \end{vmatrix}, \\
&= (-P_1 + iP_2)(P_1 - Q_1 + iP_2 - iQ_2)e^{i\beta} e^{i\alpha}.
\end{aligned} \tag{D-25}$$

$$\begin{aligned}
c_{24} &= \begin{vmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & -e^{i\alpha} & e^{i\beta} \\ 0 & -(P_1 + iP_2)e^{i\alpha} & (Q_1 + iQ_2)e^{i\beta} \end{vmatrix}, \\
&= (P_1 - Q_1 + iP_2 - iQ_2)e^{i\beta} e^{i\alpha}.
\end{aligned} \tag{D-26}$$

Llegando al siguiente resultado,

$$\begin{aligned}
b &= \frac{c_{14} - c_{24}(P_1 + iP_2)}{\det M}, \\
&= \frac{-p_1 e^{-iLq_1} [p_1(E - V_0 + m) - q_1(E + m) - ip_2 V_0]}{(E + m) \{2p_1 q_1 \cos(q_1 L) + 2i(EV_0 - p_1^2) \sin(q_1 L)\}}
\end{aligned} \tag{D-27}$$

y en el caso en que q_1 sea imaginario,

$$b = \frac{-p_1 e^{L\bar{q}_1} [p_1(E - V_0 + m) - i\bar{q}_1(E + m) - ip_2 V_0]}{(E + m) \{2ip_1 \bar{q}_1 \cosh(\bar{q}_1 L) - 2(EV_0 - p_1^2) \sinh(\bar{q}_1 L)\}}. \tag{D-28}$$

Apéndice E

Conservación de la probabilidad en el potencial barrera

En el estudio de la dispersión de fermiones sobre el paso de potencial, se ha demostrado que, en general, la probabilidad no se conserva para cualquier ángulo de incidencia. Ahora se presenta el mismo análisis para la barrera de potencial, y evaluando la suma del coeficiente de reflexión y el coeficiente de transmisión, se va a demostrar que se conserva la probabilidad para todos los ángulos de incidencia, en todas las condiciones impuestas por el potencial.

Partiendo de las ecuaciones (4-23) y (4-24), que representan los coeficientes de reflexión y transmisión en cada región de potencial,

$$R = \begin{cases} \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sin^2(q_1 L)}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sinh^2(\bar{q}_1 L)}{p_1^2 \bar{q}_1^2 \cosh^2(\bar{q}_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sinh^2(\bar{q}_1 L)}, & \text{si } E - m' \leq V_0 \leq E + m', \\ \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sin^2(q_1 L)}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, & \text{si } E + m' \leq V_0. \end{cases} \quad (\text{E-1})$$

$$T = \begin{cases} \frac{q_1^2 p_1^2}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, & \text{si } V_0 \leq E - m', \\ \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sinh^2(\bar{q}_1 L)}{p_1^2 \bar{q}_1^2 \cosh^2(\bar{q}_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sinh^2(\bar{q}_1 L)}, & \text{si } E - m' < V_0 < E + m', \\ \frac{q_1^2 p_1^2}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}, & \text{si } E + m' \leq V_0. \end{cases} \quad (\text{E-2})$$

Donde $m' = \sqrt{m^2 + p_2^2}$, y $\bar{q}_1 = |q_1| = |\sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 - p_2^2}|$. Cabe recordar que q_1 es real en las regiones de potencial $V_0 \leq E - m'$ y $E + m' \leq V_0$, e imaginario si $E - m' < V_0 < E + m'$. Se realizará ahora la suma de R y T , para el caso en que q_1 es real,

$$R + T = \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sin^2(q_1 L) + p_1^2 q_1^2}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}.$$

Manipulando el numerador de la anterior expresión se llega a

$$R + T = \frac{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + \{V_0^2(E^2 - p_1^2) + p_1^2 q_1^2\} \sin^2(q_1 L)}{p_1^2 q_1^2 \cos^2(q_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sin^2(q_1 L)}. \quad (\text{E-3})$$

De modo que si se prueba que los coeficientes que acompañan a $\sin^2(q_1 L)$ son iguales, se demuestra que $R + T = 1$. Operando uno de los dos coeficientes,

$$\begin{aligned} V_0^2(E^2 - p_1^2) + q_1^2 p_1^2 &= E^2 V_0^2 - p_1^2 V_0^2 + q_1^2 p_1^2 \\ &= E^2 V_0^2 + p_1^2 (q_1^2 - V_0^2). \end{aligned} \quad (\text{E-4})$$

Por otro lado, como la energía de los portadores de carga en cada región espacial es

$$\begin{aligned} E^2 - p_1^2 &= p_2^2 + m^2, \quad \text{si } x < 0, \\ (E - V_0)^2 - q_1^2 &= p_2^2 + m^2, \quad \text{si } x \geq 0. \end{aligned} \quad (\text{E-5})$$

Y a partir de la ecuación (E-5), es sencillo demostrar la siguiente relación,

$$q_1^2 - V_0^2 = p_1^2 - 2EV_0. \quad (\text{E-6})$$

Usando esta relación, la ecuación (E-4) cambia a,

$$\begin{aligned} V_0^2(E^2 - p_1^2) + q_1^2 p_1^2 &= E^2 V_0^2 + p_1^2 (p_1^2 - 2EV_0) \\ &= E^2 V_0^2 + p_1^4 - 2EV_0 p_1^2 \\ &= (EV_0 - p_1^2)^2. \end{aligned} \quad (\text{E-7})$$

Demostrando que $R + T = 1$, para q_1 real.

Ahora se estudia el caso donde q_1 es imaginario, que corresponde a la región de energía $E - m' < V_0 < E + m'$. Calculando directamente la suma de ambos coeficientes,

$$R + T = \frac{V_0^2(E^2 - p_1^2) \sinh^2(\bar{q}_1 L) + p_1^2 \bar{q}_1^2}{p_1^2 \bar{q}_1^2 \cosh^2(\bar{q}_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sinh^2(\bar{q}_1 L)}.$$

Usando las propiedades de las funciones hiperbólicas, se llega a,

$$R + T = \frac{p_1^2 \bar{q}_1^2 \cosh^2(\bar{q}_1 L) + \{V_0^2(E^2 - p_1^2) - p_1^2 \bar{q}_1^2\} \sinh^2(\bar{q}_1 L)}{p_1^2 \bar{q}_1^2 \cosh^2(\bar{q}_1 L) + (EV_0 - p_1^2)^2 \sinh^2(\bar{q}_1 L)}, \quad (\text{E-8})$$

así que, similarmente a cuando q_1 es real, se debe demostrar que los coeficientes que acompañan a $\sinh^2(\bar{q}_1 L)$ deben ser iguales. Se elige el coeficiente que acompaña al término $\sinh^2(\bar{q}_1 L)$ en el numerador,

$$V_0^2(E^2 - p_1^2) - p_1^2 \bar{q}_1^2 = E^2 V_0^2 + p_1^2 (-\bar{q}_1^2 - V_0^2). \quad (\text{E-9})$$

Sin embargo, teniendo en cuenta que $q_1 = i\bar{q}_1$, se concluye que $q_1^2 = -\bar{q}_1^2$. Reemplazando esto en la anterior expresión, y usando la ecuación (E-6), se concluye que

$$V_0^2(E^2 - p_1^2) - p_1^2\bar{q}_1^2 = (EV_0 - p_1^2)^2. \quad (\text{E-10})$$

De modo que también se conserva la probabilidad, al demostrar la relación $R + T = 1$ para q_1 imaginario.

Apéndice F

Gas de Fermi relativista en dos dimensiones para fermiones masivos

Con el objetivo de establecer una relación entre los resultados obtenidos para la dispersión de fermiones relativistas, descritos por la ecuación de Dirac, y un proceso de dispersión en una juntura del tipo npn para el grafeno monocapa con gap, se estudia el formalismo del gas de Fermi relativista, cuando los fermiones tienen masa distinta a cero. Con este análisis es posible plantear una conexión entre la energía de incidencia de los portadores de carga, el potencial, y la masa de los fermiones, para el problema de la paradoja de Klein en la ecuación de Dirac; y la densidad de portadores de carga y el gap de energía en el grafeno. En última instancia, es este formalismo el que permite relacionar un problema en mecánica cuántica relativista, con un sistema físico real en física del estado sólido.

Para mostrar la relación entre la concentración de los portadores de carga en el grafeno, y la energía con la que ellos inciden en el sistema bidimensional, es necesario estudiar el gas de Fermi en dos dimensiones cuando los fermiones, esta vez masivos, tienen energías relativistas de la forma $E = E_k + mc^2 = \sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}$, siendo E_k es la energía cinética y mc^2 es la energía en reposo de un fermión. Se considera que los portadores de carga no interactúan entre sí, y que como es sabido para el caso de partícula libre, están descritos a través de una función de onda plana. De manera análoga a como se realiza el estudio del gas de fermiones no relativista, se inicia describiendo el comportamiento de fermiones libres confinados en una caja.

F.1. Partículas libres confinadas en una caja

Una de las hipótesis inicialmente planteadas para describir el comportamiento de un gas de fermiones no relativista, es suponer que las partículas están confinadas en una caja, de lado L y volumen L^3 . A continuación se mostrará brevemente el formalismo para una partícula no relativista, descrita por la ecuación de Schrödinger, para luego compararlo con el caso relativista e identificar las diferencias más importantes.

El potencial que confina a las partículas dentro de la caja toma la siguiente forma,

$$V(x, y, z) = \begin{cases} \infty, & \text{si } \xi < 0, \\ 0, & \text{si } 0 \leq \xi \leq L, \\ \infty, & \text{si } L < \xi. \end{cases} \quad (\text{F-1})$$

Con ξ cualquiera de las variables x , y , z . De este modo, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es,

$$\left(\frac{p^2}{2m} - V(x, y, z) \right) \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z). \quad (\text{F-2})$$

Con $p = -i\hbar\nabla$ el operador de momento en representación de coordenadas. Dentro de la caja, los fermiones son libres, y entonces la función de onda está dada por la solución a la ecuación de Schrödinger libre,

$$\Psi(x, y, z) = Ne^{\frac{i}{\hbar}(p_1x+p_2y+p_3z)}. \quad (\text{F-3})$$

Siendo N un factor de normalización. Como las partículas están confinadas en una caja, se imponen condiciones de frontera periódicas para la función de onda [41, pag. 146], de la forma $\Psi(x=0, y, z) = \Psi(x=L, y, z)$, $\Psi(x, y=0, z) = \Psi(x, y=L, z)$, $\Psi(x, y, z=0) = \Psi(x, y, z=L)$. Estas condiciones de frontera implican que el momento en cada dirección del espacio se encuentra cuantizado [41, pag. 146],

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{2\pi\hbar}{L}l_1, \\ p_2 &= \frac{2\pi\hbar}{L}l_2, \\ p_3 &= \frac{2\pi\hbar}{L}l_3. \end{aligned} \quad (\text{F-4})$$

Con l_1 , l_2 y l_3 números enteros. Definiendo el vector de onda como $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, entonces

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(l_1, l_2, l_3). \quad (\text{F-5})$$

Finalmente la función de onda dentro de la caja se define a partir del vector de onda como sigue [41, pag. 147],

$$\Psi(\mathbf{r}) = Ne^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (\text{F-6})$$

Para finalizar con el análisis para una partícula no relativista, en el espacio de los vectores de onda, el volumen $(2\pi/L)^3$ contiene exactamente un solo estado cuántico [41, pag. 147], y por ende, la densidad de estados (ondas planas), que corresponde al número de estados por unidad de volumen en el espacio k , es

$$\frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{L^3}{8\pi^3}. \quad (\text{F-7})$$

Ahora, si se quiere hacer un análisis similar para un gas de Fermi relativista, en donde las partículas están descritas por la ecuación de Dirac, no se puede aplicar la simple condición de que las partículas están confinadas en una región del espacio, porque como

se ha demostrado múltiples veces, debido a la paradoja de Klein los fermiones pueden transmitirse a través de un potencial que tiende a infinito.

Para lograr confinar los fermiones en una región determinada, es necesario que la naturaleza del potencial sea distinta a la electromagnética. Cabe recordar que la interacción electromagnética, introducida a partir del cuadripotencial $A^\mu = (\Phi/c, \mathbf{A})$, modifica el cuadrimomento de la partícula del siguiente modo,

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - eA^\mu. \quad (\text{F-8})$$

Por otro lado, es posible introducir interacciones en el sistema diferentes a la electromagnética, y estas modifican de forma distintas a la ecuación de Dirac. En particular, una interacción de la forma [44]

$$m \rightarrow m + i\alpha_1 V(x) \quad (\text{F-9})$$

Con α_1 la matriz definida en la ecuación (2-2). Este tipo de interacción, que modifica la masa en la ecuación de Dirac, en vez del cuadrimomento, está ausente de paradoja de Klein [44], y por lo tanto puede confinar partículas [44]. Con este argumento se justifica que es posible confinar los fermiones en una región del espacio (aunque no mediante campos electromagnéticos), y por este motivo es posible realizar un análisis para partículas relativistas en una caja. Con esto en mente, y teniendo en cuenta que se van a aplicar los resultados obtenidos a la descripción del grafeno, se estudiará el problema de de fermiones descritos por la ecuación de Dirac confinados en un cuadrado (bidimensional) de área L^2 .

Dentro del cuadrado, los fermiones son libres y por ende están descritos por la función de onda libre,

$$\Psi(x, y, t) = \left[N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{cp_1 + icp_2}{E + mc^2} \end{pmatrix} + N' \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{cp_1 - icp_2}{E + m^2} \end{pmatrix} \right] e^{\frac{i}{\hbar}(p_1x + p_2y - Et)}. \quad (\text{F-10})$$

Donde se construye la función de onda como la superposición de las ondas con ambas proyecciones de espín. Las cantidades N y N' son constantes de normalización que no dependen ni de la posición ni del tiempo, debido a que no se considera interacción fermión-fermión. En este problema también se imponen condiciones de frontera periódicas para la función de onda,

$$\begin{aligned} \Psi(x = 0, y, t) &= \Psi(x = L, y, t), \\ \Psi(x, y = 0, t) &= \Psi(x, y = L, t). \end{aligned} \quad (\text{F-11})$$

Aplicando estas condiciones,

$$\begin{aligned}
& \left[N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{cp_1 + icp_2}{E + mc^2} \end{pmatrix} + N' \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{cp_1 - icp_2}{E + m^2} \end{pmatrix} \right] e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\
& = \left[N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{cp_1 + icp_2}{E + mc^2} \end{pmatrix} + N' \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{cp_1 - icp_2}{E + m^2} \end{pmatrix} \right] e^{\frac{i}{\hbar}(p_1L + p_2L - Et)}.
\end{aligned} \tag{F-12}$$

De estas condiciones se obtiene que

$$\begin{aligned}
N + N' &= (N + N') e^{\frac{i}{\hbar}p_1x} e^{\frac{i}{\hbar}p_2y}, \\
N \frac{cp_1 + icp_2}{E + mc^2} + N' \frac{cp_1 - icp_2}{E + mc^2} &= \left(N \frac{cp_1 + icp_2}{E + mc^2} + N' \frac{cp_1 - icp_2}{E + mc^2} \right) e^{\frac{i}{\hbar}p_1x} e^{\frac{i}{\hbar}p_2y}.
\end{aligned} \tag{F-13}$$

De lo cual se llega a la misma conclusión que en el caso no relativista, pero en dos dimensiones.

$$\begin{aligned}
p_1 &= \frac{2\pi\hbar}{L} l_1, \\
p_2 &= \frac{2\pi\hbar}{L} l_2.
\end{aligned} \tag{F-14}$$

Con l_1 y l_2 enteros. Se define el vector de onda de la misma forma que en el caso no relativista, $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$,

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} (l_1, l_2). \tag{F-15}$$

Esta relación implica que los estados posibles del sistema definen una red cuadrada de puntos en el espacio k , de tal modo que la distancia entre puntos más cercanos corresponde a $2\pi/L$. Como consideración final, se encontrará la densidad de estados de onda plana en el espacio del vector de onda. En la figura **F-1** se muestra que en una región de área $(2\pi/L)^2$, en el espacio k , hay contenido exactamente un estado de onda plana, y debido a ello la densidad de estados es,

$$\frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} = \frac{L^2}{4\pi^2}. \tag{F-16}$$

Que corresponde al número de estados por unidad de área en el espacio k . Si los estados cuánticos del sistema son degenerados, es necesario multiplicar la anterior cantidad por el degeneramiento g' .

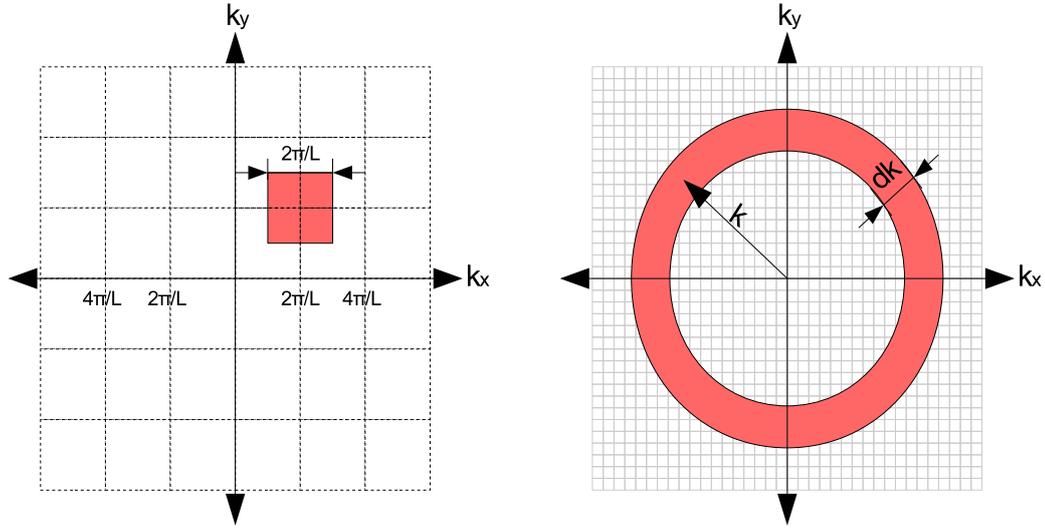


Figura **F-1**: Esquema del espacio k de dos dimensiones. A la izquierda, se muestra el espacio k y cada nodo de la red (punto de intersección de las líneas punteadas) corresponde a un estado de onda plana, dado por el vector de onda $\mathbf{k} = (2\pi/L)(l_1, l_2)$; la distancia mínima entre dos puntos es $2\pi/L$, y por ello el cuadrado rojo de área $(2\pi/L)^2$ contiene exactamente un estado de onda plana. A la derecha, se muestra que si L es muy grande, la red es muy fina, y por lo tanto en la región roja de área $2\pi k dk$ (dk tiende a cero) el número de estados contenidos allí corresponde a multiplicar dicha área por $1/(2\pi/L)^2$ [41, pag. 147], que es la densidad de estados en el espacio k .

F.2. Energía de Fermi en el gas de fermiones masivos relativista

A partir del hecho de la posibilidad del confinamiento de los fermiones relativistas en una región espacial, y una vez obtenida la densidad de estados en una región del espacio k , el paso siguiente es hallar el número de partículas en el sistema para un potencial químico dado. Como es conocido que el potencial químico corresponde a la energía de Fermi si $T = 0K$, en última instancia se obtendrá el número de partículas en el sistema en función de la energía de Fermi.

Como primer paso, se encontrará el número de estados del sistema en un diferencial de energía dE , que se define como $g(E)dE$. Si el área L^2 es suficientemente grande, la red de puntos en el espacio k es muy fina, y por ende se puede utilizar una aproximación de continuo, de tal modo que el número de estados en una región en el espacio k se calcula como su área multiplicada por la densidad [41, pag. 147], del siguiente modo:

$$g(E)dE = \left(\begin{array}{c} \text{Área correspondiente en el espacio } k, \\ \text{asociada a } dE \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \text{Densidad de estados} \\ \text{en el espacio } k \end{array} \right). \quad (\text{F-17})$$

Reemplazando cada término de la anterior ecuación se llega a lo siguiente,

$$g(E) dE = (2\pi k) \left(\frac{dk}{dE} dE \right) \left(\frac{g' A}{(2\pi)^2} \right), \quad (\text{F-18})$$

donde $2\pi k$ es el perímetro de una circunferencia de radio k en el espacio de los vectores de onda, $dk = \frac{dk}{dE} dE$ es el grosor de dicha circunferencia definida por un diferencial dE , de tal modo que el área corresponde al producto de las dos cantidades. Como los estados de onda plana son degenerados, se multiplica la densidad de estados por el degeneramiento g' de los fermiones, que en principio correspondería a 2 si se considera solamente el degeneramiento de espín, sin embargo, como se pretende describir el comportamiento de los portadores de carga en el grafeno, la estructura misma del material induce nuevos degeneramientos.

La relación de dispersión en el caso estudiado corresponde a

$$E = \sqrt{c^2 \hbar^2 k^2 + m^2 c^4}, \quad (\text{F-19})$$

entonces,

$$\frac{dk}{dE} = \frac{E}{c^2 \hbar^2 k}. \quad (\text{F-20})$$

Reemplazando la ecuación (F-20) en la ecuación (F-18), se llega a,

$$g(E) dE = \frac{g' A}{2\pi \hbar^2 c^2} E dE. \quad (\text{F-21})$$

Para encontrar el número de fermiones N en el sistema para un potencial químico μ dado, se multiplica el anterior número de estados por el número esperado de fermiones en un nivel de energía, que corresponde a la distribución de Fermi-Dirac, y se integra en toda la región de energías,

$$N(\mu) = \int_{mc^2}^{\infty} g(E) f(E) dE = \int_{mc^2}^{\infty} \frac{g(E)}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} dE. \quad (\text{F-22})$$

En la ecuación (F-22) se ha tenido en cuenta que la energía mínima de un fermión corresponde a la energía en reposo. Para tener en cuenta correctamente la energía en reposo en la distribución de Fermi-Dirac, es definiendo un nuevo potencial químico de la siguiente forma [45],

$$\bar{\mu} = \mu - mc^2. \quad (\text{F-23})$$

Esto modifica la distribución de Fermi-Dirac como sigue,

$$f(E, \mu) = \frac{1}{e^{(E-mc^2-\bar{\mu})/k_B T} + 1} \quad (\text{F-24})$$

Para simplificar el problema, se considera que el sistema se encuentra en una temperatura $T = 0\text{K}$ (para ser rigurosos, muy cercana a ella), así que para este caso, la distribución de Fermi es igual a una función de tipo paso $1 - \Theta(E - mc^2 - \bar{\mu})$ (esto es, toma valor 1 si $E - mc^2 < \bar{\mu}$, y 0 de otro modo)[41]. En $T = 0\text{K}$, el número total de partículas es,

$$N = \int_{mc^2}^{E_F+mc^2} g(E) dE = \frac{g' A}{2\pi\hbar^2 c^2} \int_{mc^2}^{E_F+mc^2} E dE, \quad (\text{F-25})$$

donde E_F se define como *la energía de Fermi*, y corresponde al valor que toma el potencial químico modificado $\bar{\mu}$ cuando $T = 0\text{K}$ [41]. El límite superior de la integral se encuentra conociendo que la función paso toma valor 1 cuando se cumple condición $E - mc^2 < E_F$, o equivalentemente, $E < E_F + mc^2$.

Al calcular explícitamente la ecuación (F-25), se encuentra que

$$N = \left(\frac{g' A}{4\pi\hbar^2 c^2} \right) ((E_F + mc^2)^2 - m^2 c^4). \quad (\text{F-26})$$

Despejando la energía de Fermi, se llega finalmente a,

$$E_F = \left(\frac{4\pi\hbar^2 c^2}{g'} n + m^2 c^4 \right)^{1/2} - mc^2, \quad (\text{F-27})$$

siendo $n = N/A$ la densidad de fermiones por unidad de área. Con este formalismo se ha encontrado la dependencia de la energía de Fermi con la densidad de fermiones por unidad de área en el sistema, así como de la masa m del fermión. Este resultado es importante porque la energía de Fermi corresponde a la energía del estado electrónico más energético del sistema [42, pag. 28], de modo que los portadores de carga en menores estados energéticos no pueden interactuar en el sistema, y por lo tanto, la energía de incidencia y el potencial (en el problema de la paradoja de Klein) se definen a partir de la energía de Fermi.

Bibliografía

- [1] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A, **117** 610 (1928).
- [2] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A, **126** 360 (1930).
- [3] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A, **133** 2 (1931).
- [4] C. D. Anderson, Phys. Rev **43** 491-494 (1933).
- [5] O. Klein, Z. Phys. **53** 157 (1929).
- [6] F. Sauter, Zeitschrift für Physik, **69** 742-764 (1931).
- [7] F. Hund, Z. Phys. **117** 1 (1941).
- [8] A. Hansel, F. Ravndal, Physica Scripta, **23** 1033 (1981)
- [9] W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations*, third edition, Springer, 2000.
- [10] J. D. Bjorken, S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, Inc.,
- [11] Ru-Keng Su, G. G. Siu, Xiu Chou, J.Phys.A **26** 1001 (1993)
- [12] P. Krekora, Q. Su, R. Grobe, Phys. Rev. A. **70** 054101 (2004).
- [13] S. De Leo y P. Rotelli, Eur. Phys. J. C. **63** 157-162 (2009).
- [14] S. De Leo, P. P. Rotelli, Phys. Rev. A. **73** 042107 (2006).
- [15] S. De Leo, P. Rotelli, Phys. Rev. A. **86** 032113 (2012).
- [16] D. Bosanac, J. Phys. A. **40** 8991-9001 (2007).
- [17] A. Calogeracos, N. Dombey, *History and Physics of The Klein Paradox*. preprint <http://arxiv.org/pdf/quant-ph/9905076.pdf>
- [18] A. Calogeracos, N. Dombey, Int. J. Mod. Phys. A. **14** 4 631-643 (1999).
- [19] W. Greiner, B. Müller, and J. Rafelski, *Quantum Electrodynamics of Strong Fields* Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [20] H. Nitta, T. Kudo, and H. Minowa, Am. J. Phys. **67**, 966 (1999).
- [21] P. Krekora, Q. Su, R. Grobe, Phys. Rev. A. **72** 064103 (2005).

- [22] P. Krekora, Q. Su, R. Grove, Phys. Rev. Lett. **92** 040406 (2004).
- [23] Novoselov K. S. Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. Science **306** 666 (2004)
- [24] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, Nature **438**, 197-200 (2005)
- [25] M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov y A.K. Geim, Nature Phys **2** 620 (2006).
- [26] M.R Setare, D. Jahani, PhysicaB **405** 1433-1436 (2010).
- [27] A. F. Young, P. Kim, Nature Phys. **5** 222 (2009).
- [28] N. Stander, B. Huard, D. Goldhaber-Gordon, Phys. Rev. Lett. **102** 026807 (2009).
- [29] G. Beidou, F. Liang, Z. Baohong, R. G Jian. Insciences J. **1** 80-89 (2011).
- [30] S.Y. Zhou, *et al.* Nat. Mater. **6** 770-775 (2007).
- [31] L. S. Panchakarla, K. S. Subrahmanyam, S. K. Saha, Adv. Mater. **21** 4726-4730 (2009).
- [32] D. C. Wei, *et. al.* Nano. Lett. **9** 1752-1758 (2009).
- [33] T. R. Robinson, Am. J. Phys **80** 149 (2012).
- [34] H. Terrones, R. Lv, M. Terrones, M. S. Dresselhaus, Rep. Prog. Phys. **75** 062501 (2012).
- [35] G. W. Ludwig, R. L. Watters, Phys. Rev. **101** 1699 (1956)
- [36] M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in two dimensions.* preprint <http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0612534v1.pdf>.
- [37] P. R. Wallace, Phys. Rev. **71** 622 (1947).
- [38] Y. Zhang, Y. W. Tan, H. L Stormer, P. Kim, Nature **438** 201-204 (2005).
- [39] D. P. DiVincenzo, E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **29** 1685 (1984).
- [40] B. Guo, L. Fang, B. Zhang, J. R. Gong, *Inciences J.*, **1** 80-89 (2011).
- [41] J. P. Sethna, *Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters and Complexity*, Oxford University Press, 2006.
- [42] S. H. Simon, *The Oxford Solid State Basics*, Oxford University Press, 2013.
- [43] Novoselov K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Science* **306** 666-669 (2004)
- [44] F. Dominguez-Adame, Phys. Lett. A., **162** 18-20 (1992).
- [45] A. Brown, *Some notes on the ideal fermion gas*, (2010). Notas no publicadas de la Universidad de Leiden. enlace <http://home.strw.leidenuniv.nl/nefs/FermionGas.pdf>

- [46] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81** 109 (2009)
- [47] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.*, **83** 407-470 (2011).
- [48] G. W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53** 2449-2452 (1984).
- [49] H. Raza, E. C. Kan, *Phys. Rev. B*, **77**(24), 245434 (2008).